"Parametrizações otimais de trajetórias adiabáticas em sistemas quânticos dissipativos."

### Universidade de São Paulo Instituto de Física

### "Parametrizações otimais de trajetórias adiabáticas em sistemas quânticos dissipativos."

Marcela Muniz Gontijo

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientador: Prof. João Carlos Alves Barata

Comissão Examinadora: Prof. Dr. João Carlos Alves Barata - IFUSP Prof. Dr. Paulo Teotônio Sobrinho- IFUSP Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Maria Carolina Nemes - UFMG

> São Paulo 2012

#### Ficha Catalográfica

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do Instituto de Física da Universidade de São Paulo Gontijo, Marcela Muniz

Parametizações otimais de trajetórias adiabáticas em sistemas quânticos dissipativos - São Paulo, 2012

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo Instituto de Física, Depto. Física Matemática

Orientador: Prof. Dr. João Carlos Alves Barata

Área de Concentração: Métodos Matemáticos da Física

Unitermos: 1. Sistema Quântico; 2. Informação Quântica; 3. Física Matemática.

USP/IF/SBI-029/2012

4

### Agradecimentos

À minha mãe, minha constante inspiração e a quem devo tudo que sou e que virei a ser.

Ao Prof. João Carlos Alves Barata, pela orientação cuidadosa e sempre paciente, assim como pela clareza quando muito parecia obscuro.

Aos amigos Caio Prado, Kazuo Teramoto e felizmente muitos outros, pela amizade e pela ajuda que veio em diversas formas. Ao Bruno Serminaro, pelo carinho e apoio.

À equipe da Comissão de Pós-Graduação do IFUSP, sempre solícita e compreensiva.

À CNPq pelo auxílio financeiro.

### Resumo

Sistemas quânticos cuja dinâmica é não-unitária e que evoluem adiabaticamente apresentam características únicas com aplicações no campo da computação quântica. Estudamos nessa dissertação o formalismo de sistemas quânticos abertos, a teoria de semigrupos dinâmicos e os chamados operadores de Lindblad. Enunciamos e provamos o teorema adiabático na formulação de T. Kato a fim de entender a idéia e o formalismo por trás de regimes adiabáticos. Utilizamos essas ferramentas para descrever o problema de otimização de trajetórias adiabáticas em sistemas quânticos dissipativos (cuja dinâmica é dada por uma classe de operadores de Lindblad) e, seguindo as indicações de Avron et al. [8], obtemos as condições para que essa otimização seja única e aplicamos esse resultado em algoritmos quânticos de busca.

### Abstract

Quantum systems undergoing non-unitary adiabatic evolution present unique characteristics with applications in the field of Quantum Computation. In this dissertation, we study the formalism of quantum open systems, the theory of dynamical semigroups and Lindblad operators. We enunciate and prove the adiabatic theorem as formulated by T. Kato in order to understand the main idea and formalism behind adiabatic evolutions. We use these results to describe the optimization problem of adiabatic paths in dispersive quantum systems (whose dynamics is given by a class of Lindblad operators) and, following the outline designed by Avron et al. [8], we obtain the conditions so that this optimization is unique and we apply this result in quantum search algorithms.

## Sumário

Su	mári	0	vii			
1	Introdução					
2	Sistemas Quânticos Abertos					
	2.1	Dinâmica Hamiltoniana	6			
	2.2	Semigrupos Uniparamétricos de Operadores Lineares	8			
	2.3	Semigrupos Dinâmicos	10			
3	Teo	rema Adiabático	25			
	3.1	Transformação Dinâmica	26			
	3.2	Transformação Adiabática	27			
	3.3	Equivalência das transformações dinâmica e adiabática quando				
		$ au  ightarrow \infty$	29			
	3.4	Teorema Adiabático sem condição de lacuna	32			
4	Otimização de trajetórias adiabáticas					
	4.1	Parametrização em sistemas de dois níveis	36			
	4.2	Operadores de Lindblad de defasagem	39			
	4.3	Aplicação em computação quântica: Algoritmo de Grover	46			
Co	onclu	são	53			
Gl	ossá	rio	55			
Ín	dice	Remissivo	59			
Re	eferêr	ncias Bibliográficas	61			

# Capítulo 1 Introdução

O controle de sistemas quânticos é uma área de interesse desde o advento da Mecânica Quântica. Historicamente a teoria de controle quântico foi explorada pela área da química quântica, cujo interesse maior era manipular reações químicas a fim de obter o resultado desejado [49]. Posteriormente muitos outros trabalhos foram publicados explorando diversas técnicas de controle em moléculas complexas ([51], [59] e outros trabalhos aí citados). A teoria de controle quântico apresenta também aplicações na física atômica e molecular e ótica quântica, por exemplo em transferência de população em átomos induzida por laser ([16] entre outros). Uma área relativamente nova que apresenta grandes aplicações para teoria de controle quântico é a computação quântica e informação quântica.

Analogamente aos bits de computadores clássicos, o qubit é a unidade de informação de um computador quântico. Um algoritmo quântico consiste em uma série de operações aplicadas em um estado inicial de qubits e que, após um número suficiente de operações, resulta no estado final que é a solução do problema proposto. A aplicação de teoria de controle quântico em computação quântica consiste em otimizar o processo que leva o estado inicial no estado final. Esse processo pode ser regido por evoluções unitárias [24] ou evoluções não-unitárias. Para o último caso foi proposto uma nova abordagem denominada modelo adiabático para computação quântica. Introduzido por Farhi et al. [29], esse modelo assume que o regime de evolução do qubit é adiabático. A vantagem desse tipo de regime é que o teorema adiabático garante que o estado instantâneo do sistema é o estado correspondente ao estado inicial, isto é, se o sistema está inicialmente no estado fundamental, num instante posterior ele permanecerá no estado fundamental instântaneo. Por exemplo, suponhamos que a dinâmica do sistema é dada por uma hamiltoniana dependente do tempo e que podemos construí-la a partir de uma parametrização q(s) em função do parâmetro temporal adiabático s no

espaço das hamiltonianas:

$$H_q(s) = (1 - q(s))H_0 + q(s)H_1, \quad q \in [0, 1],$$

de forma que o estado fundamental de  $H_0$  (hamiltoniana inicial) seja de fácil construção e o estado fundamental de  $H_1$  (hamiltoniana final) é o estado-alvo. Queremos então parametrizar q(s) de forma que a trajetória no espaço das hamiltonianas leve o estado fundamental de  $H_0$  no estado fundamental de  $H_1$  de forma otimizada (a trajetória otimal será definida a seguir).

Esse novo paradigma na implementação de algoritmos quânticos já possui aplicações em diversos problemas ([28] [27], [20]) e despertou grande interesse ([3], [25], [36]). Mas além de ter o controle da evolução do qubit, queremos que o tempo para que o sistema atinja o estado-alvo seja mínimo e com maior precisão possível, isto é, para um determinado intervalo de tempo queremos que o tunelamento seja o menor possível. Foi demonstrado por Avron et al. [8] que para evoluções unitárias a parametrização ótima da trajetória da hamiltoniana (denotada aqui por *q*) não é única, mas que para evoluções não-unitárias dadas por operadores de Lindblad de defasagem é.

A definição de operadores de Lindblad vem do estudo de semigrupos dinâmicos, que por sua vez se originou no contexto de sistemas quânticos abertos. A dinâmica de um sistema quântico fechado é representada por um grupo de transformações unitárias, já a dinâmica de sistemas quânticos abertos é dada por semigrupos, onde a irreversibilidade dos processos físicos é representada pela não-existência do elemento inverso. A teoria de semigrupos é fundamentada no teorema de Hille-Yosida [35] [60] que caracteriza geradores de semigrupos. Posteriormente, com os trabalhos de Lindblad [44] e Gorini et al. [33] foi definida a noção de semigrupos dinâmicos e foi obtida uma forma explícita para geradores de semigrupos dinâmicos.

O objetivo desse trabalho é a familiarização com o formalismo de semigrupos dinâmicos, regimes adiabáticos e a aplicação desses conceitos na dinâmica de um sistema quântico simples cuja evolução é não-unitária. Ao final derivamos as condições necessárias para que a otimização da parametrização da hamiltoniana desses sistemas seja única e aplicamos os resultados em uma analogia ao algoritmo de busca de Grover, seguindo as indicações de Avron et al. [8].

A organização dessa dissertação é a seguinte:

 no capítulo 2 estabelecemos o formalismo da Mecânica Quântica para sistemas fechados, depois enunciamos o teorema de Hille-Yosida que caracteriza geradores de semigrupos. Em seguida definimos semigrupos dinâmicos, discutimos a condição de positividade completa para transformações que representam processos em um sistema composto por um sistema aberto e um reservatório. Posteriormente, com o auxílio de diversos teoremas referentes a transformações completamente positivas (teorema de Choi, de Stinespring, de Kraus), enunciamos e provamos o teorema de Gorini-Kossakowski-Lindblad–Sudarshan, que apresenta a forma explícita para geradores de semigrupos dinâmicos. Provamos esse último teorema para o caso de álgebras de matrizes com dimensão finita, uma vez que o interesse é aplicá-lo a sistemas quânticos simples, como sistemas de dois níveis;

- no capítulo 3 comentamos a evolução dos teoremas adiabáticos na Mecânica Quântica e suas diversas formulações. Enunciamos e provamos o teorema adiabático apresentado por Kato [38], escolhemos essa formulação pois é uma formulação simples na qual é fácil entender o conceito de evolução adiabática, assim como o formalismo por trás da aproximação entre transformações adiabática e dinâmica e onde a condição de lacuna no espectro da hamiltoniana desempenha um papel importante. Teoremas adiabáticos com condição de lacuna possuem diversas formulações, no entanto a idéia não difere do teorema apresentado por Kato. Uma abordagem diferente é o teorema adiabático sem condição de lacuna, apresentado por Avron et al. [6]. Apenas enunciamos esse resultado, uma vez que as aplicações de regime adiabático nesse trabalho contemplam sistemas que apresentam a condição de lacuna;
- no capítulo 4, seguindo as indicações de Avron et al. [8], definimos tunelamento, discutimos otimização de trajetórias para evoluções unitárias e mostramos que nesse caso não existe uma solução única. Depois definimos operadores de Lindblad de defasagem, sistemas quânticos dissipativos e a partir da expressão de tunelamento mostramos que para a evolução desses sistemas a parametrização otimal é única. Além disso calculamos explicitamente o tunelamento para um sistema quântico dissipativo de dois níveis. Em uma analogia ao algoritmo de busca de Grover, utilizamos o resultado anterior para estimar o tempo ótimo para esse algoritmo e mostramos que o tempo de Grover impõe um limite na defasagem do sistema.
- essa dissertação apresenta um glossário e índice remissivo. O primeiro apresenta alguns termos específicos, especialmente de Análise Funcional, e suas respectivas definições e símbolos (quando houver). O índice remissivo cumpre sua função usual: remeter o leitor à página na qual o termo procurado é utilizado.

### Capítulo 2

### Sistemas Quânticos Abertos

O começo da Mecânica Quântica data da segunda metade do século XIX com o problema da radiação do corpo negro, no entanto somente no século XX uma formulação matemática para a Mecânica Quântica foi realizada por, entre outros, E. Schrödinger, W. Heisenberg, M. Born, P. Dirac e J. von Neumann. O último publicou em 1932 o livro *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* [57] no qual desenvolveu uma descrição matematicamente rigorosa da Mecânica Quântica utilizando ferramentas da Análise Funcional. Esse formalismo pode ser brevemente descrito da seguinte maneira: todo sistema quântico pode ser relacionado a um espaço de Hilbert separável no qual agem operadores auto-adjuntos que, por sua vez, estão relacionamos aos observáveis do sistema. A dinâmica desse sistema quântico é descrita por um operador auto-adjunto denominado hamiltoniana.

Os processos que ocorrem em sistemas quânticos fechados são descritos por operadores que formam um grupo de transformações unitárias, logo existe o elemento inverso que está associado à reversibilidade dos processos desse sistema. Em sistemas quânticos abertos não é possível garantir a reversibilidade dos processos, então para descrever esses sistemas foi emprestada da Mecânica Estatística o conceito de reservatório, de forma que o sistema e o reservatório compõe um sistema fechado e sua dinâmica pode ser descrita por uma evolução hamiltoniana. Os processos que ocorrem apenas no sistema quântico aberto não estão relacionados a um grupo de transformações unitárias, mas sim a um semigrupo. A teoria de semigrupos é fundamentada sobretudo no teorema de Hille-Yosida e nos trabalhos sobre geradores de semigrupos dinâmicos. Publicado independentemente por K. Yosida e E. Hille [60] [35] em 1949, o teorema de Hille-Yosida caracteriza os geradores de semigrupos uniparamétricos fortemente contínuos em um espaço de Banach. Motivados pelo estudo de ótica quântica, especialmente lasers, a teoria de sistemas quânticos abertos ganhou novo interesse quase trinta anos após a publicação de Hille e Yosida, com os trabalhos de G. Lindblad [44] e Gorini

et al. [33] nos quais a forma dos geradores de semigrupos dinâmicos foi estabelecida, assim como muitos aspectos matemáticos da teoria.

Primeiramente vamos estabelecer o formalismo da Mecânica Quântica para sistemas fechados para posteriormente introduzir alguns tópicos para o estudo de sistemas quânticos abertos, tais como semigrupos uniparamétricos de operadores lineares fortemente contínuos, teorema de Hille-Yosida e geradores de semigrupos dinâmicos.

#### 2.1 Dinâmica Hamiltoniana

A formulação matemática da Mecânica Quântica estabelece que cada sistema físico está associado a um espaço de Hilbert separável  $\mathcal{H}$  e que observáveis são representados por operadores auto-adjuntos em  $\mathcal{H}$ . Além disso, medidas dos observáveis são elementos do espectro desses operadores. Para o caso discreto, o teorema espectral [52] nos permite escrever um operador A auto-adjunto na forma

$$A = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \lambda P_{\lambda}, \tag{2.1.1}$$

onde  $\sigma(A)$  é o espectro de *A* e *P*<sub> $\lambda$ </sub> é o projetor associado ao autovalor  $\lambda$ .

Os estados de um sistema físico por sua vez são representados por *operadores densidade* denotados por  $\rho$ . Antes de definir o operador densidade, é útil definir a classe da operadores da qual eles fazem parte.

**Definição 2.1.1.** Seja *A* um operador limitado em um espaço de Hilbert separável, isto é,  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Dizemos que *A* é um operador de classe traço se a série  $\sum_{n=1}^{\infty} \langle \varphi_n, |A|\varphi_n \rangle$  for convergente para uma base ortonormal completa  $\{\varphi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ , onde  $|A| := \sqrt{A^*A}$ . O conjunto de todos os operadores de classe traço agindo em um espaço de Hilbert é denotado por  $\mathcal{T}^1(\mathcal{H})$  e forma um espaço de Banach com norma dada por

$$\|A\|_{1} := \sum_{n=1}^{\infty} \langle \varphi_{n}, |A|\varphi_{n} \rangle, \qquad (2.1.2)$$

e independe da base ortonormal completa escolhida.

Além disso,  $\mathscr{T}^1(\mathcal{H})$  é um \*-bi-ideal de  $\mathscr{B}(\mathcal{H})$  [52].

**Definição 2.1.2.** Um operador  $\rho \in \mathscr{T}^1(\mathcal{H})$ , positivo e com traço 1 é dito ser um operador densidade. O conjunto dos operadores densidade é denotado por  $V^+(\mathcal{H})$ , também chamado de espaço de estados de  $\mathcal{H}$ .

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>A expressão para o traço independe da base ortonormal completa escolhida [52].

#### 2.1. DINÂMICA HAMILTONIANA

A descrição de medidas de observáveis no formalismo aqui apresentado foi introduzida inicialmente por J. von Neumann [57] e L. Landau [43]. O valor médio associado a medida de um observável *A* é dada por [11]

$$\langle A \rangle = \operatorname{tr}(\rho A). \tag{2.1.3}$$

No caso de um sistema composto, o espaço de Hilbert é o produto tensorial dos espaços correspondentes a cada componente do sistema. Consideremos duas componentes cujos espaços de Hilbert e operadores densidade são respectivamente  $\mathcal{H}_1$ ,  $\mathcal{H}_2$  e  $\rho_1$ ,  $\rho_2$ , então o espaço de Hilbert associado ao sistema total é  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Se nos restringirmos somente a observáveis no sistema 1,  $A_1 \otimes \mathbb{1}_2$ , a medida de  $A_1$  tomada no sistema composto  $\rho_{12}$  e no sistema reduzido  $\rho_1$  devem ser consistentes, isto é,

$$\operatorname{tr}(\rho_{12}A_1\otimes \mathbb{1}_2) = \operatorname{tr}(\rho_1A_1),$$

para que isso ocorra definimos o traço parcial dado por:

$$\rho_1 = \operatorname{tr}_2(\rho_{12}). \tag{2.1.4}$$

Se considerarmos os operadores de classe traço em um espaço de Hilbert, denotados por  $\mathscr{T}^1(\mathfrak{H})$ , o traço parcial é um mapeamento do tipo tr<sub>1</sub> :  $\mathscr{T}^1(\mathfrak{H}_1) \otimes \mathscr{T}^1(\mathfrak{H}_2) \to \mathscr{T}^1(\mathfrak{H}_2)$  e pode ser definido por [5]

$$\operatorname{tr}_1(A \otimes B) = \operatorname{tr}(A)B, \qquad (2.1.5)$$

onde  $A \in \mathscr{T}^1(\mathfrak{H}_1)$  e  $B \in \mathscr{T}^1(\mathfrak{H}_2)$  e pode ser estendido linearmente para todo elemento de  $\mathscr{T}^1(\mathfrak{H}_1) \otimes \mathscr{T}^1(\mathfrak{H}_2)$ .

A dinâmica de um sistema quântico pode ser descrita por duas abordagens diferentes: a descrição de Schrödinger, na qual os vetores de estado evoluem no tempo e os operadores permanecem constantes, e a descrição de Heisenberg, na qual os operadores evoluem e os vetores de estado não. A evolução de um operador *A* em um sistema quântico fechado na descrição de Heisenberg é dada por [45]

$$\frac{d}{dt}A(t) = i[H, A(t)] + \left(\frac{\partial}{\partial t}A\right)(t), \qquad (2.1.6)$$

onde *H* é um operador auto-adjunto denominado hamiltoniana. Escolhendo um operador U(t) tal que  $A(t) = U(t)A(0)U^{-1}(t)$ , ou seja, U(t) desempenha o papel de um operador de evolução temporal. É possível provar que U(t) forma um grupo uniparamétrico de operadores unitários fortemente contínuos, isto é,

(i) 
$$U(0) = 1$$
,

(ii) 
$$U(s)U(t) = U(s+t)$$
,  $s, t \in \mathbb{R}$ ,

(iii) 
$$U^{-1}(t) = U^*(t), \quad t \in \mathbb{R},$$

(iv) 
$$s - \lim_{t \to t_0} U(t)x = U(t_0)x$$
,  $x \in \mathcal{H}$ ,  $t, t_0 \in \mathbb{R}$ ,

onde s – lim denota o limite forte. De acordo com o teorema de Stone [52] existe, sob essas hipóteses, um único operador auto-adjunto H tal que

$$U = \exp(itH), \quad t \in \mathbb{R}. \tag{2.1.7}$$

A recíproca também é verdadeira e *iH* é denominado o gerador infinitesimal de  $\{U_t\}$ . A expressão em 2.1.7 é solução de uma equação similar a eq. (2.1.6) na página anterior para  $\rho$  quando este não depende explicitamente do tempo:

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H,\rho]. \tag{2.1.8}$$

No entanto, quando consideramos sistemas quânticos abertos os processos não podem ser descritos por grupos de tranformações unitárias, pois isso implicaria em reversibilidade dos processos físicos. Neste caso consideramos que os processos são representados por semigrupos uniparamétricos de operadores lineares fortemente contínuos, uma generalização da noção de grupo sem o conceito de elemento inverso. Os geradores desses semigrupos são caracterizados pelo teorema de Hille-Yosida e sua forma explícita foi derivada posteriormente por Lindblad e Gorini et al.

### 2.2 Semigrupos Uniparamétricos de Operadores Lineares

A importância matemática de semigrupos uniparamétricos fortemente contínuos baseia-se no estudo de equações diferenciais ordinárias. Esses semigrupos desempenham um papel análogo ao da função exponencial como solução de equações diferenciais ordinárias com coeficientes constantes, porém generalizados para um espaço de Banach. Também chamados de semigrupos  $C_0$ , são definidos a seguir [61].

**Definição 2.2.1.** Seja  $\mathcal{B}$  um espaço de Banach complexo. Um semigrupo uniparamétrico fortemente contínuo em  $\mathcal{B}$  é uma família  $\{T_t\}$  de operadores lineares em  $\mathcal{B}$  parametrizadas por  $0 \le t < \infty$  e que satisfaz

- (i)  $T_0 = 1$ ,
- (ii)  $T_sT_t = T_{s+t}$  para  $s, t \ge 0$ ,
- (iii)  $\lim_{t\to 0} ||T_t x x|| = 0$  para todo  $x \in \mathcal{B}$ .

#### 2.2. SEMIGRUPOS UNIPARAMÉTRICOS DE OPERADORES LINEARES 9

Os dois primeiros axiomas são de caráter algébrico, o último por sua vez é de caráter topológico. O teorema de Hille-Yosida caracteriza o gerador do semigrupos. Apresentaremos aqui a formulação de Yosida [60]:

**Teorema 2.2.1.** Seja  $\{T_t\}$  um semigrupo uniparamétrico de operadores lineares de um espaço de Banach  $\mathcal{B}$  em  $\mathcal{B}$  e ainda  $\sup_t ||T_t|| \leq 1$ . Seja D o conjunto de  $x \in \mathcal{B}$ tais que o limite fraco  $w - \lim_{h\to 0} h^{-1}(T_h - 1)x$  existe. Define-se A como

$$Ax = w - \lim_{h \to 0} h^{-1} (T_h - 1) x, \qquad (2.2.1)$$

então  $D \equiv D(A)$  é denso em B, Além disso A é um operador fechado e aditivo de D em B com as propriedades

para qualquer 
$$x \in D$$
,  $\lim_{h \to 0} h^{-1} (T_{t+h} - T_t) = AT_t x = T_t A x.$  (2.2.2)

*Além disso, existe uma sequência de operadores lineares*  $\{I_n\}$  *que comuta com todo*  $T_t$  *e com A tal que* 

(*i*) 
$$AI_n = n(I_n - 1),$$

(*ii*)  $||I_n|| \leq 1$ ,  $\lim_{n\to\infty} I_n x = x$ ,

(iii)

$$T_{t}x = \lim_{n \to \infty} \exp(tAI_{n})x = \lim_{n \to \infty} \sum_{m=0}^{\infty} (m!)^{-1} (tAI_{n})^{m} x$$
(2.2.3)

uniformemente para t em qualquer intervalo finito. Então, é possível provar que

$$\|(A - n\mathbb{1})x\| \ge n \|x\|, n = 1, 2, \dots, \text{ para } x \in D$$
  
e Range  $(A - n\mathbb{1})$  coincide com  $\mathcal{B}(n = 1, 2, \dots).$  (2.2.4)

e se  $y_n$  é solução única de  $(A - n\mathbb{1})y_n = y, n = 1, 2, ...$  então

$$\lim_{n \to \infty} A(-ny_n) = \lim_{(\to \infty} -n(y + ny_n)) = Ay \forall y \in D.$$
 (2.2.5)

A estratégia para provar o teorema é definir  $C_n x := \int_0^\infty n e^{-ns} T_s x ds$ , depois provar que  $C_n$  é denso em  $\mathcal{B}$  e satisfaz as condições para representar a família de operadores lineares  $\{I_n\}$ . Utilizando essa representação prova-se o limite na topologia forte da eq. (2.2.2) e o fechamento de A, assim como a forma análoga à expansão de Taylor da eq. (2.2.3), uma vez que não é possível expandir  $\exp(tA)$  pois A é um operador não-limitado. A recíproca do teorema anterior é apresentado abaixo. **Teorema 2.2.2.** Seja A um operador aditivo de um subconjunto denso D em  $\mathcal{B}$  e que satisfaz 2.2.4 e 2.2.5, então existe um semigrupo uniparamétrico fortemente contínuo  $T_t$  que satisfaz 2.2.1 e 2.2.2.

Novamente escolhemos um operador  $J_n$  da forma  $J_n y = -ny_n$ , n = 1, 2, ...e  $||J_n|| \le 1$  que satisfaz 2.2.4 e 2.2.5, depois definimos  $T_t^{(n)} = \exp(tAJ_n)$  e verificamos que quando  $n \to \infty$  os operadores  $T_t^{(n)}$  convergem a  $T_t$ .

### 2.3 Semigrupos Dinâmicos

A dinâmica de um sistema físico fechado de acordo com o formalismo da Mecânica Quântica foi descrito na Seção 2.1, entretanto como já foi discutido, essa descrição dificulta a representação matemática de processos irreversíveis. Para introduzir comportamento irreversível em sistemas quânticos foi emprestada a idéia da Mecânica Estatística de um sistema interagindo com um reservatório.

Consideremos um sistema aberto *S* e um sistema *R* suficientemente grande, isto é, com suficientes graus de liberdade. Vamos admitir que o sistema S + R forma um sistema quântico fechado e os processos que ocorrem nesse sistema são representados por grupos de transformações unitárias. Espera-se que a dinâmica de *S* seja descrita por semigrupos uniparamétricos.

Inúmeros sistemas físicos podem ser descritos por uma equação mestra. Tal equação é uma equação diferencial, em geral linear, que descreve a evolução (Markoviana) da distribuição de probabilidade que representa o estado de um sistema físico. A equação mestra para o operador de densidade de um sistema quântico é:

$$\frac{d}{dt}\rho = \mathscr{L}\rho, \qquad (2.3.1)$$

onde  $\mathscr{L}$  é o gerador de um semigrupo.

O operador densidade  $\rho$  representa o estado do sistema *S* e a informação sobre o reservatório *R* está contida em  $\mathscr{L}$ . Queremos definir a evolução temporal desse operador para obter informações sobre o sistema, ou seja, queremos uma forma para  $\mathscr{L}$ . Para isso é útil a definição de semigrupos dinâmicos [40] [39].

**Definição 2.3.1.** Seja  $\mathcal{H}$  um espaço de Hilbert e seu estado de estados associado  $V^+(\mathcal{H})$ . Um semigrupo dinâmico é uma família de operadores lineares  $T_t$  definido para todo  $t \ge 0$  que satisfaz

- (i)  $T_t: V^+(\mathcal{H}) \to V^+(\mathcal{H}), t \ge 0$
- (ii)  $\operatorname{tr}(T_t \rho) = \operatorname{tr}(\rho), \quad \forall \rho \in V^+(\mathcal{H}) \in \forall t \ge 0,$

- (iii)  $T_s T_t \rho = T_{s+t} \rho$ ,  $\forall \rho \in V \text{ e } s, t \geq 0$ ,
- (iv)  $\lim_{t\to 0} \|T_t\rho \rho\|_1 = 0 \quad \forall \rho \in V.$

A primeira condição diz que os operadores  $T_t$  levam elementos positivos em elementos positivos. A segunda condição está relacionada à conservação do traço. A terceira condição está relacionada à memória do sistema, nesse caso a evolução do sistema depende apenas do estado de um instante inicial  $t_0$ , i. e., os estados do sistema em  $t < t_0$  não influenciam na sua evolução. A última condição permite que o teorema de Hille-Yosida seja aplicado para a caracterização do gerador de semigrupos dinâmicos, uma vez que  $\mathscr{T}^1(\mathfrak{H})$  é um espaço de Banach.

Além das condições citadas acima, existe a condição de positividade completa necessária de um ponto de vista físico. Vamos definir positividade completa e depois discutir o motivo pelo qual apenas a positividade não é suficiente. Para isso é útil o conceito de matriz unital definido a seguir.

**Definição 2.3.2.** Seja  $\mathcal{M}(\mathbb{C}, m, n)$  o conjunto das matrizes com *m* linhas, *n* colunas e com entradas complexas. Definimos as matrizes unitais em  $\mathcal{M}(\mathbb{C}, m, n)$  como o conjunto das matrizes  $\{e_{ij}\}, i = 1, ..., m; j = 1, ..., n$  que satisfazem  $(e_{ij})_{ab} = \delta_{ai}\delta_{bj}$ .

**Definição 2.3.3.** Sejam  $\mathscr{A} \in \mathscr{B}$  álgebras  $C^*$ ,  $\mathcal{M}_n(\mathbb{C})$  a álgebra de matrizes  $n \times n$  com entradas complexas e id<sub>n</sub> a transformação identidade que leva  $\mathcal{M}_n(\mathbb{C})$  em  $\mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ . Dada uma transformação linear  $T : \mathscr{A} \to \mathscr{B}$  podemos definir outra transformação linear  $T_n = T \otimes id_n : \mathscr{A} \otimes \mathcal{M}_n(\mathbb{C}) \to \mathscr{B} \otimes \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ . Se  $T_n$  é positivo para todo n, então T é chamado de completamente positivo (CP),  $T \in CP(\mathscr{A}, \mathscr{B})$ . Se  $T_n$  é positivo para um número inteiro positivo p então T é chamado de p-positivo.

Consideremos dois sistemas físicos  $S_1$  e  $S_2$  e os respectivos espaços de Hilbert associados a eles,  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ . Assumamos que a dinâmica de  $S_1$  é descrita por uma família de transformações positivas

$$T_{1,t}: \mathcal{B}(\mathcal{H}_1) \to \mathcal{B}(\mathcal{H}_1), \tag{2.3.2}$$

em que  $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$  denota o conjunto dos operadores limitados agindo em  $\mathcal{H}_1$  e que a dinâmica de  $S_2$  seja determinada pela hamiltoniana  $H_2 = 0$ . O espaço de Hilbert de  $S_1 + S_2$  é  $\mathcal{H} := \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Se os sistemas  $S_1$  e  $S_2$  não interagem, esperamos que  $T_{1,t}$  possa ser estendido para  $T_t : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$  de forma que

$$T_t(X \otimes \mathbb{1}) = T_{1,t}(X) \otimes \mathbb{1},$$
  
$$T_t(\mathbb{1} \otimes Y) = \mathbb{1} \otimes Y.$$

onde  $X \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$  e  $Y \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$ . Se o espaço de Hilbert de  $S_2$  tiver dimensão finita n, então  $\mathcal{H}_2 \cong \mathbb{C}^n$  e  $\mathcal{B}(\mathcal{H}_2) \cong \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ , onde  $\mathcal{M}_n(\mathbb{C})$  denota a álgebra de matrizes  $n \times n$  com entradas complexas.  $T_t$  é uma transformação linear de  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  em  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ , então de acordo com a definição 2.3.3 podemos estender  $T_t$ para  $T_{n,t} : \mathcal{M}_n(\mathcal{B}(\mathcal{H}_1)) \to \mathcal{M}_n(\mathcal{B}(\mathcal{H}_1))^2$ :

$$T_{n,t}(X \otimes e_{ij}) = T_{1,t}(X) \otimes e_{ij}, \qquad (2.3.3)$$

em que  $e_{ij}$  são matrizes unitais de  $\mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ . A expressão 2.3.3 também é denotada por  $T_{n,t} = T_{1,t} \otimes id_n$ . A positividade de 2.3.3 para todo n não é óbvia de um ponto de vista matemático, mas necessária de um ponto de vista físico: espera-se que a dinâmica de  $S_1$  não seja alterada somente pelo fato de que queremos descrever o sistema  $S_1 + S_2$  em que  $S_2$  nem interage com  $S_1$ .

Para exemplificar a condição de positividade completa consideremos dois sistemas de dois níveis  $S_a$  e  $S_b$  com operadores densidade dados por

$$\rho_a = \frac{1}{2}(1 + a_j \sigma_j) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & 1 - a_3 \end{pmatrix}$$
(2.3.4)

e

$$\rho_b = \frac{1}{2}(1+b_j\sigma_j) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+b_3 & b_1-ib_2 \\ b_1+ib_2 & 1-b_3 \end{pmatrix},$$
(2.3.5)

onde  $\sigma_i$ , j = 1, 2, 3 são as matrizes de Pauli e as constantes  $a_i$  e  $b_j$  satisfazem

$$\sum_{j=1}^{3} a_j^2 = a^2 \le 1, \quad \sum_{j=1}^{3} b_j^2 = b^2 \le 1.$$
(2.3.6)

O operador densidade do sistema  $S_a + S_b$  é dado por  $\rho = \rho_a \otimes \rho_b$  e o conjunto dos seus autovalores é

$$\lambda = \left\{ \frac{1}{4} (1+a)(1+b), \frac{1}{4} (1+a)(1-b), \\ \frac{1}{4} (1-a)(1+b), \frac{1}{4} (1-a)(1-b) \right\},$$
(2.3.7)

os quais são todos positivos.

Agora consideremos uma operação  $T_a$  em  $S_a$  que leva  $a_2$  em  $-a_2$ . O novo operador densidade de  $S_a$  é

$$\rho_a' = \frac{1}{2}(1 + a_j\sigma_j) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_3 & a_1 + ia_2 \\ a_1 - ia_2 & 1 - a_3 \end{pmatrix}.$$
 (2.3.8)

 $<sup>{}^{2}\</sup>mathcal{M}_{n}(\mathcal{B}(\mathcal{H}_{1}))$  denota a álgebra de matrizes com entradas do tipo  $\mathcal{B}(\mathcal{H}_{1})$  e pode ser aproximada por  $\mathcal{M}_{n}(\mathcal{B}(\mathcal{H}_{1})) \simeq \mathcal{B}(\mathcal{H}_{1}) \otimes \mathcal{M}_{n}(\mathbb{C}).$ 

#### 2.3. SEMIGRUPOS DINÂMICOS

Essa operação é uma transformação positiva e leva um estado que está na esfera de Bloch em outro estado que também está na esfera de Bloch. Notemos que essa operação não altera os autovalores de  $\rho_a$ . Se  $S_a$  não interage com  $S_b$  podemos estender essa operação para o sistema  $S_a + S_b$ :

$$T(\rho) = (T_a \otimes \mathrm{id}_2)(\rho) = T_a(\rho_a) \otimes \rho_b = \rho'_a \otimes \rho_b.$$
(2.3.9)

Se  $\rho' = T(\rho)$  é o operador densidade do sistema  $S_a + S_b$  após a operação, temos que  $\rho'$  possui o mesmo conjunto de autovalores de  $\rho$  e portanto Tdefinido em 2.3.9 é positivo para o sistema de dois níveis  $S_b$ , ou seja, T é 2-positivo. Poderíamos supor que  $S_b$  é um sistema de n níveis, então a 2positividade do sistema composto  $S_a + S_b$  obtida acima poderia ser facilmente estendida para n-positividade (no entanto não poderíamos escrever explicitamente os autovalores do sistema composto), seguindo daí a positividade completa de T.

A condição de positividade completa para descrever a dinâmica de sistemas quânticos abertos ainda é muito discutida, há quem argumente que é uma condição muito restritiva e já foi mostrado que transformações não-completamente positivas (que incluem transformações completamente positivas e também apenas positivas) descrevem a evolução de determinados sistemas ([19], [62], [54]). No entanto nesses casos a não-positividade completa é resultado do emaranhamento entre os estados iniciais dos dois sistemas ou da interação posterior entre os mesmos.

#### Gerador de semigrupos dinâmicos

Como dito anteriormente, o teorema de Hille-Yosida caracteriza o gerador de semigrupos, no entanto a forma explícita do gerador  $\mathscr{L}$  da equação 2.3.1 foi apresentada posteriormente em 1976 por G. Lindblad [44] e Gorini et al. [33], o primeiro utilizou ferramentas como geradores completamente dissipativos obtendo a forma do gerador para uma álgebra  $C^*$  qualquer, enquanto os últimos obtiveram a forma do gerador para a álgebra de matrizes complexas utilizando projetores ortogonais. A forma explícita dos geradores de semigrupos dinâmicos é dada pelo teorema de Gorini-Kossakowski-Lindblad-Sudarshan. Para enunciar e provar esse teorema são necessários alguns resultados envolvendo transformações completamente positivas. O primeiro desses é um teorema apresentado por M. Choi em 1975 [21] que relaciona transformações completamente positivas em álgebras  $C^*$  de matrizes. O segundo generaliza o primeiro e caracteriza transformações completamente positivas em uma álgebra  $C^*$  e foi formulado por W. F. Stinespring [56]. O último é um teorema provado por K. Kraus [41] em 1971.

Para provar o teorema de Choi, vamos utilizar os resultados do teorema seguinte [5].

**Teorema 2.3.1.** *Uma matriz*  $A = [a_{ij}]$ ,  $d \times d$  *de uma álgebra*  $C^* \mathscr{A}$  *é positiva se e somente satisfizer uma das condições abaixo:* 

(a) A é uma soma de matrizes da forma  $[(x_i)^*x_i]$  com  $x_i \in \mathscr{A}$ , i = 1, 2, ..., d;

(b) para quaisquer  $(x_1, x_2, ..., x_d)$  elementos de  $\mathscr{A}$ 

$$\sum_{i,j=1}^{d} x_i^* a_{ij} x_j \tag{2.3.10}$$

 $\acute{e}$  positivo em  $\mathscr{A}$ .

**Teorema 2.3.2.** (Choi) Seja  $\{e_{ij}|i, j = 1, 2, ..., d\}$  o conjunto das matrizes unitais em  $\mathcal{M}_d$ . Uma transformação linear da álgebra de matrizes em uma álgebra  $C^*$  $\phi : \mathcal{M}_d \to \mathscr{A}$  é completamente positiva se e somente se

$$[\phi(e_{ij})] \text{ } e \text{ positiva } em \mathcal{M}_n(\mathscr{A}). \tag{2.3.11}$$

*Demonstração.* De acordo com a definição 2.3.3, para mostrar que  $\phi$  é completamente positivo temos que mostrar que

$$\phi \otimes \mathrm{id}_k : \mathcal{M}_k(\mathcal{M}_d) \to \mathcal{M}_k(\mathscr{A}) : [A_{ij}] \mapsto [\phi(A_{ij})]$$
 (2.3.12)

é positivo para todo k = 1, 2, ..., onde a operação identidade é denotada por id.

( $\Leftarrow$ ) Se  $\phi$  é completamente positivo, sua aplicação no espaço de matrizes  $\mathcal{M}_d$  é positiva, a condição 2.3.11 é, portanto satisfeita.

(⇒) Utilizando o teorema 2.3.1, se encontrarmos elementos  $(x_1, x_2, ..., x_k)$  de  $\mathscr{A}$  tais que

$$\sum_{i,j=1}^k x_i^* \phi(Y_i^* Y_j) x_j \text{ é positivo em } \mathscr{A},$$

então  $\phi$  é positivo para alguma escolha de elementos  $(Y_1, Y_2, ..., Y_k)$  de  $\mathcal{M}_d$ . Podemos escrever cada elemento  $Y_i$  como uma combinação linear de matrizes unitais:

$$Y_i = \sum_{l,m=1}^d y_i^{lm} e_{lm}, \quad y_i^{lm} \in \mathbb{C},$$

a expressão anterior fica

$$\begin{split} \sum_{i,j} x_i^* \phi(Y_i^* Y_j) x_j &= \sum_{i,j} x_i^* \phi\left(\left(\sum_{l,m} y_i^{lm} e_{lm}\right)^* \left(\sum_{l',m'=1} y_j^{l'm'} e_{l'm'}\right)\right) x_j, \\ &= \sum_{i,j,l,m,l',m'} \overline{y_i^{lm}} y_j^{l'm'} x_i^* \phi(e_{ml} e_{l'm'}) x_j, \\ &= \sum_{i,j,l,m,m'} \overline{y_i^{lm}} y_j^{lm'} x_i^* \phi(e_{mm'}) x_j, \\ &= \sum_{l} \sum_{mm'} \left(\sum_i y_i^{lm} x_i\right)^* \phi(e_{mm'}) \left(\sum_j y_j^{lm'} x_j\right), \end{split}$$

como vemos, a expressão acima tem a forma de 2.3.10 e é, portanto, positiva. Temos que  $\phi \otimes id_k$  é positivo para todo k, então  $\phi$  é completamente positivo.

Enunciaremaos agora o teorema que caracteriza a representação de transformações completamente positivas em álgebras *C*\*: o teorema de Stinespring [56].

**Teorema 2.3.3.** (Stinespring) Seja  $\mathscr{A}$  uma álgebra  $C^*$  com unidade,  $\mathscr{B}(\mathscr{H})$  os operadores limitados em um espaço de Hilbert e  $\phi : \mathscr{A} \to \mathscr{B}(\mathscr{H})$  uma transformação linear positiva. Então existe um espaço de Hilbert  $\mathscr{K}$  e uma \*-representação  $\pi : \mathscr{A} \to \mathscr{B}(\mathscr{K})$  tal que

$$\phi(a) = V^* \pi(a) V, \tag{2.3.13}$$

onde  $V : \mathcal{K} \to \mathcal{H}$  é um operador limitado.

*Demonstração.* Seja  $\mathcal{K} = \mathscr{A} \otimes \mathcal{H}$ , para  $a \otimes h, b \otimes g \in \mathcal{K}$  definimos a forma sesquilinear

$$\langle a \otimes h, b \otimes g \rangle_{\mathcal{K}} := \langle \phi(b^*a)h, g \rangle_{\mathcal{H}},$$
 (2.3.14)

Como consequência da positivade de  $\phi$ , a forma sesquilinear  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{K}}$  é positiva. No entanto, a operação definida em 2.3.14 pode ser uma forma sesquilinear degenerada, isto é, pode existir  $n \neq 0, n \in \mathcal{K}$  para o qual vale  $\langle n, n \rangle_{\mathcal{K}} = 0$ . Para remover essa degenerescência consideramos o espaço quociente  $\mathcal{K}' = \mathcal{K}/\mathcal{K}_0$  em que o subconjunto  $\mathcal{K}_0$  é definido como:

$$\mathfrak{K}_0 = \{ n \in \mathfrak{K} | \langle n, n \rangle_{\mathfrak{K}} = 0 \}.$$
(2.3.15)

A desigualdade de Cauchy-Schwarz [52] é válida para formas sesquilineares positivas, então para  $n \in \mathcal{K}_0$  e  $u \in \mathcal{K}$  vale

$$|\langle n, u \rangle|^2 \le \langle n, n \rangle \langle u, u \rangle = 0, \qquad (2.3.16)$$

o conjunto  $\mathcal{K}_0$  pode então ser redefinido como:

$$\mathcal{K}_0 = \{ n \in \mathcal{K}, u \in \mathcal{K} | \langle n, u \rangle_{\mathcal{K}} = 0 \}.$$
(2.3.17)

Podemos então definir o espaço  $\mathcal{K}'$  formado pelas classes de equivalência  $[x] = \{x + n, n \in \mathcal{K}_0\}$  e  $x \in \mathcal{K}'$  cujo elemento nulo é  $[0] = \{n \in \mathcal{K}_0\}$ . Definimos em  $\mathcal{K}'$  a forma sesquilinear

$$\langle [a \otimes h], [b \otimes g] \rangle_{\mathcal{K}'} = \langle \phi(b^*a)h, g \rangle_{\mathcal{H}}.$$
(2.3.18)

Vamos verificar que a expressão 2.3.18 não depende da escolha do representante da classe. Primeiramente, vamos substituir  $a \otimes h$  por  $a \otimes h + n$ , com  $n \in \mathcal{K}_0$ :

$$\langle [a \otimes h + n], [b \otimes g] \rangle_{\mathcal{K}'} = \langle a \otimes h, b \otimes g \rangle_{\mathcal{K}'} + \langle n, b \otimes g \rangle_{\mathcal{K}'} = \langle \phi(b^*a)h, g \rangle_{\mathcal{H}} = \langle [a \otimes h], [b \otimes g] \rangle_{\mathcal{K}'}.$$
 (2.3.19)

Como a forma sesquilinear é simétrica, temos também que

$$\langle [a \otimes h], [b \otimes g + n] \rangle_{\mathcal{K}'} = \langle \phi(b^*a)h, g \rangle_{\mathcal{H}}$$
(2.3.20)

para  $a, b \in \mathcal{A}$ ,  $h, g \in \mathcal{H}$  e  $n \in \mathcal{K}_0$ . Portanto, a expressão 2.3.18 é bem definida em  $\mathcal{K}'$  e define um produto interno em  $\mathcal{K}'$ .

Vamos considerar o operador agindo em  $\mathcal{K}'$  definido da seguinte forma:

$$\pi(x)[a \otimes h] := [xa \otimes h], \tag{2.3.21}$$

 $x \in \mathscr{A}$ . Para verificar se  $\pi(x)$  é um operador limitado em  $\mathcal{K}'$  é útil lembrar que para elementos positivos *a*, *b* de  $\mathscr{A}$  vale [18]

$$0 \le b \le \|b\| \, \mathbb{1}, \tag{2.3.22}$$

e se  $a \ge b \ge 0$ , então

$$c^*ac \ge c^*bc \ge 0, \quad \forall c \in \mathscr{A}.$$
 (2.3.23)

Especificamente, para  $a, x \in \mathscr{A}$ :

$$a^*x^*xa \leq a^* \|x\|^2 a$$
,

e pela positividade e linearidade de  $\phi$  temos:

$$\phi(a^*x^*xa) \le \|x\|^2 \phi(a^*a). \tag{2.3.24}$$

Utilizando 2.3.24 para calcular  $\|\pi(x)a \otimes h\|_{\mathcal{K}'}^2$  para  $x, a \in \mathscr{A}$  e  $h, g \in \mathcal{H}$ :

$$\begin{aligned} \|\pi(x)[a\otimes h]\|_{\mathcal{K}'}^2 &= \langle \pi(x)[a\otimes h], \pi(x)[a\otimes h] \rangle_{\mathcal{K}'} \\ &= \langle [xa\otimes h], [xa\otimes h] \rangle_{\mathcal{K}'} \\ &= \langle \phi(a^*x^*xa)h, h \rangle_{\mathcal{H}} \\ &\leq \|x\|^2 \langle \phi(a^*a)h, h \rangle_{\mathcal{H}} \\ &\leq \|x\|^2 \langle [a\otimes h], [a\otimes h] \rangle_{\mathcal{K}'} \\ &\leq \|x\|^2 \|[a\otimes h]\|_{\mathcal{K}'}^2 \,. \end{aligned}$$

ou seja,  $\pi(x)$  é limitado:

$$\|\pi(x)\| \le \|x\|^2$$
. (2.3.25)

De acordo com o teorema BLT [52] podemos estender  $\pi(x)$  para todo  $\mathcal K$  sendo que 2.3.25 ainda vale.

Notemos que para  $x, y \in \mathscr{A}$ 

$$\pi(\alpha x + \beta y)[a \otimes h] = \alpha[xa \otimes h] + \beta[yb \otimes g]$$
  
=  $\alpha \pi(x)[a \otimes h] + \beta \pi(y)[b \otimes g]$ 

e

$$\pi(x)\pi(y)[a\otimes h] = \pi(x)[ya\otimes h]$$
$$= [xya\otimes h]$$
$$= \pi(xy)[a\otimes h],$$

ou seja,  $\pi$  é uma representação de  $\mathscr{A}$  por operadores limitados em %. Além disso, temos que

$$\begin{split} \langle [a \otimes h], \pi(x^*)[b \otimes g] \rangle_{\mathcal{K}'} &= \langle [a \otimes h], [x^*b \otimes g] \rangle_{\mathcal{K}'} \\ &= \langle \phi((x^*b)^*a)h, g \rangle_{\mathcal{H}} \\ &= \langle \phi(b^*(xa))h, g \rangle_{\mathcal{H}} \\ &= \langle [xa \otimes h], [b \otimes g] \rangle_{\mathcal{K}'} \\ &= \langle \pi(x)[a \otimes h], [b \otimes g] \rangle_{\mathcal{K}'} \\ &= \langle [a \otimes h], \pi^*(x)[b \otimes g] \rangle_{\mathcal{K}'}, \end{split}$$

isto é,  $\pi(x)$  é uma \*-representação em  $\mathcal{K}'$  que pode ser estendida para todo  $\mathcal{K}.$ 

Definimos o operador V da eq. 2.3.13 como

$$Vh := [\mathbb{1} \otimes h], \quad h \in \mathcal{H}.$$
(2.3.26)

Obtemos a 2.3.13 calculando

$$\begin{aligned} \langle V^*\pi(a)Vx,y\rangle &= \langle \pi(a)Vx,Vy\rangle \\ &= \langle \pi(a)(\mathbbm{1}\otimes x),\mathbbm{1}\otimes y\rangle \\ &= \langle a\otimes x,\mathbbm{1}\otimes y\rangle \\ &= \langle \phi(a)x,y\rangle \,. \end{aligned}$$

para  $x, y \in \mathcal{H}$  e  $a \in \mathscr{A}$ .

A tripla  $(\pi, V, \mathcal{K})$  é chamada de representação de Stinespring de  $\phi$ . Se considerarmos essa representação no caso unidimensional,  $\phi$  é um funcional linear positivo e para  $V1 := \Omega$  o teorema de Stinespring se reduz à representação GNS.

Para provar o teorema de Kraus precisamos de um resultado preliminar provado inicialmente por Neumark [47] e posteriormente por Davies [26].

**Lema 2.3.1.** Seja  $\pi$  uma representação de  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  em um espaço de Hilbert  $\tilde{\mathcal{H}}$ . Então existem subespaços mutuamente ortogonais  $\mathcal{H}_k \subset \tilde{\mathcal{H}}, k \in \Omega$  e o complemento ortogonal  $\mathcal{H}_0$  de  $\oplus_k \mathcal{H}_k$  os quais são invariantes por  $\pi(X)$  para todo  $X \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Os subespaços  $\mathcal{H}_k$  são isomorfos a um espaço de Hilbert separável  $\mathcal{H}$  e as representações em cada  $\mathcal{H}_k$  são idênticas e são  $\pi(X) = X$ . A representação  $\pi_0$  é a representação na subálgebra  $\mathcal{B}(\mathcal{H})/\mathcal{C}(\mathcal{H})$  onde  $\mathcal{C}(\mathcal{H})$  é o conjunto dos operadores compactos agindo em  $\mathcal{H}$  e é um bi-ideal de  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  [52]. A decomposição ortogonal de  $\tilde{\mathcal{H}}$  é, portanto

$$\widetilde{\mathfrak{H}} = \bigoplus_{k \in \Omega} \mathfrak{H}_k \oplus \mathfrak{H}_0, \quad \mathfrak{H}_k \equiv \mathfrak{H},$$
(2.3.27)

e induz a representação na forma

$$\pi = \bigoplus_{k \in \Omega} \pi_k \oplus \pi_0, \quad \pi_k(X) \equiv X.$$
(2.3.28)

**Teorema 2.3.4.** (Kraus) *Uma transformação normal*<sup>3</sup>, *linear e completamente positiva*  $\phi : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$  que satisfaz  $\|\phi(A)\| \leq \|A\|$  pode ser escrita na forma

$$\phi(A) = \sum_{k} V_k^* A V_k, \qquad (2.3.29)$$

onde  $A \in \mathscr{A}$ ,  $V_k$  são operadores limitados e satisfazem

$$\sum_{k} V_k^* V_k \le \mathbb{1}. \tag{2.3.30}$$

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Transformação contínua na topologia ultrafraca. Ver a entrada convergência ultrafraca do Glossário.

*Demonstração*. Utilizando o teorema de Stinespring (Teorema 2.3.3 na página 15), uma transformação completamente positiva pode ser escrita na forma 2.3.13:

$$\phi(A) = V^* \pi(A) V,$$

onde  $V : \mathcal{H} \to \tilde{\mathcal{H}}$ . De acordo com o lema 2.3.1 a representação  $\pi$  pode ser reduzida à representações na decomposição de  $\tilde{\mathcal{H}}$ :

$$\pi(A) = \bigoplus_{k \in \Omega} \pi_k(A) \oplus \pi_0(A), \quad \pi_k(A) \equiv A.$$

Os operadores V podem ser representados por

$$V = \bigoplus_{k} V_k \oplus V_0, \qquad (2.3.31)$$

onde  $V_k, k \in \Omega$  são operadores em  $\mathcal{H}$  e  $V_0$  uma transformação linear de  $\mathcal{H}$  em  $\mathcal{H}_0$ . Temos ainda que

$$V^*V = \sum_{k \in \Omega} V_k^* V_k + V_0^* V_0 \le \|V\|^2 \, \mathbb{1}.$$
(2.3.32)

Utilizando 2.3.31 em 2.3.13, obtemos:

$$\phi(A) = \sum_{k \in \Omega} V_k^* A V_k + V_0^* \pi_0(A) V_0, \qquad (2.3.33)$$

Vamos agora mostrar que o conjunto  $\Omega$  é contável e que o último termo do lado direito de 2.3.33 mão contribui para a representação de  $\phi(A)$ .

O conjunto  $\Omega$  que indexa a soma nas expressões 2.3.28, 2.3.31 e 2.3.33 não é necessariamente contável. Para verificar se  $\Omega$  é contável ou não, vamos considerar um conjunto contável { $f_i$ } e denso em  $\mathcal{H}$ .  $\mathcal{H}$  é separável, portanto temos que

$$\sum_{k\in\Omega}\left\langle f_{i},V_{k}^{*}V_{k}f_{i}\right\rangle$$

é convergente de acordo com 2.3.32. Temos então que o conjunto  $\Omega_i$  tal que  $\langle f_i, V_k^* V_k f_i \rangle = ||V_k f_i||^2 \neq 0$  é, no máximo, contável, e o mesmo vale para o conjunto  $\bigcup_i \Omega_i$ . Para o conjunto complementar vale  $V_k f_i = 0$ , então  $V_k = 0$ . Portanto o conjunto  $\Omega$  é no máximo contável.

Consideremos então o conjunto  $\Omega = \{1, 2, ...\}$  e o operador definido por:

$$F_n := \sum_{k \le n} V_k^* V_k,$$
 (2.3.34)

 $F_n$  é positivo, pois  $V_k^* V_k \ge 0$ . Além disso  $F_n$  é crescente com n e, de acordo com 2.3.30,  $F_n \le 1$  e portanto, limitado. Seja  $\{f_i\}$  uma base ortonormal completa de  $\mathcal{H}$  e  $B \in \mathscr{T}^1(\mathcal{H})$ , então  $F_n B \in \mathscr{T}^1(\mathcal{H})$  pois o conjunto dos operadores de classe traço forma um bi-ideal de  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Podemos então calcular o limite a seguir:

$$\lim_{n \to \infty} \operatorname{tr}(F_n B) = \lim_{n \to \infty} \sum_i \langle f_i, F_n B f_i \rangle$$
$$= \sum_i \sum_{k \le n} \langle f_i, V_k^* V_k B f_i \rangle$$
$$= \sum_i \sum_{k=1}^{\infty} \langle f_i, V_k^* V_k B f_i \rangle$$
$$= \operatorname{tr}(FB),$$

o limite anterior corresponde à convergência ultrafraca de  $F_n$  à F onde F é

$$F := \sum_{k=1}^{\infty} V_k^* V_k, \tag{2.3.35}$$

o limite ultrafraco é denotado por  $F_n \xrightarrow{w^*} F$ . Novamente utilizando 2.3.30 temos que  $0 \le F \le 1$ , portanto  $F \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Consideremos um operador  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  tal que  $0 \le A$ . Como A é um operador positivo, vale a desigualdade  $(||A|| 1 - A) \ge 0$  e  $V_k^*(||A|| 1 - A)V_k \ge 0$  para todo k [18]. Definimos então o operador  $\tilde{A}_n$ :

$$\tilde{A}_n := \sum_{k \le n} V_k^* A V_k \tag{2.3.36}$$

que é um operador positivo e crescente com n. Temos

$$egin{aligned} & ilde{A_n} \leq \sum_{k \leq n} V_k^* \left\|A\right\| V_k \ &\leq \left\|A\right\| F_n \ &\leq \left\|A\right\| F, \end{aligned}$$

 $\tilde{A_n}$  é, portanto, um operador limitado. O mesmo método para mostrar  $F_n \stackrel{w^*}{\longrightarrow} F$  pode ser utilizado para mostrar que  $\tilde{A_n} \stackrel{w^*}{\longrightarrow} \tilde{A}$  onde  $\tilde{A}$  é

$$\tilde{A} = \sum_{k=1}^{\infty} V_k^* A V_k.$$
(2.3.37)

Queremos que  $\phi(A)$  seja um operador normal, i. e., que seja contínuo na topologia operatorial ultrafraca. Em 2.3.33 o primeiro termo pode ser identificado com  $\tilde{A}$  de 2.3.37 o qual foi provado que é normal. Já o segundo termo,  $V_0^* \pi_0(A) V_0$ , deve ser normal para que  $\phi(A)$  o seja. No entanto o operador limitado A é o limite ultrafraco de operadores compactos  $A_i$ , como  $\pi_0$  é a representação da subálgebra  $\mathcal{B}(\mathcal{H})/\mathcal{C}(\mathcal{H})$  temos que  $\pi_0(A) = 0$ . Podemos finalmente escrever a transformação linear, normal e completamente positiva como

$$\phi(A) = \sum_{k \in \Omega} V_k^* A V_k,$$

onde  $\Omega$  é um conjunto contável.

Utilizando os resultados anteriores, podemos finalmente enunciar o teorema da forma de geradores de semigrupos dinâmicos para o caso de dimensão finita.

**Teorema 2.3.5.** (Gorini-Kossakowski-Lindblad-Sudarshan) *Um operador linear*  $\mathscr{L}$  é gerador de um semigrupo dinâmico em uma álgebra de matriz  $\mathcal{M}_n$  se, e somente se,

$$\mathscr{L}(A) = i[H, A] + \phi(A) - \frac{1}{2} \left(\phi(1)A + A\phi(1)\right)$$
(2.3.38)

onde  $\phi \in CP(\mathcal{M}_n)$ ,  $H = H^* \in \mathcal{M}_n$  e  $A \in \mathcal{M}_n$ .

*Demonstração.* ( $\Rightarrow$ ) Escrevendo  $\mathscr{L}(A)$  na forma

$$\mathscr{L}(A) = \phi(A) - K(A),$$

onde

$$K(A) := \frac{1}{2}(VA + AV^*) \quad V := \phi(1) + iH.$$

Temos que  $e^{(t\phi)}$  satisfaz

$$\begin{split} e^{(0\phi)} &= \mathbb{1}, \\ e^{(s\phi)} e^{(t\phi)} &= e^{((s+t)\phi)}, \\ \lim_{t \to 0} \left\| e^{(t\phi)} x - \phi \right\| &= 0, \quad x \in \mathcal{M}_n \end{split}$$

ou seja,  $e^{(t\phi)}$  é um semigrupo. Além disso, definindo o operador  $e^{(t\phi_n)}$  vemos que ele é positivo para todo *n*, isto é,  $e^{(t\phi)}$  forma um semigrupo completamente positivo. O processo é análogo para verificar que  $e^{(tK)}$  também forma um semigrupo completamente positivo.

Utilizando a fórmula de Trotter (válida para álgebra de matrizes) temos que:

$$e^{(t\mathscr{L})} = \lim_{n \to \infty} \left[ e^{t\phi/n} e^{-tK/n} \right]^n, \qquad (2.3.39)$$

também é completamente positivo<sup>4</sup>. Podemos então definir o semigrupo dinâmico  $T_t = e^{t\mathscr{L}}$  cujo gerador é  $\mathscr{L}$ .

( $\Leftarrow$ ) De acordo com o teorema de Choi (Teorema 2.3.2 na página 14) existe um isomorfismo entre uma transformação completamente positiva  $T \in \mathcal{B}(\mathcal{M}_d)$ e matrizes positivas  $\hat{T} \in \mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_d$ . A matriz  $\hat{T}$  tem como entradas matrizes da forma  $\hat{\phi}_{ij} := \hat{\phi}(e_{ij})$ . Definindo a operação J := (1/d)id com entradas do tipo  $\hat{J}_{ij} := (1/d)e_{ij}$  onde  $e_{ij}$  são matrizes unitais, temos um projetor no espaço  $\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_d$ . Podemos então decompor  $\hat{T}$ :

$$\hat{T} = (\mathbb{1} - \hat{J})\hat{T}(\mathbb{1} - \hat{J}) + \hat{J}(\hat{T} - \frac{1}{2}\hat{T}\hat{J}) + (\hat{T} - \frac{1}{2}\hat{J}\hat{T})\hat{J}.$$
(2.3.40)

Notemos que o primeiro termo é um operador positivo, pois  $(\mathbb{1} - \hat{f})$  é positivo e a multiplicação de matrizes positivas é uma matriz positiva. Já os últimos termos correspondem à multiplicação pela esquerda e direita por  $\hat{f}$  que é múltipla de matrizes unitais. Escrevendo 2.3.40 na sua correspondente forma em  $\mathcal{B}(\mathcal{M}_d)$ , o primeiro termo é uma transformação completamente positiva, pois está relacionado a uma matriz positiva em  $\mathcal{M}_d(\mathcal{M}_d)$ , vamos denotar essa transformação CP por  $T^{CP}$ , seja o correspondente de  $(\hat{T} - \frac{1}{2}\hat{T}\hat{f})$  um operador *S* e lembrando que  $\hat{f}$  cumpre o papel de projetor em  $\mathcal{M}_d \otimes \mathcal{M}_d$ , temos

$$T(A) = T^{CP}(A) + SA + AS^*.$$
 (2.3.41)

As transformações lineares *T* podem ser parametrizadas por  $t \in \mathbb{R}^+$ , formando um semigrupo uniparamétrico. Utilizando o teorema de Hille-Yosida (Teorema 2.2.1 na página 9) podemos caracterizar o gerador desse semigrupo:

$$\begin{aligned} \mathscr{L}(A) &= \lim_{t \to 0} \frac{1}{t} (T_t(A) - A), \\ &= \lim_{T \to 0} \frac{1}{t} (T_t^{CP}(A) + S_t A + A S_t^* - A), \\ &= \lim_{t \to 0} \frac{1}{t} T_t^{CP}(A) + \lim_{t \to 0} \frac{1}{t} (S_t + \frac{1}{2}) A + \lim_{t \to 0} \frac{1}{t} A (S_t^* - \frac{1}{2}), \end{aligned}$$

o primeiro termo é uma transformação completamente positiva, pois é limite de uma transformação completamente positiva, denotanto essa transformação por  $\phi$  e o limite de  $(S_t^* - \frac{1}{2})$  por  $-\frac{1}{2}B$ , podemos escrever

$$\mathscr{L}(A) = \phi(A) - \frac{1}{2}(B^*A + AB).$$

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>É fácil ver que o produto de dois operadores completamente positivos deve ser completamente positivo. Seja *A* um operador agindo em um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  tal que $A \in CP(\mathcal{H})$ , isto é,  $A \otimes id_n$  mapeia  $V^+(\mathcal{H} \otimes \mathbb{C}^n)$  em  $V^+(\mathcal{H} \otimes \mathbb{C}^n)$  onde  $id_n$  denota a transformação que leva um elemento de  $\mathcal{M}_n(\mathbb{C})$  em si mesmo e  $V^+$  o espaço de estados definido em 2.1.2. Seja  $B \in CP(\mathcal{H})$ , então o produto *AB* que satisfaz  $AB \otimes id_n = (A \otimes id_n)(B \otimes id_n)$  é *CP*.

Para que  $\mathscr{L}(\mathbb{1}) = 0$ , i. e., para que o operador  $\mathscr{L}$  preserve a unidade, escolhemos  $H := \frac{1}{4i}(B - B^*)$  e  $\phi(\mathbb{1}) := \frac{1}{2}(B + B^*)$  e  $\mathscr{L}(A)$  fica na forma

$$\begin{aligned} \mathscr{L}(A) &= \phi(A) + i[H, A] - \frac{1}{4}(2B^*A + 2AB + BA - B^*A - AB + AB^*), \\ &= \phi(A) + i[H, A] - \frac{1}{4}((B + B^*)A + A(B + B^*)), \\ &= \phi(A) + i[H, A]\frac{1}{2}(\phi(\mathbb{1})A + A\phi(\mathbb{1})). \end{aligned}$$

Utilizando a representação de Kraus (Teorema 2.3.4 na página 18) o resultado anterior pode ser reescrito em termos de operadores  $V_i$ :

$$\mathscr{L}(A) = i[H, A] + \frac{1}{2} \sum_{i} \left( 2V_i^* A V_i - \{V_i^* V_i, A\} \right).$$
(2.3.42)

Para obter o gerador na descrição de Schrödinger, denotado por  $\hat{\mathcal{I}}$ , notamos que o valor médio de um operador *A* dado pela eq. (2.1.3) na página 7 deve ser o mesmo em ambas as descrições, portanto:

$$\operatorname{tr}(\rho(t)A) = \operatorname{tr}(\rho A(t)),$$

derivando em relação a *t* obtemos:

$$\operatorname{tr}(\frac{d}{dt}\rho(t)A) = \operatorname{tr}(\rho\frac{d}{dt}A(t)).$$

Sabendo que  $\frac{d}{dt}\rho = \mathscr{Z}(\rho)$  e  $\frac{d}{dt}A = \mathscr{L}(A)$ :

$$\operatorname{tr}(\tilde{\mathscr{L}}(\rho)A) = \operatorname{tr}(\rho\mathscr{L}(A)),$$

utilizando o produto interno de Hilbert-Schmidt podemos reescrever a expressão anterior

$$ig\langle \tilde{\mathscr{L}}(\rho)^*, A ig
angle = \langle \rho, \mathscr{L}(A) 
angle \ \langle (\tilde{\mathscr{L}}(\rho))^*, A ig
angle = \langle \mathscr{L}^*(\rho), A 
angle ,$$

temos então que

$$(\tilde{\mathscr{L}}(\rho))^* = \mathscr{L}^*(\rho),$$

o adjunto da expressão anterior é

$$\tilde{\mathscr{L}}(\rho) = (\mathscr{L}^*(\rho))^*.$$

De 2.3.42 podemos calcular o adjunto de  $\mathscr{L}$ :

$$\mathscr{L}^* = -i[H, \cdot] + \frac{1}{2} \sum_{i} (2V_i^* \cdot V_i - \{V_i^* V_i, \cdot\}).$$

Calculando o adjunto  $\mathscr{L}^*(\rho)$  com a ajuda da expressão anterior, podemos determinar a expressão para  $\tilde{\mathscr{L}}(\rho)$ :

$$\tilde{\mathscr{L}}(\rho) = -i[H,\rho] + \frac{1}{2} \sum_{i} \left( 2V_i \rho V_i^* - \rho V_i^* V_i - V_i^* V_i \rho \right).$$
(2.3.43)

 	_	_	
### Capítulo 3

## Teorema Adiabático

Formulado pela primeira vez em 1928 por Max Born e Vladimir Fock [14], o teorema adiabático é um tópico consolidado tanto na Mecânica Clássica quanto na Mecânica Quântica. Ele descreve o comportamento das soluções de um problema de condição inicial no qual a hamiltoniana que gera a evolução temporal depende de forma suficientemente lenta do tempo. A utilização do regime adiabático contribuiu para a formulação de resultados importantes, como a aproximação de Born-Oppenheimer [15] que descreve a função de onda de uma molécula como um desacoplamento da função de onda eletrônica e da função de onda nuclear. O teorema adiabático é relevante nessa formulação quando assume-se que o parâmetro temporal do núcleo é muito maior do que o parâmetro temporal eletrônico e, portanto, pequenas mudanças na hamiltoniana nuclear resultam em funções de onda eletrônicas de mesmo nível de energia.

O teorema adiabático apresentado por Born e Fock considerava apenas hamiltonianas com espectro discreto e sem degenerescência, exceto pelo cruzamento eventual de autovalores. Um estudo posterior foi feito por T. Kato [38] em 1950 no qual considerou-se hamiltonianas com espectro contínuo e com degenerescência. Ambas as formulações apresentam a condição de lacuna no espectro da hamiltoniana, tal condição consiste na hipótese de que o autovalor associado ao estado inicial do sistema está separado por uma lacuna do resto do espectro. Uma generalização recente realizada por J. E. Avron e A. Elgart [6] dispensa a condição de lacuna em detrimento da informação sobre a taxa no qual o limite adiabático é alcançado. A principal motivação de um teorema adiabático sem condição de lacuna é o estudo de sistemas interagindo com campo de radiação.

As aplicações e consequentes reformulações do teorema adiabático são inúmeras: Avron, Seiler e Yaffe utilizaram o teorema adiabático para estudar o efeito Hall quântico [9] em 1987 e posteriormente Avron et al. derivaram um resultado análogo à fórmula de Landau-Zener utilizando operadores de Lindblad de defasagem e o regime adiabático [7].

Seguiremos a descrição de T. Kato para o teorema adiabático. Consideraremos a evolução do sistema físico num intervalo de tempo  $0 \le t \le \tau$  a partir da transformação dinâmica regida pela evolução temporal gerada pela hamiltoniana, e da transformação adiabática, regida pela evolução temporal de uma aproximação da hamiltoniana utilizando os projetores espectrais. Em seguida mostraremos que no limite em que  $\tau \to \infty$  a evolução temporal das duas transformações são equivalentes a menos de um fator de fase.

#### 3.1 Transformação Dinâmica

A dinâmica de um sistema é dada pela sua hamiltoniana e a sua evolução regida pela equação de Schrödinger ( $\hbar = 1$ ):

$$i\frac{d}{dt}\psi(t) = H(t)\psi(t), \qquad (3.1.1)$$

onde *H* é um operador auto-adjunto, mas não necessariamente limitado.

Consideremos o intervalo de tempo  $0 \le t \le \tau$ , queremos estudar o comportamento do sistema quando  $\tau \to \infty$ , para isso introduzimos uma nova variável  $s = t/\tau$  em que  $0 \le s \le 1$ . Em termos de *s* a equação 3.1.1 fica

$$i\frac{d}{ds}\psi_{\tau}(s) = \tau H(s)\psi_{\tau}(s), \qquad (3.1.2)$$

assumindo que H não depende explicitamente de  $\tau$  e que  $\frac{d}{ds}H(s) < \infty$  quando  $\tau \to \infty$ .

Sobre a natureza do espectro de *H* faremos uma única suposição: existe um autovalor  $\lambda(s)$  com multiplicidade finita separado do resto do espectro por uma lacuna. Trabalharemos com o projetor P(s) associado a  $\lambda(s)$ , uma vez que esse é unicamente determinado (ao contrário dos autoestados correspondentes a  $\lambda(s)$ ). Assumimos que  $\lambda(s)$  e P(s) são funções contínuas de *s* e que  $\frac{d}{dd}P$  e  $\frac{d^2}{ds^2}P$  são contínuas por partes. Para  $\lambda(s)$  e P(s) vale

$$(H(s) - \lambda(s))P(s) = 0,$$
 (3.1.3)

então existe um operador S(s) tal que

$$(H(s) - \lambda(s))S(s) = 1 - P(s)$$
(3.1.4)

e P(s)S(s) = S(s)P(s) = 0. Esse operador ortogonal a P(s) possui a seguinte representação espectral e é denominado resolvente reduzido:

$$S(s) = \int' (\lambda - \lambda(s))^{-1} dP_s(\lambda)$$
(3.1.5)

#### 3.2. TRANSFORMAÇÃO ADIABÁTICA

em que  $\int'$  denota integração sobre todos  $\lambda$  com exceção de  $\lambda = \lambda(s)$ . A solução de 3.1.2 é

$$\psi_{\tau}(s) = U_{\tau}(s)\psi_{\tau}(0),$$
 (3.1.6)

onde  $U_{\tau}(s)$  é o operador de evolução temporal do sistema que obedece a seguinte equação e condição inicial:

$$U'_{\tau}(s)s = -i\tau H(s)U_{\tau}(s) \quad U_{\tau}(0) = \mathbb{1},$$
(3.1.7)

e o seu adjunto obedece

$$U_{\tau}^{*\prime}(s) = i\tau H(s)U_{\tau}^{*}(s) \quad U_{\tau}^{*}(0) = \mathbb{1}$$
(3.1.8)

em que ' denota a derivação em relação a *s*. Vamos definir um operador  $\bar{U}_{\tau}(s)$  que nos será útil mais adiante:

$$\bar{U}_{\tau}(s) = \exp\{i\tau \int_0^s \lambda(s)ds\} U_{\tau}(s).$$
(3.1.9)

Temos então que  $\bar{U}_{\tau}^{*\prime}(s)$  obedece à equação diferencial

$$\bar{U}_{\tau}^{*\prime}(s) = i\tau \bar{U}_{\tau}^{*}(s)(H(s) - \lambda(s)).$$
(3.1.10)

#### 3.2 Transformação Adiabática

Consideremos agora um operador que obedece uma equação similar à equação 3.1.7:

$$U'(s) = iA(s)U(s) \quad U(0) = 1,$$
 (3.2.1)

onde o operador A(s) é auto-adjunto (mas não necessariamente limitado) e é análogo à hamiltoniana da equação 3.1.7. Escolhemos A da forma:

$$iA(s) = [P'(s), P(s)],$$
 (3.2.2)

isto é, o operador *A* depende somente do projetor associado ao autovalor  $\lambda(s)$ . Para verificar que U(s) é unitário devemos calcular  $U^*U$  e  $UU^*$ . Calculemos primeiro  $(U^*U)'$ 

$$(U^*U)' = U^{*'}U + U^*U' = -iAU^*U + U^*iAU = 0, \qquad (3.2.3)$$

 $U^*U$  é constante em s e como  $U^*(0)U(0) = 1$ , temos que  $U^*(s)U(s) = 1$ . Agora  $(UU^*)'$ :

$$(UU^*)' = U'U^* + UU^{*'} = i[A, UU^*], \qquad (3.2.4)$$

a equação 3.2.4 é uma equação diferencial linear em  $UU^*$  e, dada a condição inicial  $U(0)U^*(0) = 1$ , sua solução é unicamente determinada e é  $U(s)U^*(s) = 1$ . Reunindo as soluções das equaçãos diferenciais 3.2.3 e 3.2.4 temos  $UU^* = U^*U = 1$ , ou seja, U é um operador unitário.

Sabemos que P(s) é um projetor ortogonal, portanto possui a propriedade de que  $P^2 = P$  [11]. Temos que  $(P^2)' = P'P + PP'$ , multiplicando essa expressão à direita e esquerda por P, obtemos a seguinte propriedade dos projetores:

$$PP'P = 0.$$
 (3.2.5)

Multiplicando a equação 3.2.2 pela esquerda e depois pela direita por P e utilizando a propriedade 3.2.5 obtemos respecticamente:

$$iPA = -PP', \quad iAP = P'P, \tag{3.2.6}$$

e, portanto

$$P' = (P^2)' = P'P + PP' = iAP - iPA = i[A, P].$$
(3.2.7)

Consideremos o operador W = PU:

$$W' = (PU)' = P'U + PU'$$
  
= (iAP - iPA)U + P(iAU) = iAPU  
= iAW, (3.2.8)

o operador *W* obedece a mesma equação que *U*, 3.2.1, exceto pela condição inicial. A solução da equação 3.2.1 para *W* é da forma W(s) = U(s)W(0), isto é,

$$W(s) \equiv P(s)U(s) = U(s)W(0) = U(s)P(0)U(0) = U(s)P(0), \quad (3.2.9)$$

onde foi utilizado que U(0) = 1. Da equação 3.2.9 notamos que

$$P(s) = U(s)P(0)U^{-1}(s), (3.2.10)$$

ou seja, o operador U(s) leva o subespaço associado ao projetor P(0) de H(0) ao subespaço associado ao projetor P(s) de H(s). Multiplicando o operador W pela esquerda por P(s) e utilizando a equação 3.2.9 temos:

$$P(s)W(s) = P(s)U(s)P(0) = W(s)P(0),$$
(3.2.11)

a propriedade da equação 3.2.11 é denominada propriedade de *intertwining*. Além disso obtemos da equação 3.2.6 e de W = PU = PPU = PW

$$W' = iAW = iAPW = P'PW = P'W.$$
 (3.2.12)

Portanto *W* obedece a uma equação diferencial que depende apenas do projetor *P*, diferentemente do operador  $U_{\tau}$  que obedece uma equação diferencial que depende de H(s). Os operadores U(s) e W(s) são os operadores responsáveis pela transformação adiabática correspondente ao autovalor  $\lambda(s)$ . Veremos que o operador U(s) é o operador que representa a evolução adiabática do sistema que está inicialmente no subespaço P(0).

## 3.3 Equivalência das transformações dinâmica e adiabática quando $au o \infty$

Queremos mostrar que no limite em que  $\tau \to \infty$  a dinâmica hamiltoniana - representada pelo operador  $U_{\tau}(s)$  - pode ser substituída pela dinâmica adiabática - representada pelo operador U(s). Consideremos as equações 3.1.10, 3.1.3 e 3.1.9 na expressão abaixo:

$$(\bar{U}_{\tau}^{*}W)' = \bar{U}_{\tau}^{*}'W + \bar{U}_{\tau}^{*}W'$$
  
$$= i\tau\bar{U}_{\tau}^{*}(H-\lambda)\underbrace{W}_{=PW} + \bar{U}_{\tau}^{*}W'$$
  
$$= i\tau\bar{U}_{\tau}^{*}\underbrace{(H-\lambda)P}_{=0}W + \bar{U}_{\tau}^{*}W'$$
  
$$= \bar{U}_{\tau}^{*}W'.$$

Integrando a expressão entre 0 e *s* e utilizando as condições iniciais  $\bar{U}^*_{\tau}(0) = \mathbb{1}$  e W(0) = P(0)U(0) = P(0) obtemos:

$$\bar{U}_{\tau}^{*}(s)W(s) - P(0) = \int_{0}^{s} \bar{U}_{\tau}^{*}W'ds.$$
(3.3.1)

Agora notemos que

$$PW' \stackrel{3.2.5}{=} PP'W \stackrel{3.2.5}{=} 0;$$

Podemos então escrever  $W' = (\mathbb{1} - P)W' \stackrel{3.1.4}{=} (H - \lambda)SW'$  e a expressão 3.3.1 fica

$$\begin{split} \bar{U}_{\tau}^{*}(s)W(s) - P(0) &= \int_{0}^{s} \bar{U}_{\tau}^{*}(H - \lambda)SW'ds \\ \stackrel{3.1.10}{=} \int_{0}^{s} (i\tau)^{-1} \bar{U}_{\tau}^{*'}SW' \\ &= (i\tau)^{-1} \left[ \bar{U}_{\tau}^{*}SW' \right]_{0}^{s} - (i\tau)^{-1} \int_{0}^{s} \bar{U}_{\tau}^{*}(SW')'ds. \end{split}$$
(3.3.2)

Queremos que o lado direito da expressão acima seja de ordem  $\mathcal{O}(\tau^{-1})$ . Observemos que  $\bar{U}^*_{\tau}$  é unitário, portanto de ordem 1, já o operador *S* dado por 3.1.5 pode não ser definido se  $\lambda$  for suficientemente próximo de  $\lambda(s)$ . No entanto, estamos assumindo que  $\lambda(s)$  é um autovalor de *H* isolado do resto do espectro. Portanto, a condição de lacuna no espectro de *H* garante que o operador *S* é bem definido. Temos então que o lado direito da expressão anterior é de ordem  $\mathcal{O}(\tau^{-1})$  e, além disso, a condição de lacuna permite que saibamos que a taxa de aproximação entre as duas dinâmicas é proporcional

29

a  $\tau^{-1}$ . Multiplicando a expressão 3.3.2 à esquerda por  $\bar{U}_{\tau}$  e utilizando a equação 3.2.11, obtemos:

$$\|\bar{U}_{\tau}(s)P(0) - W(s)P(0)\| = \mathcal{O}\left(\tau^{-1}\right)$$
$$\left\| \left( U_{\tau}(s) - \exp\left\{-i\tau \int_{0}^{s} \lambda(s')ds'\right\} W(s) \right) P(0) \right\| = \mathcal{O}\left(\tau^{-1}\right),$$

colocando em função dos parâmetros temporais  $t \in \tau$  das transformações dinâmica e adiabática, respectivamente:

$$\left\| \left( U(t) - \exp\{-i \int_0^{\frac{t}{\tau}} \lambda(\frac{t'}{\tau}) dt' \} W(\frac{t'}{\tau}) \right) P(0) \right\| = \mathcal{O}(\tau^{-1}).$$
(3.3.3)

Pela eq. (3.3.3) vemos que no limite em que  $\tau \to \infty$  o operador de transformação dinâmica U(t) pode ser aproximado pelo operador de transformação adiabática  $W(\frac{t}{\tau})$  a menos de um fator de fase.

Uma das principais razões da ampla aplicabilidade do teorema adiabático é a asserção de que, em um instante posterior, a probabilidade do sistema estar em um estado correspondente ao estado inicial se conserva. Vamos exemplificar essa afirmativa. Seja { $\varphi_j(0)$ } autoestados ortonormais do sistema correspondentes a  $\lambda(0)$ . Temos que  $P(0)\varphi_j(0) = \varphi_j(0)$  e  $W(s)P(0)\varphi_j(0) = \varphi_j(s)$ , ou seja,  $\varphi_j$  é o estado do sistema correspondente à evolução adiabática. Podemos aplicar o termo da norma da expressão 3.3.3 em  $\varphi_j(0)$  obtendo:

$$U_{\tau}(s)\varphi_j(0) - \exp\{-i\tau\int_0^s \lambda(s')ds'\}\varphi_j(s).$$

Se  $\phi(0)$  é o estado inicial do sistema, o estado em um instante posterior é dado pela evolução hamiltoniana e é  $\phi(s) = U_{\tau}\phi(0)$ . Fazendo o produto interno de  $\phi(s)$  com a expressão anterior obtemos

$$\langle \phi(s), U_{\tau}(s) \varphi_j(0) \rangle - \exp\{-i\tau \int_0^s \lambda(s') ds'\} \langle \phi(s), \varphi_j(s) \rangle,$$

lembrando que  $U_{\tau}(s)$  é unitário, temos:

$$\langle \phi(0), \varphi_j(0) \rangle - \exp\{-i\tau \int_0^s \lambda(s') ds'\} \langle \phi(s), \varphi_j(s) \rangle.$$

O módulo dessa expressão pode ser estimado a partir da eq. (3.3.3) e da desigualdade de Cauchy-Schwarz (lembrando que  $\|\phi(s)\| = \|\varphi_i(0)\| = 1$ ):

$$\begin{split} |\langle \phi(0), \varphi(0) \rangle &- \exp\{-i\tau \int_0^s \lambda(s') ds'\} \langle \phi(s), \varphi(s) \rangle | \\ &\leq \left\| \left( U_\tau(s) - \exp\{-i\tau \int_0^s \lambda(s') ds'\} W(s) \right) P(0) \right\| \\ &\leq \mathfrak{O}\left(\tau^{-1}\right), \end{split}$$

## 3.3. EQUIVALÊNCIA DAS TRANSFORMAÇÕES DINÂMICA E ADIABÁTICA QUANDO $\tau \to \infty$

ou seja, quando  $\tau \to \infty$  temos que  $\langle \phi(0), \varphi_j(0) \rangle$  é igual a  $\langle \phi(s), \varphi_j(s) \rangle$  a menos de um fator de fase. Portanto, isso confirma a asserção de que a probabilidade de que o sistema esteja no estado correspondente ao estado inicial se conserva.

Agora consideremos o caso no qual há cruzamento de autovalores, então o operador definido na eq. (3.1.5) na página 26 pode não ser definido e a aproximação feita na eq. (3.3.2) na página 29 não é válida. Para resolver esse problema vamos fazer aproximações infinitesimais em 3.3.2. Sejam  $s_k, \ldots, s_{N-1}$  os autovalores nos quais acontecem cruzamento e  $\delta > 0$  suficientemente pequeno, então a expressão 3.3.1 considerada no intervalo  $s_k - \delta \leq s_k + \delta$  em que  $s_0 = 0$  e  $s_N = 1$  e  $\delta \rightarrow 0$  fica

$$\lim_{\delta \to 0} \left[ \bar{U}_{\tau}^* W \right]_{s_k - \delta}^{s_k + \delta} = 0, \tag{3.3.4}$$

pois  $\bar{U}_{\tau}^*$  é um operador unitário e W é definido na eq. (3.2.9) na página 28 como produto de um operador unitário e um projetor. Agora consideremos um  $\delta$  fixo e um intervalo de *s* no qual é garantido que não há cruzamento, por exemplo  $s_{k-1} + \delta \leq s \leq s_k - \delta$ , para que o operador *S* seja bem definido e os argumentos do caso em que não há cruzamento são válidos. A eq. (3.3.2) na página 29 pode ser aplicada a cada intervalo desse tipo obtendo-se

$$\lim_{\tau \to \infty} \left[ \bar{U}_{\tau}^* W \right]_{s_{k-1}+\delta}^{s_k-\delta} = 0.$$
(3.3.5)

Pelas equações 3.3.4 e 3.3.5 vemos que se primeiramente considerarmos o limite  $\delta \to 0$  e depois  $\tau \to \infty$  conseguimos garantir que o operador *S* seja bem definido e que a expressão  $\bar{U}_{\tau}^*W - P(0)$  tenda à zero:

$$\bar{U}_{\tau}^*W - P(0) = o(1),$$
 (3.3.6)

onde o(1) é algo que vai à zero quando  $\tau \to \infty$ . Multiplicando 3.3.6 pela esquerda por  $\bar{U}_{\tau}$  obtemos

$$\left\| \left( U(t) - \exp\{-i \int_0^{\frac{t}{\tau}} \lambda\left(\frac{t'}{\tau}\right) dt' \} W\left(\frac{t'}{\tau}\right) \right) P(0) \right\| = o(1), \tag{3.3.7}$$

Os resultados obtidos provam as asserções do teorema adiabático que enunciaremos a seguir.

**Teorema 3.3.1.** (Kato) Seja uma família de operadores auto-adjuntos H(t) que representa a hamiltoniana de um sistema e seja  $0 \le t \le \tau$  onde  $\tau \ge 0$ . Definimos a variável  $s = t/\tau$ . Assumimos que o espectro de H contém um autovalor  $\lambda(s)$  com multiplicidade finita e separado por uma lacuna do restante do espectro para todo s. O projetor associado a  $\lambda(s)$  satisfaz a condição de que dP/ds e  $d^2P/ds^2$  sejam contínuos por partes.

*O* operador de evolução hamiltoniana  $U_{\tau}(s)$  obedece a equação

$$U_{\tau}(s)' = -i\tau H(s)U_{\tau}(s), \quad U_{\tau}(0) = 1,$$

onde  $U_{\tau}(s) = U(\frac{t}{\tau}) e'$  denota a derivação em relação a s. O operador de evolução adiabática U(s) é definido de tal forma que obedece a equação

$$U' = iA(s)U(s), \quad U(0) = 1,$$

em que o operador A satisfaz

$$iA(s) = [P'(s), P(s)].$$

Então, para  $\tau \to \infty$  a dinâmica hamiltoniana e adiabática são equivalentes e os operadores de evolução temporal correspondentes a cada uma satisfazem

$$\left\| \left( U_{\tau}(s) - \exp\{-i\tau \int_0^s \lambda(s')ds'\} U(s) \right) P(0) \right\| = \mathfrak{O}\left(\tau^{-1}\right).$$

#### 3.4 Teorema Adiabático sem condição de lacuna

A condição de lacuna que acompanha o teorema adiabático formulado primeiramente por Born e Fock e posteriormente por Kato<sup>1</sup> desempenha um papel fundamental. Além disso, a lacuna provê uma taxa na qual o limite adiabático é alcançado, ou seja, ela provê uma escala de tempo para a transformação adiabática. Esses argumentos indicavam que a condição de lacuna é uma condição intrínseca do teorema adiabático, contudo Avron e Elgart [6], motivados por sistemas físicos interagindo com campos de radiação, provaram em 1998 um teorema adiabático sem lacuna.

A idéia que permeia a prova do teorema adiabático sem condição de lacuna é que existe uma família suave de projetores espectrais de dimensão finita de forma que a transformação adiabática acontece em um determinado espaço espectral. Essa formulação é válida para autovalores embebidos no espectro essencial [52] ou para autovalores no limiar deste espectro. Anunciaremos apenas o resultado principal, uma vez que assume-se que a hamiltoniana do sistema físico estudado nessa dissertação possui apenas espectro discreto.

**Teorema 3.4.1.** Suponha que P(s) é uma projeção espectral de ordem finita ao menos duas vezes diferenciável para a hamiltoniana auto-adjunta H(s), que é limitada e diferenciável para todo  $s \in [0,1]$ . Então, a evolução do estado inicial  $\psi(0) \in$ Range P(0) é tal que no limite adiabático  $\psi(s) \in$  Range P(s) para todo s.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>A condição de lacuna na formulação de Kato foi necessária para que a eq. (3.3.2) na página 29, a partir da qual obtivemos o resultado principal do teorema (eq. (3.3.3) na página 30), fosse bem definida.

Para alcançar essa generalização do teorema adiabático Avron e Elgart supõe que a relação de comutação de Kato

$$[H(s), X(s)] = [P'(s), P(s)]$$
(3.4.1)

pode ser estendida por

$$[H(s), X(s)] + Y(s) = [P'(s), P(s)],$$
(3.4.2)

onde pode-se escolher a norma do operador Y(s) arbitrariamente pequena, mas às custas de um aumento na norma do operador X(s).

A condição de lacuna garante que a evolução do sistema está contida em um subespaço espectral. Na ausência de lacuna o não-tunelamento entre subespaços espectrais vem do fato de que as autofunções associadas ao autovalor embebido no espectro essencial apresentam sobreposição pequena. Essa generalização do teorema adiabático para hamiltonianas com espectro essencial é obtida em detrimento da taxa na qual o limite adiabático é alcançado, isto é, prova-se que para  $\tau \to \infty$  as transformações dinâmica e adiabática são equivalentes, mas não é possível saber em qual taxa isso acontece.

De forma geral, a elaboração do teorema adiabático e suas posteriores generalizações foram motivadas pelo interesse nas aplicações em modelos físicos, mas tal teorema é um importante tópico da Análise Funcional pois permite encontrar soluções para equações diferenciais dadas certas condições.

## Capítulo 4

## Otimização de trajetórias adiabáticas

O teorema adiabático é uma ferramenta relativamente antiga na Mecânica Quântica, de modo que foi extensivamente aplicado na descrição de diversos fenômenos físicos, como por exemplo emissão espontânea por um átomo de dois níveis [42], circuitos supercondutores [50], evolução de estrelas que perdem massa [23], redes óticas [31] entre muitos outros trabalhos nessas e em outras áreas. Além disso, o teorema Adiabático possui grande aplicabilidade em áreas relacionadas à teoria de controle em sistemas quânticos [58], uma vez que no regime adiabático o estado do sistema é o autoestado instantâneo da hamiltoniana, e em computação quântica.

No campo da computação quântica espera-se que algoritmos quânticos possam resolver problemas mais rapidamente do que computadores clássicos. Essa possibilidade recebeu grande atenção com o trabalho de Shor [55], no qual foi apresentado um algoritmo quântico de fatorização, e posteriormente com o algoritmo de busca de Grover [34]. Desde então busca-se desenvolver novos algoritmos quânticos. Em 2000 Farhi et al. [29] propuseram um novo paradigma para a implementação de algoritmos baseado em um regime adiabático para os mesmos, essa nova proposta foi implementada para alguns problemas ([28], [27], [20]) e despertou grande interesse [3] [25].

Tanto na teoria de controle de sistemas quânticos quanto no escopo da computação quântica, o objetivo é evoluir de um estado inicial conhecido do sistema para um estado-alvo com maior precisão possível. Se o estado inicial do sistema é por exemplo, o estado fundamental, e o sistema evolui em um regime adiabático, os estados posteriores serão aproximadamente os estados fundamentais instantâneos, essa aproximação não é exata pois devemos considerar os efeitos de tunelamento no sistema.

Nesse capítulo vamos estudar um sistema quântico aberto de dois níveis

cuja hamiltoniana é uma interpolação entre as hamiltonianas correspondentes ao estado inicial e final e que depende de um parâmetro e, portanto, da trajetória que esse parâmetro realiza. Vamos então investigar quais as condições necessárias para que essa parametrização seja ótima, isto é, resulte no menor tunelamento. Para isso vamos utilizar um teorema devido à Avron et al. [8] que estabelece que a parametrização é ótima e única quando consideramos que o sistema evolui adiabaticamente e sua dinâmica é dada por operadores de Lindblad de defasagem. Finalmente vamos aplicar o resultado desse teorema para provar um análogo ao resultado de Grover [34].

#### 4.1 Parametrização em sistemas de dois níveis

Consideremos um sistema cuja hamiltoniana é dada pela interpolação linear de duas hamiltonianas:

$$H_q = (1 - q)H_0 + qH_1, (4.1.1)$$

onde  $H_0$  é a hamiltoniana correspondente ao estado inicial,  $H_1$  é a hamiltoniana correspondente ao estado final e  $q \in [0, 1]$  a trajetória no espaço das hamiltonianas. Se o sistema está inicialmente no estado fundamental de  $H_0$ , o teorema adiabático (Capítulo 3, Teorema 3.3.1 na página 31) garante que ao final da interpolação o estado do sistema será o estado fundamental de  $H_1$ . A trajetória q é, portanto, função do parâmetro temporal s da transformação adiabática:

$$q \equiv q(s), \tag{4.1.2}$$

lembrando que  $s = \varepsilon t \in [0,1]$  onde  $\varepsilon = 1/\Im$  e  $0 \le t \le \Im$ . Queremos a trajetória q(s) que otimiza a interpolação da equação 4.1.1.

As hamiltonianas  $H_0$  e  $H_1$  podem pertencer a qualquer espaço de Hilbert, porém vamos admitir que elas pertencem a um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  de dimensão N finita e que possuem autovalores simples (de multiplicidade 1). Então, a hamiltoniana  $H_q$  é da forma

$$H_q = \sum_{a=0}^{N-1} e_a(q) P_a(q), \qquad (4.1.3)$$

onde  $e_a(q)$  são autovalores e  $P_a(q)$  são os projetores associados a esses autovalores. O estado do sistema é dado pelo operador densidade  $\rho_{q,\varepsilon}(s)$  e inicialmente é  $\rho_{q,\varepsilon}(0) = P_0(0)$ . De acordo com eq. (2.1.3) na página 7 o valor médio de  $P_0(q)$  é dado por tr $(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s))$ . Para que o sistema permaneça somente no estado fundamental de  $H_q$ , teríamos que ter tr $(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s)) = 1$ , no entanto existe a possibilidade de durante a interpolação entre o estado inicial e o estado-alvo o estado do sistema tenha uma projeção não-nula no subespaço associado a  $P_i(q), i \neq 0$ , isto é, tr $(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s)) \neq 1$ . Essa possibilidade define o efeito de tunelamento:

$$T_{q,\varepsilon}(s) = 1 - \operatorname{tr}(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s)). \tag{4.1.4}$$

Lembrando que tr( $\rho$ ) = 1, podemos reescrever a expressão anterior como  $T_{q,\epsilon} = \text{tr}((\mathbb{1} - P_0(q))\rho_{q,\epsilon})$ . Vemos que de acordo com a definição de valor médio de um operador (eq. (2.1.3) na página 7), essa expressão representa o valor médio do projetor complementar a  $P_0$ , ou seja, está relacionado à probabilidade que o sistema apresenta de mudar do estado fundamental para outro estado ortogonal.

Consideraremos que a evolução do sistema físico estudado é dado pelos operadores de Lindblad descritos no capítulo 2 e cuja forma explícita foi derivada na eq. (2.3.43) na página  $24^{1}$ :

$$\mathscr{L}(\rho) = -i[H,\rho] + rac{1}{2}\sum_{i}\left(2V_{i}\rho V_{i}^{*} - \rho V_{i}^{*}V_{i} - V_{i}^{*}V_{i}\rho\right).$$

A dinâmica gerada por operadores de Lindblad inclui o caso de evoluções unitárias ( $V_i = 0$ ). A partir do exemplo de um sistema de dois níveis, vamos mostrar que para evoluções unitárias existem diversas trajetórias que minimizam o tunelamento.

A hamiltoniana mais geral para um sistema de dois níveis é

$$2H_q = \mathbf{g}(q) \cdot \sigma, \tag{4.1.5}$$

onde  $\mathbf{g}(q)$  é um vetor em  $\mathbb{R}^3$  e  $\sigma$  são as matrizes de Pauli. Vamos supor que  $\mathbf{g}(q)$  satisfaz  $|\mathbf{g}(q)| \ge g_0 \ge 0$ . Consideremos uma parametrização  $q^k(s)$ distretizada em intervalos  $\Delta s = \varepsilon \tau = \frac{2\pi\varepsilon}{g_0}$  como mostrada na figura 4.1. Temos que  $q_- = q(s_k)$  e  $q_+ = q(s_k + \Delta s) = q(s_k + \varepsilon \tau)$ . Denotemos o

Temos que  $q_- = q(s_k)$  e  $q_+ = q(s_k + \Delta s) = q(s_k + \varepsilon \tau)$ . Denotemos o estado do sistema em  $s_k$  por  $\rho_-$  e em  $s_k + \varepsilon \tau$  por  $\rho_+$ . Existe um  $q_*$  entre  $q_-$  e  $q_+$  agindo em um intervalo de tempo  $s_* \leq \frac{2\pi\varepsilon}{g_0}$  cuja hamiltoniana  $H_{q_*}$  mapeia  $\rho_-$  em  $\rho_+$ . A existência de  $q_*$  possui uma justificativa geométrica: consideremos a trajetória de  $\rho_-$  a  $\rho_+$  em uma esfera de Bloch (figura 4.1), definimos o ponto  $q_*$  como a intersecção entre a trajetória e o plano equatorial, o vetor na esfera de Bloch da origem a esse ponto define um eixo de precessão que mapeia  $\rho_-$  em  $\rho_+^2$ . Se  $\rho_- = P_0(q_-)$ , temos:

$$\rho_{+} = \rho(s_{k} + \Delta s)$$
  
=  $U(s_{k} + \Delta s, s_{k})\rho(s_{k})U^{*}(s_{k} + \Delta s, s_{k}),$ 

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>No capítulo 2 denotamos por  $\mathscr{L}$  o operador  $\mathscr{L}$  na representação de Schrödinger. A fim de que a notação não fique pesada, nesse capítulo iremos abandonar o sinal ~ de  $\mathscr{L}$ , porém sua interpretação continua a mesma.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Na esfera de Bloch, evoluções unitárias conservam o comprimento dos vetores correspondentes aos estados inicial e final.



Figura 4.1: Trajetória discretizada em intervalos  $\Delta s = \varepsilon \tau = \frac{2\pi\varepsilon}{g_0}$  nos quais o tunelamento entre  $q_-$  e  $q_+$  é nulo. A curva tracejada é a interpolação entre as trajetórias discretas que forma uma trajetória suave com tunelamento suficientemente pequeno.

onde  $U(s_k + \Delta s, s_k) = \exp(-iH_{q_*}\Delta s)$  é o operador de evolução temporal correspondente a  $H_{q_*}$  para o intervalo de tempo  $\Delta s$ . A expressão anterior fica:

$$\begin{split} \rho_+ &= e^{-iH_{q_*}\Delta s} P_0(q_-) e^{iH_{q_*}\Delta s} \\ &= e^{-iH_{q_*}\Delta s} P_0(q(s_k)) e^{iH_{q_*}\Delta s} \\ &= P_0(q(s_k + \Delta s)) \\ &= P_0(q_+). \end{split}$$



Figura 4.2: Representação na esfera de Bloch da trajetória de  $\rho_-$  a  $\rho_+$ . A intersecção entre a trajetória (linha contínua) e o plano equatorial (sombreado) determina o ponto  $q_*$  e o eixo de precessão que leva  $\rho_-$  em  $\rho_+$  (representado pelo cone).

Pela expressão 4.1.4 vemos que essa trajetória apresenta tunelamento nulo, pois leva estados de  $q_-$  ao correspondente estado de  $q_+$ . Existem diversas curvas suaves que interpolam  $q_-$  e  $q_+$ . O teorema do valor médio [22] nos garante que a diferença entre essas curvas e a parametrização da figura 4.1 é, no máximo,  $\sup_s |\dot{q}(s)| \frac{2\pi\epsilon}{g_0}$ . Podemos escolher tais curvas suaves suficientemente próximas da curva discretizada de forma que o tunelamento seja suficientemente pequeno, portanto existem várias curvas que minimizam o tunelamento no caso de evoluções unitárias.

#### 4.2 Operadores de Lindblad de defasagem

Como vimos anteriormente, a otimização de trajetórias adiabáticas no caso de evoluções unitárias não possui uma solução única. No entanto, evoluções geradas por operadores de Lindblad de defasagem possuem solução única. Tais operadores foram introduzidos pela primeira vez por Aberg et al. [2] no estudo da robustez de algoritmos quânticos de busca baseados em evolução adiabática.

A defasagem é um dos efeitos da decoerência. A decoerência está relacionada aos efeitos de interação entre um determinado sistema e o reservatório (ou ambiente). O estudo de decoerência inclui a elaboração de modelos de interação entre sistema e reservatório, obtenção de equações mestras para o estado do sistema, diagonalização do operador densidade entre outros aspectos. Nesse sentido definimos operadores de Lindblad de defasagem como os operadores que descrevem um sistema que apresentam um dos efeitos de decoerência: a defasagem. Operadores de Lindblad de defasagem formam uma classe especial de operadores de Lindblad que conservam energia ( $\mathscr{L}^*(H) = 0$ ) e possuem N estados estacionários, em contraste com operadores de Lindblad gerais que possuem apenas um estado estacionário. Vamos mostrar que a definição de operadores de Lindblad de defasagem implica em  $[V_i, H] = 0^3$  e vamos derivar uma forma explícita para o caso em que o espaço de Hilbert possui dimensão finita e a hamiltoniana possui autovalores simples. Denominaremos os sistemas quânticos cuja evolução é dada por operadores de Lindblad de defasagem de sistemas quânticos dissipativos.

Pela definição de operadores de Lindblad de defasagem temos que

$$H \in \ker \mathscr{L} \Rightarrow P_a \in \ker \mathscr{L}, \tag{4.2.1}$$

onde  $P_a$  são os projetores associados aos autovalores simples  $e_a$  de H definidos

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Essa definição de operador de Lindblad de defasagem encontra um paralelo em sistemas de dois níveis com hamiltoniana independente do tempo no trabalho de L. Fassarella [30], no qual são definidos sistemas dispersivos de qubits.

em eq. (4.1.3) na página 36. Vamos mostrar que  $P_a \in \ker \mathscr{L} \Rightarrow [V_i, H] = 0$ :

$$0 = P_b \mathscr{L}(P_a)$$
  

$$0 = P_b \left( -i[H, P_a] + \frac{1}{2} \sum_i (2V_i P_a V_i^* - V_i^* V_i P_a - P_a V_i^* V_i) \right)$$
  

$$0 = \sum_i (2P_b V_i P_a V_i^* - P_b V_i^* V_i P_a - P_b P_a V_i^* V_i).$$

Lembrando que os projetores satisfazem  $P_b P_a = \delta_{ba} P_a$ , o traço da expressão anterior é:

$$0 = \operatorname{tr}(P_b \mathscr{L}(P_a))$$
  

$$0 = \sum_i \operatorname{tr}(2P_b V_i P_a V_i^* - P_b V_i^* V_i P_a - P_b P_a V_i^* V_i)$$
  

$$0 = \sum_i \operatorname{tr}(2P_b V_i P_a V_i^* - P_a P_b V_i^* V_i - P_b P_a V_i^* V_i)$$
  

$$0 = \sum_i \operatorname{tr}(P_b V_i P_a V_i^* - \delta_{ab} P_a).$$

Sabemos que o traço de um operador A no espaço de Hilbert considerado é dado por

$$\operatorname{tr}(A) = \sum_{n=0}^{N-1} \langle \varphi_n, A \varphi_n \rangle$$
,

onde  $\{\varphi_n\}$  é uma base ortonormal de  $\mathcal{H}$  e na qual vale  $P_m\varphi_n = \delta_{mn}\varphi_m$ . Temos então que a expressão anterior é

$$0 = \sum_{i,n} \langle \varphi_n, (P_b V_i P_a V_i^* - \delta_{ab} P_a V_i^* V_i) \varphi_n \rangle$$
  

$$0 = \sum_{i,n} (\langle P_b \varphi_n, V_i P_a V_i^* \varphi_n \rangle - \delta_{ab} \langle P_a \varphi_n, V_i^* V_i \varphi_n \rangle)$$
  

$$0 = \sum_{i,n} (\delta_{bn} \langle \varphi_b, V_i P_a V_i^* \varphi_n \rangle - \delta_{an} \delta_{ab} \langle \varphi_a, V_i^* V_i \varphi_n \rangle)$$
  

$$0 = \sum_i \langle \varphi_b, V_i P_a V_i^* \varphi_b \rangle - \delta_{ab} \sum_i \langle \varphi_a, V_i^* V_i \varphi_a \rangle$$
  

$$0 = \sum_i (\langle V_i^* V_i \varphi_b, P_a V_i^* \varphi_b \rangle - \delta_{ab} \langle V_i \varphi_a, V_i \varphi_a \rangle).$$

Consideremos o caso em que  $a \neq b$ :

$$\sum_i \langle V_i^* arphi_b, P_a V_i^* arphi_b 
angle = 0,$$

esse resultado indica que  $V_i^*$ , assim como  $V_i$ , deve ser proporcional a  $P_a$ :

$$V_i = \sum_{a=0}^{N-1} A_{ja} P_a, \tag{4.2.2}$$

onde  $A_{ja}$  é uma matriz  $M \times N$ . Usando 4.2.2 concluímos que  $[V_i, H] = 0$ . Notemos que o caso em que a = b é trivial. Utilizando a forma explícita de  $V_i$  em termos de  $P_a$  na expressão de  $\mathscr{L}(\rho)$  temos:

$$\begin{aligned} \mathscr{L}(\rho) &= -i[H,\rho] + \frac{1}{2} \sum_{i,a,b} \left( 2A_{ia}P_a\rho\overline{A}_{bi}P_b - \overline{A}_{ai}P_aA_{ib}P_b\rho - \rho\overline{A}_{ai}P_aA_{ib}P_b\rho \right) \\ &= -i[H,\rho] + \frac{1}{2} \sum_{i,a,b} \left( 2\overline{A}_{bi}A_{ia}P_a\rho P_b - \overline{A}_{ai}A_{ib}\delta_{ab}\{P_a,\rho\} \right), \end{aligned}$$

definindo a matriz positiva  $\gamma_{ab} \equiv \sum_i \overline{A}_{ai} A_{ib}$ , a forma explícita dos operadores de Lindblad de defasagem fica

$$\mathscr{L}(\rho) = -i[H,\rho] + \sum_{a,b} \gamma_{ba} P_a \rho P_b - \frac{1}{2} \sum_a \gamma_{aa} \{P_a,\rho\}.$$
(4.2.3)

Podemos ainda provar que  $[V_i, H] = 0 \Rightarrow P_a \in \ker \mathscr{L}$ . Se  $[V_i, H] = 0$  então  $[V_i, P_a] = 0$ , com isso é facilmente verificável que  $\mathscr{L}(P_a) = 0$ . Concluímos, portanto, que  $[V_i, H] = 0$  é uma condição necessária e suficiente para que um operador de Lindblad seja de defasagem.

Vamos considerar  $\gamma_{ab} = \gamma \mathbb{1}_{ab}$ , onde  $\mathbb{1}_{ab} = \delta_{ab}$  é a matriz identidade. Podemos obter uma nova forma para o operador de Lindblad de defasagem:

$$\mathscr{L}(\rho) = -i[H,\rho] + \gamma \sum_{a,b} \delta_{ba} P_a \rho P_b - \frac{1}{2} \gamma \sum_a \delta_{aa} (P_a \rho \mathbb{1} + \mathbb{1} \rho P_a),$$

usando a propriedade dos projetores  $\sum_b P_b = 1$  na expressão anterior, temos:

$$\begin{aligned} \mathscr{L}(\rho) &= -i[H,\rho] + \gamma \sum_{a} P_{a}\rho P_{b} - \frac{1}{2}\gamma \sum_{a,b} (P_{a}\rho P_{b} + P_{b}\rho P_{a}) \\ &= -i[H,\rho] + \gamma \sum_{a} P_{a}\rho P_{a} - \gamma \sum_{a=b} P_{a}\rho P_{a} - \gamma \sum_{a\neq b} P_{a}\rho P_{b}, \end{aligned}$$

foi utilizada no segundo termo do lado direito a decomposição da soma de *a* e *b*. Introduzindo a dependência temporal na forma dos operadores de Lindblad de defasagem, temos:

$$\mathscr{L}_{q}(\rho) = -i[H_{q},\rho] - \gamma(q) \sum_{a \neq b} P_{a}(q)\rho P_{b}(q).$$
(4.2.4)

O teorema adiabático apresentado no capítulo 3 é baseado no trabalho de Kato [38] e é válido para evoluções unitárias. Desde então foram estudados muitos teoremas adiabáticos e muitas generalizações foram obtidas. A generalização que enunciaremos a seguir foi apresentada por Joye [37] e possui aplicações para sistemas cuja dinâmica é dada por hamiltonianas dependentes do tempo. Essa generalização também apresenta a condição de lacuna, mas ao contrário do teorema de Kato, não é necessário que a hamiltoniana seja auto-adjunta. A idéia por trás do trabalho de Joye é construir projetores que aproximam os projetores instantâneos quando o sistema evolui adiabaticamente e mostrar que os operadores de evolução temporal da hamiltoniana do sistema também podem ser aproximados por operadores de evolução adiabática.

**Teorema 4.2.1.** Seja  $\mathscr{L}_q$  uma família de operadores de Lindblad de defasagem com hamiltoniana suave  $H_q$ . Seja  $P_a(q)$  a projeção espectral instantânea correspondente aos autovalores simples  $e_a(q)$  de  $H_q$ . Então as soluções  $\rho_{q,\varepsilon}^{(a)}$  da equação mestra

$$\varepsilon \frac{d}{ds} \rho_{q,\varepsilon}^{(a)} = \mathscr{L}_q \rho_{q,\varepsilon}^{(a)},$$

com condição inicial  $ho_{q,\varepsilon}^{(a)}(0) = P_a(0)$  satisfazem

$$\rho_{q,\varepsilon}^{(a)}(s) = P_a(s) + \mathcal{O}(\varepsilon). \tag{4.2.5}$$

Podemos finalmente enunciar o teorema referente ao tunelamento em sistemas quânticos dissipativos obtido por Avron et al. [8].

**Teorema 4.2.2.** Seja  $\mathcal{L}_q$  um operador de Lindblad de defasagem dado por 4.2.4 e  $\rho_{q,\varepsilon}$  solução da equação mestra

$$\varepsilon \frac{d}{ds} \rho_{q,\varepsilon} = \mathscr{L}_q(\rho_{q,\varepsilon}) \tag{4.2.6}$$

com condição inicial  $\rho_{q,\varepsilon}(0) = P_0(0)$  para a parametrização q(s). Seja uma condição de lacuna  $e_a(q) \neq e_b(q)$ ,  $(a \neq b)$ . Então o tunelamento definido em 4.1.4 é dado por

$$T_{q,\varepsilon}(1) = 2\varepsilon \int_0^1 M(q) \dot{q}^2 ds + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \qquad (4.2.7)$$

onde M(q) é

$$M(q) = \sum_{a \neq 0} \frac{\gamma(q) \operatorname{tr}(P_a P_0^{\prime 2})}{(e_0(q) - e_a(q))^2 + \gamma^2(q)} \ge 0$$
(4.2.8)

e independe da parametrização.  $P'_0(q)$  é a derivada de  $P_0(q)$  em relação a q e q a derivada de q em relação a s.

Demonstração. De acordo com a eq. (4.1.4) na página 37 temos

$$T_{q,\varepsilon}(1) = 1 - \operatorname{tr}(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s)),$$

podemos reescrever a expressão anterior como

$$T_{q,\varepsilon}(1) = -\int_0^1 \frac{d}{ds} \operatorname{tr}(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s))ds.$$
(4.2.9)

#### 4.2. OPERADORES DE LINDBLAD DE DEFASAGEM

Vamos estudar o integrando de 4.2.9:

$$\begin{split} \frac{d}{ds} \operatorname{tr}(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s) &= \operatorname{tr}\left(P_0'(q)\dot{q}(s)\rho_{q,\varepsilon}(s) + P_0(q)\dot{\rho}_{q,\varepsilon}(s)\right) \\ &= \operatorname{tr}\left(P_0'(q)\dot{q}(s)\rho_{q,\varepsilon}(s) + P_0(q)\frac{1}{\varepsilon}lind_q(\rho_{q,\varepsilon}(s))\right) \\ &= \operatorname{tr}(P_0'(q)\rho_{q,\varepsilon}(s))\dot{q}(s) + \frac{1}{\varepsilon}\left\langle P_0(q), \mathscr{L}_q(\rho_{q,\varepsilon}(s))\right\rangle, \end{split}$$

utilizando as propriedade do produto de Hilber-Schmidt no último termo e o fato que  $\mathscr{L}_q^*(P_a) = 0$ , temos:

$$\frac{d}{ds}\operatorname{tr}(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s)) = \operatorname{tr}(P_0'(q)\rho_{q,\varepsilon}(s))\dot{q}(s).$$
(4.2.10)

Para avaliar o último termo faremos alguns cálculos auxiliares. Primeiramente notemos que

$$(P_b P_a)' = \delta_{ab} P_b', \tag{4.2.11}$$

somando em *b* a expressão anterior, utilizando a propriedade dos projetores espectrais  $\sum_{c} P_{c} = 1$  e a igualdade anterior temos

$$\sum_{b,c} P_c P'_b P_a + \sum_{b,c} P_b P'_a P_c = \sum_b \delta_{ab} P'_b$$
$$\sum_{b,c} (P_c \delta_{ab} P'_b - P_c P_b P'_a) + \sum_{b=c} P_b P'_a P_b + \sum_{b \neq c} P_b P'_a P_c = P'_a,$$

se utilizarmos a igualdade 4.2.11 e a propriedade  $P_a P_b = \delta_{ab} P_a$ , obtemos

$$P'_{a}(q) = \sum_{b \neq c} P_{b}(q) P'_{a}(q) P_{c}(q).$$
(4.2.12)

Calculemos a identidade abaixo:

$$\begin{aligned} \mathscr{L}_{q}^{*}(P_{a}AP_{b}) &= i[[H, P_{a}AP_{b}] - \gamma \sum_{j \neq k} P_{j}(P_{a}AP_{b})P_{k} \\ &= i \sum_{j} e_{j}(P_{j}P_{a}AP_{b} - P_{a}AP_{b}P_{j}) - \gamma \sum_{j \neq k} \delta_{ja}P_{a}AP_{b}\delta_{kb} \\ &= i \sum_{j} e_{j}(\delta_{ja}P_{a}AP_{b} - P_{a}A\delta_{jb}P_{b}) - \gamma \sum_{j \neq k} \delta_{ja}P_{a}AP_{b}\delta_{kb}, \end{aligned}$$

no caso em que  $a \neq b$  a expressão anterior se reduz a

$$\mathscr{L}_q^*(P_a A P_b) = (i(e_a - e_b) - \gamma) P_a A P_b.$$
(4.2.13)

Somando para  $a \neq b$ e aplicando o operador  $\mathscr{L}_q^*$ em 4.2.13 temos

$$\sum_{a\neq b} \mathscr{L}_q^* \left( \frac{P_a A P_b}{i(e_a - e_b) - \gamma} \right) = \sum_{a\neq b} P_a A P_b,$$

se  $A = P'_0$  podemos utilizar a identidade 4.2.12 e a linearidade de  $\mathscr{L}_q^*$  para escrever

$$\mathscr{L}_q^*\left(\sum_{a\neq b}\frac{P_aP_0'P_b}{i(e_a-e_b)-\gamma}\right)=P_0'(q),$$

definindo o operador

$$X(q) = \sum_{a \neq b} \frac{P_a P'_0 P_b}{i(e_a - e_b) - \gamma},$$
(4.2.14)

temos

$$\mathscr{L}_{q}^{*}(X(q)) = P_{0}'(q). \tag{4.2.15}$$

Substituindo 4.2.15 em 4.2.10 obtemos:

$$\frac{d}{ds}\operatorname{tr}(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s)) = \operatorname{tr}(\mathscr{L}_q^*(X(q))\rho_{q,\varepsilon}(s))\dot{q}(s),$$

utilizando novamente a propriedade do produto de Hilbert-Schmidt e a forma explítica de  $\mathscr{L}$ , temos

$$\frac{d}{ds}\operatorname{tr}(P_0(q)\rho_{q,\varepsilon}(s)) = \operatorname{tr}(X(q)\mathscr{L}_q(\rho_{q,\varepsilon}(s)))\dot{q}(s)$$
$$= \varepsilon\operatorname{tr}(X(q)\dot{\rho}_{q,\varepsilon}(s))\dot{q}(s).$$

Voltando à 4.2.9 e empregando os resultados dos cálculos auxiliares:

$$\begin{split} T_{q,\varepsilon}(1) &= -\int_0^1 \varepsilon \operatorname{tr}(X(q)\dot{\rho}_{q,\varepsilon}(s))\dot{q}(s)ds \\ &= -\varepsilon \operatorname{tr}\left(X(q)\dot{q}(s)\rho_{q,\varepsilon}(s)|_0^1 - \int_0^1 \frac{d}{ds}(X(q)\dot{q}(s))\rho_{q,\varepsilon}(s)ds\right), \end{split}$$

utilizando a aproximação de 4.2.5 e a condição inicial, temos  $\rho_{q,\varepsilon}(s) = P_0(s) + O(\varepsilon)$ . Desfazendo a integração por partes realizada na expressão anterior, obtemos:

$$T_{q,\varepsilon}(1) = -\varepsilon \int_0^1 \operatorname{tr}(X(q)\dot{P}_0(q))\dot{q}(s)ds + \mathcal{O}(\varepsilon^2),$$

de 4.2.15 e $\dot{P}_0(q)=P_0'(q)\dot{q}(s)$  concluímos que

$$T_{q,\varepsilon}(1) = -\varepsilon \int_0^1 \operatorname{tr}(X(q)\mathscr{L}_q^*(X(q)))\dot{q}^2(s)ds + \mathcal{O}(\varepsilon).$$
(4.2.16)

Vamos calcular somente o traço presente no integrando e vamos omitir a dependência de *q*:

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(X\mathscr{L}_q^*(X)) &= \operatorname{tr}(Xi[H,X]) - \operatorname{tr}(\gamma X \sum_{a \neq b} P_a X P_b) \\ &= i \operatorname{tr}(XHX - XXH) - \\ \gamma \operatorname{tr}\left(\sum_{c \neq d} \frac{P_c P_0' P_d}{i(e_c - e_d) - \gamma} \sum_{a \neq b} P_a \sum_{e \neq f} \frac{P_e P_0' P_e}{i(e_e - e_f) - \gamma} P_b\right), \end{aligned}$$

com a ajuda da propriedade cíclica do traço concluímos que o primeiro termo da direita é nulo. No segundo termo empregamos repetidas vezes a identidade 4.2.11 e a ortogonalidade dos projetores e chegamos ao resultado:

$$\operatorname{tr}(X\mathscr{L}_q^*(X)) = -2\gamma \sum_{a \neq 0} \frac{\operatorname{tr}(P_a(P_0')^2}{(e_a - e_0)^2 + \gamma^2}$$

que, quando inserido em 4.2.16, resulta em

$$T_{q,\varepsilon}(1) = 2\varepsilon \int_0^1 M(q) \dot{q}^2(s) ds + \mathcal{O}(\varepsilon^2),$$

onde M(q) é dado por 4.2.8.

Notemos alguns aspectos da expressão 4.2.7. Primeiramente temos que  $2\varepsilon M(q)\dot{q}^2(s) \ge 0$ , isto é, a taxa de tunelamento é positiva, significando que o que tunela não pode ser recuperado.

A equação 4.2.7 possui a forma do funcional de ação em problemas comuns de uma partícula em um campo de força conservativo. A ação *S* de uma partícula que possui somente energia cinética é dada por

$$S(q) = \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2} m \dot{q}^2(t) dt,$$

onde *m* é a massa da partícula, *q* é a coordenada generalizada, no caso a possição e *q* sua derivada temporal. Analogamente, podemos identificar em 4.2.7 o termo de massa M(q) e a velocidade  $\dot{q}(s)$ . O termo análogo à lagrangeana é, portanto, a taxa de tunelamento  $2\varepsilon M(q)\dot{q}^2(s)$  que é positiva. Como a mesma não depende explicitamente do tempo, a taxa de tunelamento na trajetória otimal é uma constante *A*:

$$\frac{d}{ds}T_{q,\varepsilon}(s) = 2\varepsilon M(q)\dot{q}^2(s) = A, \qquad (4.2.17)$$

temos então que

$$\dot{q}(s) = \sqrt{\frac{\tau}{M(q)}},\tag{4.2.18}$$

onde  $\tau$  é uma constante positiva. Vemos que  $\dot{q} \propto |e_0 - e_a|$ , isto é, a velocidade é proporcional à lacuna entre o autovalor do estado fundamental e o conjunto dos autovalores restantes. Ou seja, se a lacuna é grande, a velocidade também o será. O mesmo ocorre se  $P'_0$  é pequeno, isto é, se a projeção do estado do sistema no estado fundamental muda lentamente.

Em um paralelo com o princípio de Hamilton para sistemas físicos clássicos, as equações 4.2.7 e 4.2.17 definem um problema de otimização que

possui uma trajetória que minimiza o tunelamento [32], ao contrário das evoluções unitárias da seção anterior. Usando o resultado de 4.2.18 em 4.2.7 temos que o tunelamento mínimo é dado por:

$$T_{q,\varepsilon}^{(min)} = 2\varepsilon\tau + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{4.2.19}$$

Um sistema de dois níveis cuja hamiltoniana é dada pela eq. (4.1.5) na página 37 possui autovalores  $e_0(q) = -\frac{|\mathbf{g}(q)|}{2}$  e  $e_1(q) = \frac{|\mathbf{g}(q)|}{2}$  e projetores ortognais

$$P_0 = -\frac{1}{2|\mathbf{q}|} \begin{pmatrix} g_3 - |\mathbf{g}| & g_1 + ig_2 \\ g_1 + ig_2 & -g_3 - |\mathbf{g}| \end{pmatrix}$$
(4.2.20)

e

$$P_1 = \frac{1}{2|\mathbf{q}|} \begin{pmatrix} |\mathbf{g}| + g_3 & g_1 - ig_2 \\ g_1 + ig_2 & |\mathbf{g}| - g_3 \end{pmatrix},$$
(4.2.21)

onde  $g_i$  é a i-ésima componente do vetor **g**, omitimos a dependência em q para melhor visualização da forma dos projetores. Utilizando 4.2.20 e 4.2.21 e possível calcular o termo de massa M(q) dado por 4.2.8 para um sistema de dois níveis:

$$M(q) = \frac{\gamma(q)}{4} \frac{|\hat{\mathbf{g}}'|^2(q)}{g^2(q) + \gamma^2(q)},$$
(4.2.22)

onde  $\hat{\mathbf{g}}(q)$  é o versor na direção de  $\mathbf{g}(q)$  e  $g(q) = |\mathbf{g}(q)|$  é a lacuna entre os autovalores.

Agora vamos aplicar o método de otimização obtido para um sistema de dois níveis em um algoritmo de busca quântico. Seguiremos as indicações de Avron et al. [8] para estimar o tempo do algoritmo baseado em uma evolução adiabática.

#### 4.3 Aplicação em computação quântica: Algoritmo de Grover

O conceito de um dispositivo computacional baseado em fenômenos da Mecânica Quântica começou a ser explorado na segunda metade do século XX. Um computador clássico é construído a partir de circuitos elétricos e armazena dados em bits, um bit pode assumir os valores 0 ou 1. Um computador quântico, por outro lado, seria construído a partir de circuitos quânticos e armazenaria informações em bits quânticos - qubits - que podem ser representados por 0 e 1 ou qualquer superposição dos mesmos [48]. Devido a propriedade de superposição de estados, um computador quântico poderia resolver problemas em um tempo muito menor do que um computador clássico. O desenvolvimento de algoritmos quânticos ganhou grande interesse com o trabalho de Shor [55] para fatorização de números

## 4.3. APLICAÇÃO EM COMPUTAÇÃO QUÂNTICA: ALGORITMO DE GROVER

inteiros e posteriormente com o algoritmo de busca em um banco de dados não-estruturado apresentado por Grover [34]. O último prevê um tempo de processamento maior do que o algoritmo de Shor, porém possui mais aplicações. Façamos uma breve descrição de como o algoritmo quântico de busca funciona.

Suponhamos que queremos efetuar uma busca em um espaço de N elementos. A busca é efetuada nos índices dos elementos, isto é, no intervalo de 0 a N - 1. Escolhemos  $N = 2^n$  para que o conjuntos dos índices possa ser armazenado em n bits. Seja k um índice, definimos a função f(k) tal que f(k) = 1 se k é solução da busca e f(k) = 0 se k não é solução. Definimos então um operador unitário denominado oráculo que marca as soluções do problema de busca invertendo a fase do estado correspondente à solução. Foi mostrado por Boyer et al. [17] que são necessários  $O(\sqrt{N})$  aplicações do oráculo para a obtenção da solução.

O desenvolvimento de novos algoritmos quânticos é uma tarefa nãotrivial. Em 2000 Farhi et al. [29] apresentaram um novo paradigma para o desenvolvimento de algoritmos baseado na evolução adiabática. A idéia principal é que em um instante inicial a hamiltoniana do sistema apresenta um estado fundamental que é fácil de construir e em um instante final o estado fundamental da hamiltoniana é o estado-alvo que representa a solução para o problema de busca. Essa nova abordagem já apresenta diversas aplicações ([28], [20], [3], [25], [36], [2], [1], [17]).

Vamos descrever a idéia de um algoritmo de busca em um espaço de N elementos. Devido ao uso de projetores ortogonais nessa descrição utilizaremos brevemente a notação de Dirac. Podemos relacionar esse espaço de N elementos com um espaço de Hilbert de dimensão N e uma base ortonormal  $\{|z\rangle\}_{z=1}^{N}$  onde o elemento que satisfaz a condição de busca é  $|\tilde{z}\rangle \in \{|z\rangle\}_{z=1}^{N}$ . A hamiltoniana é da forma 4.1.1

$$H(q) = (1 - q)H_0 + qH_1,$$

onde  $H_0$  é escolhido como:

$$H_0 = |a\rangle\langle a|, \tag{4.3.1}$$

onde

$$|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{z=1}^{N} |z\rangle.$$
(4.3.2)

O estado fundamental de  $H_0$  é facilmente obtido e o estado fundamental de  $H_1$  codifica a solução da busca, portanto  $H_1$  é o projetor em  $|\tilde{z}\rangle$ :

$$H_1 = |\tilde{z}\rangle \langle \tilde{z}|. \tag{4.3.3}$$

Podemos definir um novo vetor no espaço de Hilbert associado ao problema de busca de forma que esse novo vetor  $|b\rangle$  é ortogonal a  $|a\rangle$ :

$$|b\rangle = \frac{\sqrt{N}|\tilde{z}\rangle - |a\rangle}{\sqrt{N-1}},$$
 (4.3.4)

notemos que  $\langle a|b\rangle = 0$  e  $\langle b|b\rangle = 1$ , isto é,  $\{|a\rangle, |b\rangle\}$  formam uma base ortonormal que descreve o problema de busca quando reduzido ao espaço de duas dimensões gerado por  $|a\rangle \in |b\rangle$ . A hamiltoniana escrita nessa base é

$$H(q) = \begin{pmatrix} 1 - q\frac{N-1}{N} & q\frac{\sqrt{N-1}}{N} \\ q\frac{\sqrt{N-1}}{N} & q\frac{N-1}{N} \end{pmatrix}.$$
 (4.3.5)

Os autovalores de H(q) em 4.3.5 são facilmente calculáveis e a lacuna g entre eles é

$$g^{2} = \frac{N + 4(N - 1)(q^{2} - q)}{N}.$$
(4.3.6)

Podemos também calcular  $|\hat{\mathbf{g}}'(q)|$ :

$$|\hat{\mathbf{g}}'(q)| = \frac{2}{g^2(q)}\sqrt{\frac{1}{N} - \frac{1}{N^2}}.$$
 (4.3.7)

Da eq. (4.2.18) na página 45 é possivel obter

$$\sqrt{\tau} = \int_0^1 \sqrt{M(q)} dq, \qquad (4.3.8)$$

que é a escala de tempo do problema de otimização de trajetórias adiabáticas para um sistema evoluindo com um operador de Lindblad de defasagem. Para realizar uma estimativa de  $\tau$  vamos utilizar a forma explícita do termo de massa para um sistema de dois níveis dada pela eq. (4.2.22) na página 46:

$$\sqrt{\tau} = \int_0^1 \sqrt{\frac{\gamma(q)}{4} \frac{|\hat{\mathbf{g}}'|^2}{g^2(q) + \gamma^2(q)}} \mathrm{d}q$$

usando as expressões de g(q) e  $\hat{\mathbf{g}}'$ , eq. 4.3.6 e 4.3.7 respectivamente, obtemos

$$\sqrt{\tau} = \int_0^1 \sqrt{\frac{\gamma(q)(N-1)}{(N+4(N-1)(q^2-q))^2 \left(\gamma^2(q) + \frac{N+4(N-1)(q^2-q)}{N}\right)}} dq.$$

A figura 4.3 apresenta o gráfico de  $\sqrt{M(q)}$  em função de q. Vemos que podemos aproximar a integral em 4.3.8 pela área do retângulo sombreado. A altura desse retângulo é o valor máximo de  $\sqrt{M(q)}$ , que corresponde a  $q = \frac{1}{2}$ . A largura  $\Delta q$  do retângulo é admitida como  $\Delta q = \tilde{q}_1 - \tilde{q}_2$ , onde  $\tilde{q}_{1,2}$  são os



Figura 4.3: Gráfico de  $\sqrt{M(q)}$  em função de q. A área sombreada corresponde à região de largura  $1/\sqrt{N}$  e altura  $\sqrt{M(\frac{1}{2})}$ .

valores de *q* correspondentes à meia altura de  $\sqrt{M(q)}$ . Para determinar  $\tilde{q}_{1,2}$  é útil realizar a seguinte mudança de variável,  $x = \sqrt{N(2q-1)}$ , e considerar  $\gamma$  constante em relação a *q*. Então  $\sqrt{\tau}$  fica na forma:

$$\sqrt{\tau} = \frac{\sqrt{\gamma}}{2} \sqrt{1 - \frac{1}{N}} \int_{-\sqrt{N}}^{\sqrt{N}} \frac{1}{\left(1 + x^2 - \frac{x^2}{N}\right) \sqrt{\frac{1 + x^2 - \frac{x^2}{N}}{N} + \gamma^2}} dx.$$

De maneira simplificada temos:

$$\sqrt{\tau} = rac{\sqrt{\gamma}}{2} \sqrt{1 - rac{1}{N}} \int_{-\sqrt{N}}^{\sqrt{N}} F(x) \mathrm{d}x,$$

onde F(x) é o integrando da expressão anterior. Vemos que  $F^{max}(x)$  quando x = 0, de modo que  $\tilde{x}$  pode ser obtido fazendo  $F(\tilde{x}) = \frac{F^{max}(x)}{2}$ , isto é,  $F(\tilde{x}) = \frac{F(0)}{2}$ . Utilizando a forma de F(x) e considerando  $N \gg 1$ , temos que  $\tilde{x} = \pm 1$ , ou seja,  $\Delta x = 2$ . Voltando à variável q, temos que  $\Delta q = \frac{1}{\sqrt{N}}$ . Finalmente, da expressão 4.3.8 temos que  $\sqrt{\tau} \sim \sqrt{M(\frac{1}{2})} \frac{1}{\sqrt{N}}$ , isto é,

$$\tau = \mathcal{O}\left(\frac{M(\frac{1}{2})}{N}\right). \tag{4.3.9}$$

Da expressão 4.3.6 obtemos que o valor mínimo  $g_0$  da lacuna é da ordem de  $1/\sqrt{N}$ ,  $g_0 \sim 1/\sqrt{N}$ . Queremos estimar a defasagem  $\gamma$  em termos de N. Utilizando a expressão do termo de massa para um sistema de dois níveis 4.2.22 e a estimativa do tempo do problema de busca para a trajetória ótima dado por 4.3.9, tentaremos estimar esse tempo para diferentes relações enre  $\gamma \in g_0$ :

- 1.  $\gamma \ll \varepsilon$  é o regime de  $\tau \gg \gamma^{-1}$ , portanto fora da formulação de regimes adiabáticos.
- 2.  $\varepsilon \ll \gamma \ll g_0$  é equivalente a  $\tau \gg \gamma^{-1} \gg \sqrt{N}$ , consistente com o tempo estimado para o algoritmo de Grover.
- 3.  $\gamma \sim g_0$  nesse regime a expressão 4.2.22 para  $q = \frac{1}{2}$  fica  $M(1/2) \sim 1/g_0^3$  e obtemos de 4.3.9 que  $\tau = O(\sqrt{N})$ , novamente consistente com a estimativa do algoritmo de Grover.
- 4.  $\gamma \gg g_0$  para esse regime obtemos de 4.2.22 que  $M \sim \frac{1}{\gamma g_0^2}$  e o tempo estimado é  $\tau = O(\gamma^{-1})$ .

Para o primeiro regime a formulação desenvolvida aqui não é válida, portanto não podemos estimar o tempo do análogo ao algoritmo de Grover. O segundo e terceito regime são consistentes com a escala de tempo esperada para o algoritmo de Grover [17]. Já o quarto regime apresenta uma possibilidade de escolher  $\gamma$  de forma que  $\tau > O(\sqrt{N})$ . Porém foi mostrado por Roland e Cerf [53] que o algoritmo de Grover na formulação adiabática é ótimo para  $O(\sqrt{N})$  número de operações. Essa estimativa é feita para uma evolução unitária do sistema com o reservatório. O caso aqui estudado é uma evolução dada pelos operadores de Lindblad de defasagem (eq. (4.2.4) na página 41) que incluem evoluções unitárias. A seguir estudaremos os fatores que permitem que o tempo do algoritmo de Grover seja menor do que o estimado.

O princípio da incerteza [4] relaciona a estimativa da dinâmica do sistema e o intervalo de tempo necessário para obter essa estimativa a partir da relação  $\Delta t \Delta H \ge 1$ , onde  $\Delta H = g_0$ . No caso do quarto regime analisado temos  $g_0 \ll \gamma$ , obtemos então que

$$\frac{1}{\Delta t} \ll \gamma. \tag{4.3.10}$$

Estudado pela primeira vez por Misra e Sudarshan [46] para o caso de sistemas quânticos instáveis, o efeito Zeno quântico consiste na inibição da transição entre estados em um sistema quântico devido a frequente operação de medir esse estado. Isso equivale a dizer que para um sistema inicialmente no estado fundamental de uma determinada hamiltoniana, ele continuará no estado fundamental instântaneo da hamiltoniana se forem efetuadas medições de energia em intervalos de tempos suficientemente pequenos. No caso do algoritmo de Grover aplicado em sistemas quânticos dissipativos, podemos interpretar  $\gamma$  como a taxa na qual as operações de medida de  $H_q$  são efetuadas. Para o regime descrito anteriormente no qual vale 4.3.10, o

50

## 4.3. APLICAÇÃO EM COMPUTAÇÃO QUÂNTICA: ALGORITMO DE GROVER

efeito Zeno quântico permite que o tempo ótimo seja menor do que o tempo  $O(\sqrt{N})$  previsto para o algoritmo de Grover.

O tipo de reservatório correspondente ao regime em que  $\gamma \gg g_0$  não é universal. Para que o seja, a estimativa em 4.3.9 determina um limite para a defasagem representada por  $\gamma$  em que a defasagem satisfaz  $\gamma \leq g_0$ .

## Conclusão

Sistemas quânticos de dois níveis são os sistemas quânticos mais simples concebíveis, no entanto apresentam enorme gama de aplicações: desde a física de partículas de spin 1/2 até a computação quântica. Nessa última área, a teoria de controle quântico desempenha um papel fundamental na implementação de algoritmos quânticos, uma vez que um algoritmo consiste na aplicação de um número suficiente de operações em uma entrada de forma que a saída seja a solução do problema. Nesse contexto, o modelo adiabático para a computação quântica proposto por Farhi et al. [29] apresenta novas possibilidades.

Ainda no escopo da computação quântica baseada em evoluções adiabáticas, foi colocada por van Dam et al. [25] a pergunta: esse processo converge para a solução desejada em um tempo adequado (comparável ao tempo estimado para algoritmos quânticos)? A resposta é positiva. No entanto essa pergunta levanta questões sobre quais as possibilidades da otimização de evoluções adiabáticas em sistemas de dois níveis. É nesse sentido que Avron et al. [8] mostrou que para sistemas quânticos dissipativos existe uma única parametrização que otimiza a evolução do estado inicial ao estado final. Vimos que quando aplicamos esse método a sistemas de dois níveis no modelo de algoritmos quânticos de busca, a condição para que o reservatório seja universal nos dá um limite para a taxa de defasagem do sistema.

Esse trabalho mostra que ferramentes relativamente antigas da Mecânica Quântica, como o teorema adiabático e a teoria de semigrupos dinâmicos, possuem aplicações em áreas novas e que, além disso, geram resultados consistentes e com diversas aplicações. Deste modo, pretendemos futuramente implementar o método para otimização de trajetórias adiabáticas estudado nessa dissertação em sistemas submetidos a interações externas, de forma a tentar recuperar resultados já conhecidos, por exemplo para perturbações periódicas ([12], [13], [10]), e desenvolver possíveis aplicações para controle de sistemas de dois níveis com diversos tipos de dinâmica.

## Glossário

Esse glossário desempenha a função usual de apresentar uma lista de termos e suas respectivas definições. As entradas do glossário apresentam em negrito o nome do termo e na mesma linha o símbolo correspondente ao termo (se houver), na linha seguinte é apresentada a definição do termo.

#### A

#### álgebra C\*

Uma álgebra de Banach-\*  $\mathscr{C}$  com a propriedade que  $||aa^*|| = ||a||^2$  para todo  $a \in \mathscr{C}$  é dita ser uma álgebra  $C^*$ .

#### álgebra de Banach

Uma álgebra de Banach  $\mathscr{B}$  é um espaço de Banach dotado de um produto associativo no qual vale  $||uv|| \le ||u|| ||v||$  para todo  $u, v \in \mathscr{B}$ . Além disso, dizemos que uma álgebra de Banach-\* é uma álgebra de Banach com involução que satisfaz  $||u|| = ||u^*||$  para todo  $u \in \mathscr{B}$ .

#### В

#### Banach, espaço de *B*

Espaço vetorial sobre um corpo escalar dotado de norma e completo em relação à métrica induzida por essa norma.

#### Bloch, esfera de

Representação geométrica dos estados de um sistema de dois níveis. Os pontos na superfície da esfera representam os estados puros do sistema, enquanto os pontos em seu interior representam os estados de mistura.

#### C

#### **convergência forte** *s* – lim

Seja *A* um operador limitado em um espaço de Hilber, isto é,  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Dizemos que uma sequência generalizada  $\{A_n\}$  converge fortemente a *A* quando

$$\lim_{n \to \infty} \|A_n x - A x\| = 0$$

para todo  $x \in \mathcal{H}$ .

#### **convergência fraca** *w* - lim

Seja *A* um operador limitado agindo em um espaço de Hilbert, isto é,  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Dizemos que uma sequência generalizada  $\{A_n\}$  converge fracamente a *A* quando

$$\lim_{n\to\infty} \langle A_n x, y \rangle = \langle A x, y \rangle$$

para  $x, y \in \mathcal{H}$ .

convergência ultrafraca  $w^* - \lim$ 

Seja *A* um operador limitado agindo em um espaço de Hilbert, isto é,  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Dizemos que uma sequência generalizada  $\{A_n\}$  converge ultrafracamente a *A* quando

$$\lim_{n\to\infty} \operatorname{tr}[A_n\rho] = \operatorname{tr}[A\rho]$$

para  $x, y \in \mathcal{H}$  e todo  $\rho \in \mathcal{T}^1$ .Um operador é dito ser normal quando é contínuo na topologia ultrafraca.

#### Ε

#### espectro $\sigma$

Seja  $\mathscr{B}$  uma álgebra de Banach com unidade e  $u \in \mathscr{B}$ . Define-se o espectro de *u* denotado por  $\sigma(u)$  como

$$\sigma(u) := \{\lambda \in \mathbb{C} | (\lambda \mathbb{1} - u) \notin \operatorname{Inv}(\mathscr{B}) \}$$

onde  $Inv(\mathscr{B})$  denota o conjunto dos elementos inversíveis de  $\mathscr{B}$ .

#### G

#### gráfico de um operador

Sejam *X* e *Y* dois espaços vetoriais e  $A : X \to Y$  um operador linear. O gráfico de *A*, denominado  $\Gamma(A)$  é o subconjunto de  $X \times Y$  definido por  $\Gamma(A) = \{(x, Ax), x \in D(A)\}.$ 

#### Η

#### Hilbert, espaço de $\mathcal{H}$

Espaço vetorial sobre um corpo escalar dotado de produto interno  $x, y \in \mathcal{H} \mapsto \langle x, y \rangle \in \mathbb{C}$  e completo em relação à métrica induzida por esse produto interno. Um espaço de Hilbert que possui todos os conjuntos ortonormais contáveis é chamado de **espaço de Hilbert separável**.

#### Hilbert-Schmidt, produto de $\langle ., . \rangle_2$

Um operador A de classe traço,  $A \in \mathcal{T}^1$ , é dito ser um operador de Hilbert-Schmidt se  $|A|^2 \in \mathcal{T}^1$ . O conjunto de todos os operadores de

Hilbert-Schmidt agindo em um espaço de Hilbert é denotado por  $\mathscr{T}^2$ . O produto de Hilbert-Schmidt é definido por

$$\langle A,B\rangle_2 := \operatorname{tr}(A^*B),$$

para  $A, B \in \mathscr{T}^2$ .

0

#### operador adjunto $A^*$

Seja *A* um operador em um espaço de Hilbert com domínio D(A). O adjunto de *A* é o operador definido no domínio

$$D(A^*) := \{ x \in \mathcal{H} || (Ay, x) | \le C_x ||y|| \}$$

para alguma constante  $C_x$  independente de y e para todo  $y \in D(A)$ .  $A^*$  :  $D(A^*) \rightarrow \mathcal{H}$  satisfaz

$$\langle Ay, x \rangle = \langle y, A^*x \rangle$$

para  $y \in D(A)$ ,  $x \in D(A^*)$ .

#### operador auto-adjunto

Um operador *A* é dito ser auto-adjunto se  $A = A^*$  (notemos que isso implica em  $D(A) = D(A^*)$ ).

#### operador fechado

Sejam X e Y espaços de Banach e  $A : X \to Y$  um operador linear. Então A é denominado operador fechado se o gráfico de A,  $\Gamma(A)$ , é um subconjunto fechado de  $X \otimes Y$ . Ou seja, se  $\{(x_n, Ax_n)\}_{n \in \mathbb{N}}$  é uma seqüência de elementos de  $\Gamma(A)$  convergente em  $X \otimes Y$ , então  $\lim_{n\to\infty} (x_n, Ax_n) = (x, y) \in \Gamma(A)$ . **operador limitado**  $\mathcal{B}(X, Y)$ 

# Um operador *T* agindo entre dois espaços vetoriais normados $T : X \to Y$ é dito ser limitado se existe uma constante $M \ge 0$ tal que $||Tx||_Y \le M ||x||_X$ para todo $x \in X$ . Um resultado importante é que um operador linear agindo entre dois espaços vetoriais normados é contínuo se e somente se for limitado. Denotamos o conjunto dos operadores limitados de $\mathcal{H}$ em $\mathcal{H}$

#### por $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ . operador positivo

Seja  $\mathcal{H}$  um espaço de Hilbert. Um operador  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  é dito ser um operador positivo se  $\langle Ax, x \rangle \geq 0$  para todo  $x \in X$ .

Р

#### projetor ortogonal P

Um operador linear não-nulo *P* agindo em um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  é dito ser um projetor se  $P^2 = P$ . Além disso, *P* é dito ser um projetor ortogonal se  $P = P^*$ .

#### traço tr

Seja  $\{\varphi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$  uma base ortonormal completa de um espaço de Hilbert separável  $\mathcal{H}$ . O traço de um operador  $A \in \mathscr{T}^1(\mathcal{H})$  é dado por tr $A = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \varphi_n, A\varphi_n \rangle_{\mathcal{H}}$ . Pode-se ainda mostrar que o traço independe da particular base ortonormal completa  $\{\varphi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$  escolhida.

58

Т

## Índice Remissivo

algoritmo de busca, 47

Bloch esfera de, 13, 37, 38 classe traço, 6 convergência forte, 8 fraca, 9 ultrafraca, 18, 20 efeito Zeno quântico, 50 equação mestra, 10 Schrödinger, de, 26 espaço de estados, 6 espectral representação, 26, 36 espectro, 6, 26 essencial, 33

intertwining, propriedade de, 28

lacuna condição de, 29

matriz de Pauli, 12, 37 unital, 11, 14, 22

operador auto-adjunto, 6, 26 de Lindblad, 23, 24, 37 de defasagem, 41

de projeção, veja projetor densidade, 6, 10 fechado, 9 positivo, 6 positividade completa, 11 produto de Hilbert-Schmidt, 23, 43, 44 projetor, 22, 27, 28, 36, 39 qubit, 46 representação \*-representação, 15, 17 de Stinespring, 18 resolvente reduzido, 26 semigrupo dinâmico, 10 uniparamétrico de operadores lineares, 8 sistemas quânticos dissipativos, 42 teorema Gorini-Kossakowski-Lindblad-Sudarshan, de, 21 Stinespring, de, 15 adiabático, 30, 31, 36, 42 sem condição de lacuna, 32 Choi, de, 14, 22 espectral, 6 Hille-Yosida, de, 9, 11, 22 Kraus, de, 18

#### ÍNDICE REMISSIVO

Stone, de, 8 traço, 6, 40, 45 classe, *veja* classe traço norma, 6 parcial, 7 transformações unitárias grupo de, 7, 10 tunelamento, 37, 42 em sistema de dois níveis, 46 taxa de, 45

valor médio, 7

60
## **Referências Bibliográficas**

- J. Aberg, D. Kult, and Sjöqvist. Quantum adiabatic earch with decoherence in the instantaneous energy eigenstates. *Physical Review A*, 72:042317, 2005.
- [2] J. Aberg, D. Kult, and E. Sjöqvist. Rosbustness of the adiabatic quantum search. *Physical Review A*, 71:060312, 2005.
- [3] Dorit Aharonov, Wim van Dam, Julia Kempe, Zeph Landau, Seth Lloyd, and Oded Regev. Adiabatic quantum computation is equivalent to standard quantum computation. *SIAM Journal of Computing*, 37:166, 2007.
- [4] Y. Aharonov, S. Massar, and S. Popescu. Measuring energy, estimating hamiltonians, and the time-energy uncertainty relation. *Physical Review A*, 66:052107, 2002.
- [5] R. Alicki and M. Fannes. *Quantum Dynamical Systems*. Oxford University Press, 2001.
- [6] J. E. Avron and A. Elgart. Adiabatic theorem without a gap condition. *Communications in Mathematical Physics*, 203:445–463, 1999.
- [7] J. E. Avron, M. Fraas, G. M. Graf, and P. Grech. Landau-zener tunneling for dephasing lindblad evolutions. *Communications in Mathematical Physics*, 305(3):633–639, 2009.
- [8] J. E. Avron, M. Fraas, G. M. Graf, and P. Grech. Optimal time-schedule for adiabatic evolution. *Physical Review A*, 82:040304, 2010.
- [9] J. E. Avron, R. Seiler, and L. G. Yaffe. Adiabatic theorems and applications to the quantum hall effect. *Communications in Mathematical Physics*, 156:649–650, 1993.
- [10] V. G. Bagrov, J. C. A. Barata, and D. M. Guitman. Aspects of two-level systems under external time dependent fields. *J. Phys. A. Math. Gen.*, 34:10869–10879, 2001.

- [11] J. C. A. Barata. Curso de física matemática. Livro on-line, São Paulo.
- [12] J. C. A. Barata. Convergent perturbative solutions of the schrödinger equation for a two-level system with hamiltonians depending periodically on time. *Ann. Henri Poncaré*, 2:936–1005, 2001.
- [13] J. C. A. Barata and D. Cortéz. Time evolution of two-level systems driven by periodic fields. *Physics Letters A*, 301:350–360, 2002.
- [14] M. Born and V. Fock. Beweis des adiabatensatzes. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 51:165–180, 1928.
- [15] M. Born and R. Oppenheimer. Zur Quantentheorie der Molekeln. Annalen der Physik, 389:457–484, 1927.
- [16] U. Boscain, G. Charlot, J. Gauthier, S. Guèrin, and H. Jauslin. Optimal control in laser-induced population transfer for two- and three-level quantum systems. *Journal of Mathematical Physics*, 43(5):2107, 2002.
- [17] M. Boyer, G. Brassard, P. Hoeyer, and A. Tapp. Tight bounds on quantum searching. *Fortsch. Phys.*, 46:493–5–6, 1998.
- [18] Ola Bratteli and Derek Robinson. *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics*, volume 1. Springer, 2003.
- [19] H. Carteret, D. R. Terno, and K. Zyczkowski. Physical accessibility of non-completely positive maps. *Phys. Rev. A*, 77:042113, 2008.
- [20] A. M. Childs, E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann. Finding cliques by quantum adiabatic evolution. *Quantum Information and Computation*, 2(3), 2002.
- [21] M. Choi. Completely positive linear maps on complex matrices. *Linear Algebra and its Applications*, pages 285–290, 1975.
- [22] R. Courant. *Differential and Integral Calculus,* volume 1. John Wiley Professional, 1988.
- [23] L. Dai, R. D. Blandford, and P. P. Eggleton. Adiabatic evolution of mass-losing stars, 2011.
- [24] D. D'Alessandro and M. Dahieh. Optimal control of two-level quantum systems. *IEEE Transactions on automatic control*, 46(6):866, 2001.
- [25] Win van Dam, M. Moscal, and U. Vazirani. How powerful is adiabatic quantum computation. In *Proceedings of the 42nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, pages 279–287, 2001.

- [26] E. B. Davies. Quantum Theory of Open Systems. Academic Press, London, 1976.
- [27] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann. Quantum adiabatic evolution algorithms with different paths, 2002.
- [28] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, J. Lapan, A. Lundgren, and D. Preda. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an np-complete problem. *Science*, 292:472–476, 2001.
- [29] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser. Quantum computation by adiabatic evolution, 2000.
- [30] L. Fassarella. Dispersive quantum systems: A class of isolated non-time reversal invariant quantum systems. *Brazilian Journal of Physics*, 2011.
- [31] A. Fratalocchi and G. Assanto. Nonlinear adiabatic evolution and emission of coherent bloch waves in optical lattices. *Physical Review A*, 75(1):013626, 2007.
- [32] I. M. Gelfand and S. V. Fomin. *Calculus of Variations*. Dover Publications, 2000.
- [33] V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G Sudarshan. Completely positive dynamical semigroups of n-level systems. *Journal of Mathematical Physics*, 17(5):821–825, 1976.
- [34] L. K. Grover. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In Proceedinsg, 28th Annual ACM Sysmposium on the Theory of Computing (STOC), pages 212–219, 1996.
- [35] E. Hille. *Functional Analysis ans Semigroups*, volume 30. American Math. Society Colloquium Publications, New York, 1948.
- [36] S. Jansen, M. Ruskai, and R. Seiler. Bounds for the adiabatic approximation with applications to quantum computation. *Journal of Mathematical Physics*, 48:102111, 2007.
- [37] A. Joye. General adiabatic evolution with a gap condition. Communications in Mathematical Physics, 275(2):139–162, 2007.
- [38] T. Kato. On the adiabatic theorem of quantum mechanics. *Journal of the Physical Society of Japan*, 5:435, nov 1950.
- [39] A. Kossakowski. On quantum statistical mechanics of non-hamiltonian systems. *Report on Mathematical Physics*, 3(4):247–274, 1972.

- [40] Andrzej Kossakowski. On necessary and sufficient conditions for a generator of a quantum dynamical semigroup. Bulletin de l'Academie Polinaise des Sciencesserie des Sciences Techniques, 20(12):1021–1025, 1972.
- [41] K. Kraus. General state changes in quantum theory. *Annals of Physics*, 64:311–335, 1971.
- [42] A. Kvitsinsky and S. Putterman. Adiabatic evolution of an irreversible two level system. *Journal of Mathematical Physics*, 32:1403–1407, 1991.
- [43] L. Landau. Das dämpfungsproblem in der wellenmechanik. Zeitschrift fur Physik, 45:430–441, may 1927.
- [44] G. Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, 48(2):119–130, 1976.
- [45] A. Messiah. Quantum Mechanics. Dover Science, 2000.
- [46] B. Misra and E. C. G. Sudarshan. The zeno's paradox in quantum theory. *Journal of Mathematical Physics*, 18(4):756, 1977.
- [47] M. A. Neumark. Normierte Algebren. Deutscher Verlag, 1959.
- [48] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.
- [49] A. P. Peirce and M. Dahieh. Quantum control of quantum mechanical systems: existence, numerical approximation and applications. *Physical Review A*, 37(12):4950–4964, 1988.
- [50] J. P. Pekola, V. Brosco, M. Möttönen, P. Solinas, and A. Shnirman. Decoherence in adiabatic quantum evolution: application to cooper pair pumping. *Physical Review Letters*, 105(3):030401, 2010.
- [51] H. Rabitz, R. Vivie-Riedle, M. Motzkus, and K. Kompa. Whither the future of controllong quantum phenimena? *Science*, 288:824, 2000.
- [52] M. Reed and Berry Simon. *Methdos of Modern Mathematical Physics*, volume 1. Academic Press, 1980.
- [53] J. Roland and J. N. Cerf. Quantum search by local adiabatic evolution. *Physical Review A*, 65:042308, 2002.
- [54] A. Shaji and E.C.G. Sudarshan. Who's afraid of not completely positive maps? *Physics Letters A*, 341(1-4):48–54, 2005.

- [55] P. W. Shor. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *SIAM Review*, 41:303–332, 1999.
- [56] W. F. Stinespring. Positive functions on c\*-algebras. *Proceedings of the American Mathematics Society*, pages 211–216, 1955.
- [57] J Von Neumann. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, volume 42 of 4. Springer, Berlin, 1932.
- [58] W. Wang, S. C. Hou, and X. X. Yi. Adiabatic evolution under quantum control, 2009.
- [59] W. S. Warren, H. Rapitz, and M. Dahieh. Coherent control of quantum dynamics: the dream is alive. *Science*, 259, 1993.
- [60] K. Yosida. On the differentiability and the representation of oneparameter semi-group of linear operators. *Journal of the Mathematical Society of Japan*, 1(1):15–21, 1948.
- [61] K. Yosida. Functional Analysis, volume 46. Springer-Verlag, 1980.
- [62] Sixia Yu. Positive maps which are not completely positive, 2000.