Universidade de São Paulo

Instituto de Física

Soluções Exatas e Medidas de Emaranhamento em Sistemas de Spins

Marcelo Meireles dos Santos

Tese de doutorado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção
do título de Doutor em Ciências

Orientador: Prof. Dr. Dmitri Maximovitch Gitman

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Dmitri Maximovitch Gitman (IFUSP)

Prof. Dr. Alexei Deriglazov (UFJF)

Prof. Dr. Dmitry Vasilevich (UFABC)

Prof. Dr. Gennady Gusev (IFUSP)

Prof. Dr. Josif Frenkel (IFUSP)

São Paulo
2018

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Santos, Marcelo Meireles dos

Soluções exatas e medidas de emaranhamento em sistemas de spins. São Paulo, 2018.

Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física.
Depto. De Física Nuclear

Orientador: Prof. Dr. Dmitri Maximovitch Gitman
Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Análise de espinores; 2. Física teórica; 3. Fenômenos magnéticos; 4. Informação quântica; 5. Sistema quântico.

USP/IF/SBI-013/2018

Universidade de São Paulo

Instituto de Física

Exact Solutions and Entanglement Measures in Spin Systems

Marcelo Meireles dos Santos

Tese de doutorado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção
do título de Doutor em Ciências

Orientador: Prof. Dr. Dmitri Maximovitch Gitman

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Dmitri Maximovitch Gitman (IFUSP)

Prof. Dr. Alexei Deriglazov (UFJF)

Prof. Dr. Dmitry Vasilevich (UFABC)

Prof. Dr. Gennady Gusev (IFUSP)

Prof. Dr. Josif Frenkel (IFUSP)

São Paulo
2018

Resumo

Recentemente, uma implementação de um conjunto universal de portas lógicas de um e dois qubits para computação quântica usando estados de spin de pontos quânticos de um único elétron foi proposta. Estes resultados nos motivaram a desenvolver um estudo teórico formal do correspondente modelo de dois spins colocados em um campo magnético externo e acoplados por uma interação mútua de Heisenberg dependente do tempo. Nós então consideramos a assim chamada equação de dois spins, a qual descreve sistemas quânticos de quatro níveis de energia. Uma útil propriedade dessa equação é que o correspondente problema para o caso de campos magnéticos externos paralelos pode ser reduzido ao problema de um único spin em um campo externo efetivo. Isso nos permite gerar uma série de soluções exatas para a equação de dois spins a partir de soluções exatas já conhecidas da equação de um spin. Com base neste fato, nós construimos e apresentamos neste estudo uma lista de novas soluções exatas para a equação de dois spins para diferentes configurações de campos externos e de interação entre as partículas. Utilizando algumas destas soluções obtidas, estudamos a dinâmica da entropia de emaranhamento dos respectivos sistemas considerando diferentes estados de spins inicialmente separáveis.

Palavras-chave: Pontos Quânticos; Emaranhamento; Sistemas de Dois Qubits; Campo Magnético.

Abstract

Recently, an implementation of a universal set of one- and two-qubit logic gates for quantum computing using spin states of single-electron quantum dots was proposed. These results motivated us to develop a formal theoretical study of the corresponding model of two spins placed in an external magnetic field and coupled by a time-dependent mutual interaction of Heisenberg. We then consider the so-called two-spin equation, which describes four-level quantum systems. A useful property of this equation is that the corresponding problem for the case of parallel external magnetic fields can be reduced to the problem of a single spin in an effective external field. This allows us to generate a series of exact solutions for the two-spin equation from the already known exact solutions of the one-spin equation. Based on this fact, we construct and present in this study a list of new exact solutions for the two-spin equation for different configurations of external fields and interaction between particles. Using some of these solutions obtained, we study the dynamics of the entropy of entanglement of the respective systems considering different initially separable spins states.

Keywords: Quantum Dots; Entanglement; Two-Qubit Systems; Magnetic Field.

Agradecimentos

Aos professores Dmitri M. Gitman, Alexander Levin e a todos os professores do Instituto de Física da USP.

Em especial ao grande amigo, mestre em Física Experimental e habilidoso factótum Leandro A. Stepien de Moraes pela amizade e por todo o apoio.

Aos professores membros da banca examinadora por dedicarem uma parte do seu tempo à análise deste estudo e pelas valiosas discussões.

A todos os bons professores, de todas as áreas do conhecimento, que tive ao longo da vida, incluindo profissionais da música e do esporte.

À Y. Stepicheva por todo o carinho e afeto.

À minha prima Rosemary Meirelles e à minha mãe Aparecida Meireles Barbosa por terem me alfabetizado antes mesmo do meu ingresso na pré-escola. Entendo esse fato como um privilégio infelizmente negado a muitas crianças ao redor do globo. Por isso, lhes reservo o meu máximo respeito e consideração.

À Dra. Silvia Yuri Murakami, formada pela USP, pelo tratamento odontológico gratuito durante anos em seu consultório particular em Rudge Ramos - SBC.

Aos bons amigos e companheiros de escritório Aleksei Shishmarev e Rafael Ferreira da Silva.

Aos excelentes amigos de mais de uma década Benedito Silva Abreu, Gustavo Flório Bernardi, Michel Lacerda Marcondes dos Santos e Tiago Ribeiro Severino.

Ao Professor Dr. Mário César Baldiotti, colaborador do Grupo Quanta, pelas imprescindíveis discussões em uma fase imediatamente anterior à pesquisa aqui abordada, o que serviu de excelente base para o desenvolvimento do presente estudo.

A todos os funcionários do IFUSP incluindo a sempre atenciosa equipe do Restaurante da Física.

Faz-se ainda importante mencionar que apesar desta tese ser em parte fruto de um esforço individual, ela não deixa de ser também o resultado de um esforço coletivo de toda a nação brasileira.

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

Albert Einstein

*Dedico este trabalho à minha mãe
Aparecida Meireles Barbosa
e ao meu primo Danilo Dias (este in memoriam)*

Sumário

1	Introdução	12
2	Spins Interagentes em Campo Magnético Externo	14
2.1	Introdução	14
2.2	Sistemas de Dois Spins	15
2.2.1	Campos magnéticos externos paralelos	16
2.2.2	Estados separáveis gerais para dois spins	19
2.3	Sistemas de Três Spins	20
3	Obtenção de Algumas Soluções da Equação de Dois Spins	23
3.1	$F_-(t) = bt + c$	23
3.2	$F_-(t) = b/t + ct$	25
3.3	$F_-(t) = b \tanh \varphi + c \coth \varphi$	27
4	Lista de Soluções Exatas	31
4.1	Soluções para Sistemas de Dois Spins	31
4.1.1	Interação de spin constante ou campos externos com uma diferença constante .	31
4.1.2	Caso simétrico	36
4.1.3	Dois spins em um campo magnético girante	36
4.1.4	$2J(t) = q(t) \sin \mu$ e $F_-(t) = q(t) \cos \mu$	40
4.2	Soluções para Sistemas de Três Spins	42
4.2.1	Caso simétrico	42
4.2.2	Três spins em um campo magnético girante	43
5	Emaranhamento em Sistemas de 2 Qubits	45
5.1	Funções $J(t)$ e $F_-(t)$ linearmente dependentes	47
5.1.1	Dois spins colineares aos campos magnéticos	48
5.1.2	Spins não-colineares	49
5.2	$F_- = 2\varepsilon$ e $2J(t) = bt + c$	50
6	Comentários Finais	53
A	Transformações Unitárias e Simetrias	54
B	Função Cilíndrica Parabólica	56
B.1	Cálculo auxiliar	56
C	Funções de Whittaker	58

Lista de Figuras

4.1	Funções dependentes do tempo q_1 e q_2	42
5.1	Medidas de emaranhamento no caso 2 ($\mu = \frac{\pi}{2}$) como uma função do tempo. (a) $J = \frac{q_1}{2}$, $F_-(t) = 0$, (b) $J = \frac{q_2}{2}$, $F_-(t) = 0$	49
5.2	Medidas de emaranhamento no caso 3 ($\mu = \frac{\pi}{4}$) como uma função do tempo. (a) $J = \frac{q_1}{2\sqrt{2}}$, $F_- = \frac{q_1}{\sqrt{2}}$, (b) $J = \frac{q_2}{2\sqrt{2}}$, $F_- = \frac{q_2}{\sqrt{2}}$	50
5.3	Medidas de emaranhamento no caso 5 ($\mu = \frac{\pi}{2}$, $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$, $\mathbf{n}'$ é tal que $\theta' = \pi/4$) como uma função do tempo. (a) $J = \frac{q_1}{2}$, $F_-(t) = 0$, (b) $J = \frac{q_2}{2}$, $F_-(t) = 0$	51
5.4	Medidas de emaranhamento no caso 6 ($\mu = \frac{\pi}{4}$, $\mathbf{n} = \hat{\mathbf{k}}$, $\mathbf{n}' = \mathbf{n}'(\theta' = \pi/4)$) como uma função do tempo. (a) $J = \frac{q_1}{2\sqrt{2}}$, $F_- = \frac{q_1}{\sqrt{2}}$, (b) $J = \frac{q_2}{2\sqrt{2}}$, $F_- = \frac{q_2}{\sqrt{2}}$	51
5.5	Medidas de emaranhamento no caso $J(t) = (bt + c)/2$ e $F_- = 2\varepsilon = \text{const.}$	52

Capítulo 1

Introdução

Apesar de ser uma das características mais surpreendentes da Mecânica Quântica e fugir totalmente do nosso senso comum, sabe-se hoje em dia que o Emaranhamento Quântico é um recurso físico tão real¹ quanto energia [1]. Este novo recurso disponível na natureza (reconhecido primeiramente por Einstein, Podolsky, Rosen [2] e Schrödinger) denominado *emaranhamento*² por E. Schrödinger já nos primeiros dias da existência da teoria quântica [3], desempenha um papel fundamental na violação da desigualdade de Bell, em computação quântica e informação quântica, na codificação superdensa, criptografia quântica e teletransporte quântico [4, 1]. O emaranhamento é uma propriedade holística de sistemas quânticos compostos, a qual envolve correlações não-clássicas entre seus subsistemas, sendo então uma propriedade puramente quântica associada com a não-separabilidade das partes constituintes de um sistema composto.

Além do emaranhamento quântico, sistemas quânticos de dois e quatro níveis de energia também desempenham um papel relevante na implementação de algoritmos quânticos [4]. Neste problema, a computação é realizada através da manipulação das assim chamadas portas lógicas de um e dois *qubits* [5]. Uma porta lógica de um qubit pode ser identificada com um sistema quântico de dois níveis e as portas lógicas de dois qubits podem ser identificadas com um sistema quântico de quatro níveis. Implementações físicas de sistemas de dois e quatro níveis podem ser, por exemplo, um spin individual em um campo magnético e dois spins interagentes também imersos em um campo magnético, respectivamente. Como uma alternativa a sistemas de spins, pode-se considerar também a utilização de sistemas de um ou dois fótons polarizados [6].

Tudo isso nos instigou a investigarmos neste estudo o comportamento dinâmico do emaranhamento quântico em um sistema de dois spins interagentes na presença de campos magnéticos externos. Para este fim, consideramos aqui o modelo quântico de Heisenberg [7], o qual descreve, no caso geral, uma cadeia unidimensional de spins $1/2$ em que os termos de energia dominantes são a interação de cada spin com um campo magnético externo e a interação de acoplamento entre primeiros vizinhos na rede e que pode ser usado para descrever um sistema de pontos quânticos acoplados. Os portadores de spin $1/2$ estão congelados no espaço e têm somente um grau de liberdade: o de momento angular de spin. Neste estudo nós consideramos as duas mais simples destas cadeias: sistemas de dois e três spins $1/2$ interagentes à temperatura zero [8].

Uma implementação de um conjunto universal de portas lógicas de um e dois qubits para computação quântica usando estados de spin em pontos quânticos (de um único elétron) acoplados [9] foi proposta em [10]. Estudos adicionais envolvendo pontos quânticos acoplados podem ser encontra-

¹Recentemente, Anton Zeilinger, Sae-Woo Nam e Ronald Hanson ganharam o Prêmio John Stewart Bell (*Bell Prize*) por provarem em 2015 que o emaranhamento quântico é real [11, 12]. Veja também [13].

²*Verschränkung*.

dos, e.g., em [14, 15, 16]. Além disso, foi demonstrado que é possível realizar um controle coerente de um sistema quântico baseado em estados de spin de dois elétrons em um ponto quântico duplo, permitindo assim a preparação de estados e a manipulação coerente do sistema. Esta possibilidade é baseada no controle elétrico rápido da interação de troca de spin [17, 18]. Esses resultados nos motivaram a desenvolver um estudo teórico formal do correspondente modelo de dois spins acoplados, cada um deles sujeito a diferentes campos magnéticos externos dependentes do tempo e com uma interação mútua de Heisenberg também dependente do tempo.

Neste estudo, a dinâmica quântica dos sistemas físicos discutidos são governados pela equação de Schrödinger, a qual renomearemos a seguir dependendo do número de spins do sistema. Nós consideramos a assim chamada *equação de dois spins* [19, 20, 21], a qual descreve (no caso não-degenerado) sistemas quânticos de quatro níveis de energia. Uma de suas propriedades é que no caso de configurações envolvendo campos magnéticos externos paralelos o respectivo problema de duas partículas pode ser identificado com um problema de um spin em um campo magnético externo apropriado, isto é, a resolução da equação de dois spins se reduz, nesses casos, à resolução da equação de um spin, ou *equação de spin* [22, 23], a qual pode ser identificada com sistemas quânticos de dois níveis de energia. Esse fato permite, então, a construção de uma série de soluções exatas para a equação de dois spins com base em possíveis soluções exatas já conhecidas para a equação de um spin e foi bastante explorado neste texto.

É importante mencionar que não existe ainda uma teoria geral peremptória do emaranhamento quântico. Em particular, neste trabalho nós consideramos a medida de emaranhamento para sistemas bipartidos proposta por Bennett em [24]. Apesar de estar além do escopo deste estudo, uma proposta de medida de emaranhamento para sistemas quânticos tripartidos (no nosso caso, um sistema de três spins) pode ser encontrada em [25].

Os principais resultados da tese incluem a apresentação de uma série de novas soluções exatas para a *equação de dois spins* na presença de campos magnéticos externos paralelos e a utilização de algumas destas soluções analíticas para o estudo do comportamento dinâmico da medida de emaranhamento dos sistemas correspondentes, o que nos permitiu, então, verificarmos a capacidade destes sistemas físicos emaranharem diferentes estados inicialmente separáveis.

Capítulo 2

Spins Interagentes em Campo Magnético Externo

2.1 Introdução

Aqui consideramos uma cadeia unidimensional de n spins $1/2$ não-relativísticos interagindo entre si¹ (via interação de Heisenberg) e com campos magnéticos externos. Tal sistema pode ser descrito pela Hamiltoniana [7]

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

A Hamiltoniana acima é uma matriz $2^n \times 2^n$ e age no espaço de Hilbert 2^n -dimensional $\mathcal{H} = \underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^2}_{n \text{ vezes}}$. Os vetores $\mathbf{F}^{(i)}(t)$ são proporcionais aos campos magnéticos $\mathbf{B}^{(i)}(t)$ agindo no i -ésimo portador de spin; $J_{i(i+1)}(t)$ denota o acoplamento de troca entre os primeiros vizinhos na rede; as matrizes $\boldsymbol{\Sigma}^{(k)}$ e Γ^{ij} ,

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

são, respectivamente, os operadores de spin para o k -ésimo subsistema do sistema quântico composto e o termo de interação² entre os spins i e j , onde I é a matriz identidade 2×2 e as componentes de $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ são as matrizes de Pauli, de modo que são satisfeitas as importantes relações de comutação

$$\left[\Sigma_i^{(m)}, \Sigma_j^{(n)} \right] = 2i\delta_{mn}\varepsilon_{ijk}\Sigma_k^{(m)}, \quad \left[\Sigma_i^{(m)}, \Sigma_j^{(m)} \right]_+ = 2\delta_{ij}, \quad \left[\Gamma^{mn}, \boldsymbol{\Sigma}^{(m)} + \boldsymbol{\Sigma}^{(n)} \right] = 0.$$

A equação de Schrödinger correspondente $i\partial_t |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$ define a evolução temporal do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$, que é um vetor coluna de 2^n componentes,

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) & v_2(t) & \dots & v_{2^n}(t) \end{pmatrix}^T.$$

¹Mais especificamente, com seus primeiros vizinhos.

²A igualdade $J_{1,n} = 0$ na Hamiltoniana (2.24a) caracteriza uma cadeia aberta, enquanto que o caso oposto, $J_{1,n} \neq 0$, descreve uma cadeia fechada.

O mais simples dos casos, $n = 1$, corresponde a um único spin $1/2$. A equação de Schrödinger neste caso é

$$\begin{aligned} i\partial_t |\psi(t)\rangle &= \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad |\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) \\ v_2(t) \end{pmatrix}, \\ \hat{H}(t) &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F} = -\boldsymbol{\mu} \mathbf{B}(t), \quad \boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{m} \hat{\mathbf{s}}, \quad \hat{\mathbf{s}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \quad e > 0, \\ \hat{H}(t) &= \frac{e}{2m} \mathbf{B}(t) \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{F}(t) \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} F_z & F_x - iF_y \\ F_x + iF_y & -F_z \end{pmatrix}, \\ \mathbf{F}(t) &= \mu_B \mathbf{B}(t), \quad \mu_B = \frac{e}{2m}. \end{aligned} \tag{2.3}$$

No espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, consideramos a base ortonormal (ou base computacional)

$$\begin{aligned} |\Theta_1\rangle &= |0\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^T, \quad |\Theta_2\rangle = |1\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^T, \\ \sigma_z |\Theta_i\rangle &= (-1)^{i-1} |\Theta_i\rangle, \quad \sigma_z |\lambda - 1\rangle = (-1)^{\lambda-1} |\lambda - 1\rangle, \quad i, \lambda = 1, 2. \end{aligned}$$

Os vetores de estado $|\psi(t)\rangle$ podem ser escritos como a combinação linear

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^2 v_i(t) |\Theta_i\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) \\ v_2(t) \end{pmatrix}.$$

Vamos nos referir à equação (2.3) (a qual governa um sistema de dois níveis de energia) como *equação de spin*. Em termos das componentes v_a , ela toma a forma

$$i\dot{v}_1 = F_z v_1 + (F_x - iF_y) v_2, \quad i\dot{v}_2 = (F_x + iF_y) v_1 - F_z v_2.$$

Um estudo detalhado de possíveis soluções exatas desta equação é apresentado em [22]. Como veremos mais adiante, esse fato será útil na construção de soluções exatas para sistemas quânticos de dois spins na presença de campos magnéticos externos paralelos. Tais sistemas de duas partículas podem ser caracterizados como um sistema de quatro níveis de energia.

2.2 Sistemas de Dois Spins

A dinâmica quântica de dois spins interagentes A e B pode ser descrita pela equação de Schrödinger com a Hamiltoniana (2.1) para $n = 2$,

$$\begin{aligned} \hat{H}(t) &= \mathbf{F}^{(1)}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes I + I \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{(2)}(t) + J(t) [\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y + \sigma_z \otimes \sigma_z] \\ &= \begin{pmatrix} F_z^{(1)} + F_z^{(2)} + J & F_x^{(2)} - iF_y^{(2)} & F_x^{(1)} - iF_y^{(1)} & 0 \\ F_x^{(2)} + iF_y^{(2)} & F_z^{(1)} - F_z^{(2)} - J & 2J & F_x^{(1)} - iF_y^{(1)} \\ F_x^{(1)} + iF_y^{(1)} & 2J & F_z^{(2)} - F_z^{(1)} - J & F_x^{(2)} - iF_y^{(2)} \\ 0 & F_x^{(1)} + iF_y^{(1)} & F_x^{(2)} + iF_y^{(2)} & J - F_z^{(1)} - F_z^{(2)} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.4}$$

A base computacional no correspondente espaço de Hilbert $\mathcal{H}_{AB} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ para estados de dois spins A e B é

$$\begin{aligned} |\Theta_1\rangle &= |00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T, \quad |\Theta_2\rangle = |01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T, \\ |\Theta_3\rangle &= |10\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T, \quad |\Theta_4\rangle = |11\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Os vetores $|\Theta_k\rangle$ desta base são autovetores do operador $\sigma_z \otimes \sigma_z = \text{diag}(1, -1, -1, 1)$,

$$\sigma_z \otimes \sigma_z |\lambda\lambda'\rangle = (-1)^{(\lambda+\lambda')} |\lambda\lambda'\rangle, \quad \lambda, \lambda' = 0, 1.$$

Os vetores de estado $|\Psi(t)\rangle$ nesse caso podem ser escritos em termos dos vetores $|\Theta_k\rangle$,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\mu=1}^4 v_{\mu}(t) |\Theta_{\mu}\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) & v_2(t) & v_3(t) & v_4(t) \end{pmatrix}^T, \quad (2.6)$$

e a equação de Schrödinger $i\partial_t |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$ com a Hamiltoniana (2.4), em termos dos coeficientes v_i , toma a forma

$$\begin{aligned} i\dot{v}_1 &= \left(F_z^{(1)} + F_z^{(2)} + J\right) v_1 + \left(F_x^{(2)} - iF_y^{(2)}\right) v_2 + \left(F_x^{(1)} - iF_y^{(1)}\right) v_3, \\ i\dot{v}_2 &= \left(F_x^{(2)} + iF_y^{(2)}\right) v_1 + \left(F_z^{(1)} - F_z^{(2)} - J\right) v_2 + 2Jv_3 + \left(F_x^{(1)} - iF_y^{(1)}\right) v_4, \\ i\dot{v}_3 &= \left(F_x^{(1)} + iF_y^{(1)}\right) v_1 + 2Jv_2 + \left(F_z^{(2)} - F_z^{(1)} - J\right) v_3 + \left(F_x^{(2)} - iF_y^{(2)}\right) v_4, \\ i\dot{v}_4 &= \left(F_x^{(1)} + iF_y^{(1)}\right) v_2 + \left(F_x^{(2)} + iF_y^{(2)}\right) v_3 + \left(J - F_z^{(1)} - F_z^{(2)}\right) v_4. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Um estudo detalhado de possíveis soluções exatas desta equação é apresentado em [19].

2.2.1 Campos magnéticos externos paralelos

Considere a Hamiltoniana (2.4) para o caso específico em que os dois spins 1/2 interagentes estão imersos em campos magnéticos *paralelos* $\mathbf{B}^{(1)}$ e $\mathbf{B}^{(2)}$, onde $\mathbf{B}^{(i)}$ age no i -ésimo portador de spin. Sem perda de generalidade, podemos impor que estes campos magnéticos estejam ao longo do eixo $\hat{\mathbf{z}}$. Assim, temos que

$$\mathbf{F}^{(1)} = (0, 0, F^{(1)}(t)), \quad \mathbf{F}^{(2)} = (0, 0, F^{(2)}(t)), \quad J = J(t),$$

onde $F^{(1,2)}$ e J são, em geral, funções dependentes do tempo. Neste caso

$$\hat{H} = F^{(1)}(t)\Sigma_z^{(1)} + F^{(2)}(t)\Sigma_z^{(2)} + J(t)\Gamma, \quad \Gamma = \Sigma^{(1)} \cdot \Sigma^{(2)} \stackrel{(2.2)}{=} \sum_{i=1}^3 \sigma_i \otimes \sigma_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\Sigma_z^{(1)} = \sigma_3 \otimes I = \text{diag}(1, 1, -1, -1), \quad \Sigma_z^{(2)} = I \otimes \sigma_3 = \text{diag}(1, -1, 1, -1).$$

Assim,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} F_+ + J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & F_- - J & 2J & 0 \\ 0 & 2J & -(F_- + J) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -F_+ + J \end{pmatrix}, \quad (2.8a)$$

$$F_{\pm}(t) \equiv F^{(1)}(t) \pm F^{(2)}(t) \quad (2.8b)$$

e a equação de Schrödinger (2.7) associada a esta Hamiltoniana escrita em termos das componentes $v_i(t)$ do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$, toma a forma

$$i\dot{v}_1 = (F_+ + J) v_1, \quad i\dot{v}_4 = (-F_+ + J) v_4, \quad (2.9a)$$

$$i\dot{\chi} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{K} - J) \chi, \quad \chi = \begin{pmatrix} v_2(t) \\ v_3(t) \end{pmatrix}, \quad (2.9b)$$

$$\mathbf{K}(t) = (2J(t), 0, F_-(t)). \quad (2.9c)$$

As soluções para v_1 e v_4 são

$$v_1(t) = c_1 \exp \left[-i \int_0^t (J + F_+) d\tau \right], \quad v_4(t) = c_4 \exp \left[-i \int_0^t (J - F_+) d\tau \right], \quad (2.10)$$

onde c_1 e c_4 são constantes complexas arbitrárias. Já a obtenção das soluções para os demais coeficientes, v_2 e v_3 , exige um maior esforço algébrico e a ela nos dedicaremos a partir de agora.

Reescrevendo convenientemente o vetor coluna $\chi = \begin{pmatrix} v_2(t) \\ v_3(t) \end{pmatrix}$ tal como

$$\chi(t) = \exp \left[i \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau \right] \psi(t), \quad \psi \equiv \begin{pmatrix} u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

vemos que o espinor ψ obedece à equação de spin (2.3) com o campo externo $\mathbf{K}(t)$, i.e.,

$$i\partial_t \psi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{K}) \psi, \quad (2.12)$$

ou, equivalentemente,

$$i\dot{u}_2 = (F_-) u_2 + 2Ju_3, \quad i\dot{u}_3 = 2Ju_2 - (F_-) u_3. \quad (2.13)$$

Soluções exatas da equação de spin (2.12) para 26 diferentes tipos de campos externos da forma (2.9c) são descritas em [22]. Consequentemente, elas geram 26 famílias de soluções exatas da equação de 2 spins nesse caso.

A seguir analisamos duas classes de sistemas de 2 spins sujeitos a campos magnéticos externos paralelos: (i) spins sujeitos a uma função de interação constante e (ii) spins na presença de campos magnéticos com uma diferença constante entre si.

(i) Função de interação constante

Considere o caso em que a função de interação de spin seja constante, i.e., $J = \varepsilon$, onde ε é uma constante real. As soluções (2.10) são, neste caso,

$$v_1(t) = c_1 e^{-i\varepsilon t} \exp \left[-i \int_0^t F_+(\tau) d\tau \right], \quad v_4(t) = c_4 e^{-i\varepsilon t} \exp \left[i \int_0^t F_+(\tau) d\tau \right], \quad (2.14)$$

onde

$$F_+(t) \stackrel{(2.8b)}{=} F^{(1)}(t) + F^{(2)}(t) = 2F^{(1)}(t) - F_-(t) = 2F^{(2)}(t) + F_-(t).$$

As componentes v_2 e v_3 do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ (2.6) são dadas pela solução $\chi = \begin{pmatrix} v_2(t) \\ v_3(t) \end{pmatrix}$ do problema (2.9b), o que torna conveniente, então, escrevermos χ como em (2.11),

$$\chi(t) = e^{i\varepsilon t} \psi(t), \quad (2.15)$$

onde $\psi = \begin{pmatrix} u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix}$ é uma solução da equação de spin $i\dot{\psi} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{K}) \psi$ (2.12) com o campo externo (2.9c)

$$\mathbf{K}(t) = (2\varepsilon, 0, f(t)), \quad f(t) = F_-(t). \quad (2.16)$$

Em [22, 23] são listadas muitas funções $f(t)$ para as quais a equação de spin com o campo externo $\mathbf{K}$ (2.16) pode ser resolvida exatamente.

Finalmente, fazemos notar que as soluções indicadas em (4.1) seguem este roteiro de obtenção.

(ii) Campos magnéticos com uma diferença constante

Consideramos, agora, a restrição de que a diferença $F_- = F^{(1)}(t) - F^{(2)}(t)$ (2.8b) entre as componentes não nulas dos campos externos seja constante. Não obstante, a interação de spin J pode ainda depender do tempo e tal arranjo pode, então, ser descrito por

$$2J(t) = f(t), \quad F_- = F^{(1)}(t) - F^{(2)}(t) = 2\varepsilon = \text{constante}. \quad (2.17)$$

Existem sistemas físicos que obedecem a esta configuração, tais como, por exemplo, certos casos de dois pontos quânticos interagentes [16].

Uma solução $\chi = \begin{pmatrix} v_2(t) \\ v_3(t) \end{pmatrix}$ da equação (2.9b) pode ser escrita como (2.11), onde ψ é uma solução da equação de spin (2.12) com o campo externo (2.9c)

$$\mathbf{G}(t) = (f(t), 0, 2\varepsilon), \quad f(t) = 2J(t). \quad (2.18)$$

Se $\varphi = \begin{pmatrix} u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix}$ é uma solução da equação de spin (2.3) com o campo externo $\mathbf{K}$ (2.16), então é possível construir uma solução ψ para esta equação com o campo externo $\mathbf{G}$ (2.18) pela transformação (A.2)

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_1 + \sigma_3) \varphi. \quad (2.19)$$

Consequentemente, podemos ainda utilizar as mesmas funções $f(t)$ apresentadas em [22, 23], tal como no caso anterior (i), afim de se construir soluções exatas da *equação de dois spins* para campos magnéticos externos com uma diferença constante.

As soluções para os coeficientes v_2 e v_3 , nesse caso, são, portanto,

$$\begin{pmatrix} v_2(t) \\ v_3(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[\frac{i}{2} \int_{t_0}^t f(\tau) d\tau \right] (\sigma_1 + \sigma_3) \begin{pmatrix} u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Os coeficientes v_1 e v_4 do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ para este arranjo são dados pelas equações (2.10) com

$$F_+(t) = F^{(1)}(t) + F^{(2)}(t) \stackrel{(2.17)}{=} 2F^{(1)}(t) - 2\varepsilon = 2F^{(2)}(t) + 2\varepsilon. \quad (2.21)$$

Por fim, fazemos notar que as soluções indicadas em (4.3) seguem este roteiro de cômputo.

2.2.2 Estados separáveis gerais para dois spins

Um operador de spin representando a componente do momento angular de spin ao longo de uma direção arbitrária $\mathbf{n}$, em coordenadas esféricas,

$$\begin{aligned}\mathbf{n} &= \sin \theta \cos \varphi \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta \sin \varphi \hat{\mathbf{j}} + \cos \theta \hat{\mathbf{k}}, \\ \mathbf{n}^2 &= n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1,\end{aligned}\tag{2.22}$$

pode ser escrito como

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

Os estados de uma partícula de spin 1/2 com uma dada orientação de spin ao longo de (e contra) uma determinada direção $\mathbf{n}$ são, portanto, autoespinores normalizados de $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$,

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) |\mathbf{n}, \uparrow\rangle = |\mathbf{n}, \uparrow\rangle, \quad (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) |\mathbf{n}, \downarrow\rangle = -|\mathbf{n}, \downarrow\rangle,$$

e têm a forma³

$$|\mathbf{n}, \uparrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{-i\varphi/2} \\ \sin(\theta/2) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}, \quad |\mathbf{n}, \downarrow\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\theta/2) e^{-i\varphi/2} \\ \cos(\theta/2) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}.$$

Logo, estados separáveis gerais de dois spins são

$$\begin{aligned}|\mathbf{n} \uparrow, \mathbf{n}' \uparrow\rangle &= |\mathbf{n}, \uparrow\rangle \otimes |\mathbf{n}', \uparrow\rangle, \quad |\mathbf{n} \uparrow, \mathbf{n}' \downarrow\rangle = |\mathbf{n}, \uparrow\rangle \otimes |\mathbf{n}', \downarrow\rangle, \\ |\mathbf{n} \downarrow, \mathbf{n}' \uparrow\rangle &= |\mathbf{n}, \downarrow\rangle \otimes |\mathbf{n}', \uparrow\rangle, \quad |\mathbf{n} \downarrow, \mathbf{n}' \downarrow\rangle = |\mathbf{n}, \downarrow\rangle \otimes |\mathbf{n}', \downarrow\rangle.\end{aligned}\tag{2.23}$$

No Capítulo 5 calculamos o emaranhamento de alguns sistemas de dois spins na presença de campos magnéticos externos e, para tanto, utilizamos como estado inicial de dois spins,

$$|\Psi(t_0)\rangle \stackrel{(2.6)}{=} \begin{pmatrix} v_1(t_0) \\ v_2(t_0) \\ v_3(t_0) \\ v_4(t_0) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix}, \quad \sum_{i=1}^4 |c_i|^2 = 1,$$

três dos estados separáveis⁴ (2.23), a saber,

$$|\mathbf{n} \uparrow, \mathbf{n}' \uparrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{-i\varphi/2} \\ \sin(\theta/2) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \cos(\theta'/2) e^{-i\varphi'/2} \\ \sin(\theta'/2) e^{i\varphi'/2} \end{pmatrix}, \tag{2.24a}$$

$$|\mathbf{n} \uparrow, \mathbf{n}' \downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{-i\varphi/2} \\ \sin(\theta/2) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} -\sin(\theta'/2) e^{-i\varphi'/2} \\ \cos(\theta'/2) e^{i\varphi'/2} \end{pmatrix}, \tag{2.24b}$$

$$|\mathbf{n} \downarrow, \mathbf{n}' \downarrow\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\theta/2) e^{-i\varphi/2} \\ \cos(\theta/2) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} -\sin(\theta'/2) e^{-i\varphi'/2} \\ \cos(\theta'/2) e^{i\varphi'/2} \end{pmatrix}. \tag{2.24c}$$

³Em alguns livros-texto é possível encontrar, e.g., a forma $|\mathbf{n}, \uparrow\rangle \rightarrow e^{i\varphi/2} |\mathbf{n}, \uparrow\rangle$ e $|\mathbf{n}, \downarrow\rangle \rightarrow -e^{i\varphi/2} |\mathbf{n}, \downarrow\rangle$. Naturalmente, a multiplicação de um autoestado por uma fase do tipo $\pm e^{i\eta}$, $\eta \in \mathbb{R}$, mantém invariante sua norma.

⁴Isto é, investigamos se certos arranjos de sistemas de dois spins são capazes de emaranhar ou não sistemas quânticos **inicialmente** não-emaranhados.

2.3 Sistemas de Três Spins

Consideramos um sistema de três spins $1/2$ que interagem uns com os outros através de interações de Heisenberg esfericamente simétricas $J_{ij}(t)$, $i, j = 1, 2, 3$, ($i \neq j$) e que estão imersos em campos externos $\mathbf{F}^{(1)}$, $\mathbf{F}^{(2)}$ e $\mathbf{F}^{(3)}$. Assim, consideramos a equação de Schrödinger com a Hamiltoniana 2.1 para o caso $n = 3$. O caso em que $J_{13} \neq 0$ caracteriza uma cadeia triangular (uma cadeia fechada) enquanto que o caso oposto ($J_{13} = 0$) descreve uma cadeia linear. O operador hamiltoniano para este sistema pode ser escrito como

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_B + \hat{H}_{int}, \\ \hat{H}_B &= \mathbf{F}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\Sigma}^{(1)} + \mathbf{F}^{(2)} \cdot \boldsymbol{\Sigma}^{(2)} + \mathbf{F}^{(3)} \cdot \boldsymbol{\Sigma}^{(3)}, \\ \boldsymbol{\Sigma}^{(1)} &= \boldsymbol{\sigma} \otimes I \otimes I, \quad \boldsymbol{\Sigma}^{(2)} = I \otimes \boldsymbol{\sigma} \otimes I, \quad \boldsymbol{\Sigma}^{(3)} = I \otimes I \otimes \boldsymbol{\sigma}, \\ \hat{H}_{int} &= \frac{1}{2} (J_{12}\Gamma^{12} + J_{23}\Gamma^{23} + J_{13}\Gamma^{13}), \quad \Gamma^{ij} = \boldsymbol{\Sigma}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\Sigma}^{(j)}.\end{aligned}\tag{2.25}$$

Vamos, aqui, utilizar a base computacional no espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$,

$$\begin{aligned}|\Theta_1\rangle &= |000\rangle, \quad |\Theta_2\rangle = |001\rangle, \quad |\Theta_3\rangle = |010\rangle, \quad |\Theta_4\rangle = |011\rangle, \\ |\Theta_5\rangle &= |100\rangle, \quad |\Theta_6\rangle = |101\rangle, \quad |\Theta_7\rangle = |110\rangle, \quad |\Theta_8\rangle = |111\rangle, \\ |jkl\rangle &= |j\rangle \otimes |k\rangle \otimes |l\rangle, \quad j, k, l = 0, 1.\end{aligned}$$

Os vetores $|\Theta_\mu\rangle$ desta base são os autovetores do operador $\sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \sigma_z$,

$$\begin{aligned}\sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \sigma_z |\lambda\lambda'\lambda''\rangle &= (-1)^{(\lambda+\lambda'+\lambda'')} |\lambda\lambda'\lambda''\rangle, \\ \lambda, \lambda', \lambda'' &= 0, 1.\end{aligned}$$

Para estes sistemas o operador de spin total é $\mathbf{J} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^2 + \boldsymbol{\Sigma}^3)$, com $\hbar = 1$. Além disso, a componente z dos operadores de momento angular $\mathbf{J}_i = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}^i$, $i = 1, 2, 3$, satisfazem as equações de autovalores

$$\begin{aligned}J_{1z} |\Theta_{1,2,3,4}\rangle &= \frac{1}{2} |\Theta_{1,2,3,4}\rangle, \quad J_{1z} |\Theta_{5,6,7,8}\rangle = -\frac{1}{2} |\Theta_{5,6,7,8}\rangle, \\ J_{2z} |\Theta_{1,2,5,6}\rangle &= \frac{1}{2} |\Theta_{1,2,5,6}\rangle, \quad J_{2z} |\Theta_{3,4,7,8}\rangle = -\frac{1}{2} |\Theta_{3,4,7,8}\rangle, \\ J_{3z} |\Theta_{1,3,5,7}\rangle &= \frac{1}{2} |\Theta_{1,3,5,7}\rangle, \quad J_{3z} |\Theta_{2,4,6,8}\rangle = -\frac{1}{2} |\Theta_{2,4,6,8}\rangle.\end{aligned}$$

A forma geral do vetor de estado dependente do tempo, na base computacional, é

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{i,j,k=\{0,1\}} \vartheta_{ijk} |ijk\rangle = \sum_{s=1}^8 v_s(t) |\Theta_s\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) & v_2(t) & \cdots & v_8(t) \end{pmatrix}^T. \tag{2.26}$$

A dinâmica quântica desse sistema de três qubits é regida pela equação de Schrödinger

$$i\partial_t |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad \hat{H} = \hat{H}_B + \hat{H}_{int}, \tag{2.27}$$

onde

$$\hat{H}_B = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{00} & \mathfrak{F}_1^{(3)} & \mathfrak{F}_1^{(2)} & 0 & \mathfrak{F}_1^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ \mathfrak{F}_0^{(3)} & \mathcal{F}_{01} & 0 & \mathfrak{F}_1^{(2)} & 0 & \mathfrak{F}_1^{(1)} & 0 & 0 \\ \mathfrak{F}_0^{(2)} & 0 & \mathcal{F}_{10} & \mathfrak{F}_1^{(3)} & 0 & 0 & \mathfrak{F}_1^{(1)} & 0 \\ 0 & \mathfrak{F}_0^{(2)} & \mathfrak{F}_0^{(3)} & \mathcal{F}_{11} & 0 & 0 & 0 & \mathfrak{F}_1^{(1)} \\ \mathfrak{F}_0^{(1)} & 0 & 0 & 0 & -\mathcal{F}_{11} & \mathfrak{F}_1^{(3)} & \mathfrak{F}_1^{(2)} & 0 \\ 0 & \mathfrak{F}_0^{(1)} & 0 & 0 & \mathfrak{F}_0^{(3)} & -\mathcal{F}_{10} & 0 & \mathfrak{F}_1^{(2)} \\ 0 & 0 & \mathfrak{F}_0^{(1)} & 0 & \mathfrak{F}_0^{(2)} & 0 & -\mathcal{F}_{01} & \mathfrak{F}_1^{(3)} \\ 0 & 0 & 0 & \mathfrak{F}_0^{(1)} & 0 & \mathfrak{F}_0^{(2)} & \mathfrak{F}_0^{(3)} & -\mathcal{F}_{00} \end{pmatrix},$$

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathcal{J}_{00} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{J}_{11} & 2J_{23} & 0 & 2J_{13} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2J_{23} & -\mathcal{J}_{10} & 0 & 2J_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathcal{J}_{01} & 0 & 2J_{12} & 2J_{13} & 0 \\ 0 & 2J_{13} & 2J_{12} & 0 & -\mathcal{J}_{01} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2J_{12} & 0 & -\mathcal{J}_{10} & 2J_{23} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2J_{13} & 0 & 2J_{23} & \mathcal{J}_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathcal{J}_{00} \end{pmatrix}.$$

Isso implica nas equações diferenciais acopladas

$$\begin{aligned} i\dot{v}_1 &= \left(\mathcal{F}_{00} + \frac{1}{2} \mathcal{J}_{00} \right) v_1 + \mathfrak{F}_1^{(3)} v_2 + \mathfrak{F}_1^{(2)} v_3 + \mathfrak{F}_1^{(1)} v_5, \\ i\dot{v}_2 &= \mathfrak{F}_0^{(3)} v_1 + \left(\mathcal{F}_{01} + \frac{1}{2} \mathcal{J}_{11} \right) v_2 + J_{23} v_3 + \mathfrak{F}_1^{(2)} v_4 + J_{13} v_5 + \mathfrak{F}_1^{(1)} v_6, \\ i\dot{v}_3 &= \mathfrak{F}_0^{(2)} v_1 + J_{23} v_2 + \left(\mathcal{F}_{10} - \frac{1}{2} \mathcal{J}_{10} \right) v_3 + \mathfrak{F}_1^{(3)} v_4 + J_{12} v_5 + \mathfrak{F}_1^{(1)} v_7, \\ i\dot{v}_4 &= \mathfrak{F}_0^{(2)} v_2 + \mathfrak{F}_0^{(3)} v_3 + \left(\mathcal{F}_{11} - \frac{1}{2} \mathcal{J}_{01} \right) v_4 + J_{12} v_6 + J_{13} v_7 + \mathfrak{F}_1^{(1)} v_8, \\ i\dot{v}_5 &= \mathfrak{F}_0^{(1)} v_1 + J_{13} v_2 + J_{12} v_3 - \left(\mathcal{F}_{11} + \frac{1}{2} \mathcal{J}_{01} \right) v_5 + \mathfrak{F}_1^{(3)} v_6 + \mathfrak{F}_1^{(2)} v_7, \\ i\dot{v}_6 &= \mathfrak{F}_0^{(1)} v_2 + J_{12} v_4 + \mathfrak{F}_0^{(3)} v_5 - \left(\mathcal{F}_{10} + \frac{1}{2} \mathcal{J}_{10} \right) v_6 + J_{23} v_7 + \mathfrak{F}_1^{(2)} v_8, \\ i\dot{v}_7 &= \mathfrak{F}_0^{(1)} v_3 + J_{13} v_4 + \mathfrak{F}_0^{(2)} v_5 + J_{23} v_6 - \left(\mathcal{F}_{01} - \frac{1}{2} \mathcal{J}_{11} \right) v_7 + \mathfrak{F}_1^{(3)} v_8, \\ i\dot{v}_8 &= \mathfrak{F}_0^{(1)} v_4 + \mathfrak{F}_0^{(2)} v_6 + \mathfrak{F}_0^{(3)} v_7 + \left(-\mathcal{F}_{00} + \frac{1}{2} \mathcal{J}_{00} \right) v_8. \end{aligned}$$

em que definimos a seguinte notação:

$$\begin{aligned} \mathfrak{F}_\mu^{(\nu)} &= F_x^{(\nu)} + (-1)^\mu i F_y^{(\nu)}, \\ \mathcal{F}_{\mu\nu} &= F_z^{(1)} + (-1)^\mu F_z^{(2)} + (-1)^\nu F_z^{(3)}, \\ \mathcal{J}_{\mu\nu} &= J_{12} + (-1)^\mu J_{13} + (-1)^\nu J_{23}. \end{aligned}$$

Alternativamente, também é possível escrever a Hamiltoniana (2.27) em uma forma bloco-diagonal usando a, aqui chamada, base- J_z , i.e., a base composta pelos autovetores da componente z do operador de spin total $\mathbf{J} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^2 + \boldsymbol{\Sigma}^3)$, ordenado em uma sequência decrescente de seus autovalores. Para o caso específico de *campos magnéticos paralelos*, a Hamiltoniana (2.27) é apresentada nessa forma bloco-diagonal em [8].

Capítulo 3

Obtenção de Algumas Soluções da Equação de Dois Spins

Este capítulo é dedicado ao cálculo explícito de algumas soluções exatas do problema de dois spins apresentado na seção *Campos magnéticos externos paralelos* (2.2.1) para diferentes configurações de campos magnéticos externos e de interação entre as partículas portadoras de spin. O leitor que assim desejar, pode suprimir a leitura deste capítulo caso já conheça os métodos matemáticos aqui empregados ou simplesmente não esteja interessado na discussão dos detalhes técnicos da obtenção das correspondentes soluções analíticas sem que essa possível omissão afete o entendimento do restante deste escrito. Sua leitura é particularmente interessante para estudantes e para todos aqueles que desejem acompanhar cálculos de soluções exatas envolvendo as seguintes Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's) de segunda ordem: (i) equação diferencial cilíndrica parabólica (seção 3.1), (ii) equação diferencial de Whittaker (seção 3.2) e (iii) equação Fuchsiana de segunda ordem com três pontos singulares (seção 3.3). Um método adicional bastante útil na resolução de problemas de n spins (interagentes ou não entre si) na presença de campos magnéticos *girantes* é indicado na seção 4.1.3 (para o caso $n = 2$) e é o assim chamado método de sistemas de coordenadas rotativas [26, 27].

No que se segue, obteremos soluções para os casos em que a função de interação de Heisenberg seja constante (vide seção 2.2.1), com

$$F_-(t) = f(t), \quad J(t) = \varepsilon = \text{constante.} \quad (3.1)$$

Uma vez obtidas as soluções deste último problema para algumas funções $f(t)$, a transformação (2.19) nos permite prontamente obtermos também a solução do problema inverso $F_- \leftrightarrow J$,

$$2J(t) = f(t), \quad F_-(t) = 2\varepsilon. \quad (3.2)$$

De fato, os coeficientes v_1 e v_4 do vetor de estado $\Psi(t)$ (2.6) já foram determinadas anteriormente e são dadas pelas expressões (2.10). Nos resta, a seguir, calcular a solução $\psi(t) = (u_2 \ u_3)^T$ em (2.15), o que torna então possível recuperarmos os coeficientes restantes v_2 e v_3 . As soluções dos arranjos (3.1) e (3.2) são sintetizadas um pouco mais adiante nas expressões (4.1) e (4.3), respectivamente. Faz-se notar, além disso, que as mudanças de variáveis $z(t)$ (3.6), (3.14) e (3.22) seguem [22].

3.1 $F_-(t) = bt + c$

Considere as equações diferenciais acopladas em u_2 e u_3 (2.13),

$$i\ddot{u}_2 = (F_-)u_2 + 2\varepsilon u_3, \quad i\ddot{u}_3 = 2\varepsilon u_2 - (F_-)u_3. \quad (3.3)$$

É possível desacoplar estas expressões a partir de suas derivadas em relação ao tempo. O resultado é

$$\ddot{u}_2 + \left[i \left(\dot{F}_- \right) + (F_-)^2 + (2\varepsilon)^2 \right] u_2 = 0, \quad (3.4a)$$

$$\ddot{u}_3 - \left[i \left(\dot{F}_- \right) - (F_-)^2 - (2\varepsilon)^2 \right] u_3 = 0. \quad (3.4b)$$

Uma vez obtida a solução geral da equação (3.4a) (ou (3.4b)), podemos determinar a componente restante substituindo a solução geral encontrada na primeira (ou segunda) das equações (3.3).

Façamos, então, na equação para u_2 (3.4a), para o caso em que $F_-(t) = bt + c$ (sendo b e c constantes reais),

$$\ddot{u}_2 + \left[ib + (bt + c)^2 + (2\varepsilon)^2 \right] u_2 = 0, \quad (3.5)$$

a mudança de variáveis

$$z(t) = \frac{1+i}{\sqrt{b}} (bt + c). \quad (3.6)$$

Isto posto, segue então que

$$\ddot{u}_{2,3} = \frac{d}{dt} \left(\frac{du_{2,3}}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \left(\underbrace{\frac{dz}{dt}}_{=\text{const}} \frac{du_{2,3}}{dz} \right) = \left(\frac{dz}{dt} \right) \frac{dz}{dt} \frac{d}{dz} \left(\frac{du_{2,3}}{dz} \right) = \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 \frac{d^2 u_{2,3}}{dz^2} = 2ib \frac{d^2 u_{2,3}}{dz^2}.$$

Agora, a multiplicação da equação (3.5) pelo fator $\frac{1}{2ib}$ acarreta em

$$\frac{1}{2ib} \ddot{u}_2 + \left[\frac{(2\varepsilon)^2}{2ib} + \frac{1}{2} + \left(\frac{-1}{4} \right) (-4) \frac{(bt + c)^2}{2ib} \right] u_2 = 0$$

e isto é, portanto,

$$\frac{d^2 u_2}{dz^2} + \left(\mu + \frac{1}{2} - \frac{1}{4} z^2 \right) u_2 = 0, \quad (3.7)$$

em que definimos $\mu \equiv -\frac{i(2\varepsilon)^2}{2b}$. A equação (3.7) nada mais é que a *equação diferencial cilíndrica parabólica* (B.1), cuja solução geral (vide Apêndice B) é

$$u_2 = k_1 D_\mu(z) + k_2 D_{-\mu-1}(iz), \quad (3.8)$$

em que $D_\mu(z)$ é a função cilíndrica parabólica e k_1 e $k_2 \in \mathbb{C}$ são constantes arbitrárias que serão determinadas mediante à imposição das condições de contorno do problema (neste caso, as condições no instante de tempo inicial).

Decorre da mudança de variáveis $z(t) = \frac{1+i}{\sqrt{b}} (bt + c)$ que as equações acopladas (3.3), para $F_-(t) = bt + c$,

$$i\dot{u}_2 = (bt + c) u_2 + 2\varepsilon u_3, \quad i\dot{u}_3 = 2\varepsilon u_2 - (bt + c) u_3, \quad (3.9)$$

assumem a forma

$$(i-1) \sqrt{b} \frac{du_2}{dz} = \frac{\sqrt{b}z}{1+i} u_2 + (2\varepsilon) u_3, \quad (3.10a)$$

$$(i-1) \sqrt{b} \frac{du_3}{dz} = (2\varepsilon) u_2 - \frac{\sqrt{b}z}{1+i} u_3, \quad (3.10b)$$

onde evidentemente usamos o fato de que $\frac{du_{2,3}}{dt} = \left(\frac{dz}{dt}\right) \frac{du_{2,3}}{dz}$.

Podemos, então, obter a solução para o coeficiente restante u_3 substituindo¹ a solução u_2 (3.8) na equação acoplada (3.10a). Seguindo este roteiro encontramos portanto:

$$u_2 = k_1 D_\mu(z) + k_2 D_{-\mu-1}(iz), \quad (3.11a)$$

$$u_3 = k_1 (1+i) \frac{(2\varepsilon)}{2\sqrt{b}} D_{\mu-1}(z) + k_2 \frac{(1+i)\sqrt{b}}{(2\varepsilon)} D_{-\mu}(iz). \quad (3.11b)$$

Como um pequeno complemento a essa discussão, notemos que se u_2 e u_3 são soluções das equações (3.10a) e (3.10b) (ou, equivalentemente, das equações (3.9)), obviamente κu_2 e κu_3 também serão, onde $\kappa \in \mathbb{C}$ é uma constante². Por exemplo, multiplicando as soluções (3.11a) e (3.11b) pelo fator $\kappa = 2\sqrt{b}$, obtemos uma forma alternativa para $u_{2,3}$:

$$u_2 = k_1 (2\sqrt{b}) D_\mu(z) + k_2 (2\sqrt{b}) D_{-\mu-1}(iz), \quad (3.12a)$$

$$u_3 = k_1 (1+i)(2\varepsilon) D_{\mu-1}(z) + k_2 \frac{(1+i)(2b)}{(2\varepsilon)} D_{-\mu}(iz). \quad (3.12b)$$

Essa pequena observação pode ser útil, por exemplo, ao se comparar soluções obtidas por diferentes autores em diferentes textos.

3.2 $F_-(t) = b/t + ct$

Neste caso em que $F_-(t) = b/t + ct$, onde b e c são constantes reais, a equação para u_2 (3.4a) é

$$\ddot{u}_2 + \left[i \left(-\frac{b}{t^2} + c \right) + \left(\frac{b}{t} + ct \right)^2 + (2\varepsilon)^2 \right] u_2 = 0. \quad (3.13)$$

A partir da mudança de variáveis

$$z(t) = ict^2, \quad (3.14)$$

temos que

$$\ddot{u}_2 = \frac{d}{dt} \left(\frac{du_2}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{dz}{dt} \frac{du_2}{dz} \right) = \left(\frac{d^2 z}{dt^2} \right) \frac{du_2}{dz} + \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 \frac{d^2 u_2}{dz^2} = (2ic) \frac{du_2}{dz} + (4icz) \frac{d^2 u_2}{dz^2}$$

e a equação (3.13) pode, portanto, ser transformada em

$$\frac{d^2 u_2}{dz^2} + \frac{1}{2z} \frac{du_2}{dz} + \left[\frac{\left(\frac{b^2 - ib}{4} \right)}{z^2} + \frac{\left(\frac{1}{4} - \frac{i(2\varepsilon)^2}{4c} - \frac{ib}{2} \right)}{z} - \frac{1}{4} \right] u_2 = 0. \quad (3.15)$$

Com efeito, podemos reduzir a equação (3.15) a uma forma ainda mais simples por meio de uma transformação conveniente na função incógnita u_2 . Para este fim, considere o *ansatz*³

$$u_2 = z^{-1/4} W(z). \quad (3.16)$$

¹Este cálculo de u_3 é apresentado no Apêndice B, em que foi feito o uso da relação (B.4) $\frac{d}{dz} D_\nu(z) + \frac{1}{2} z D_\nu(z) - \nu D_{\nu-1}(z) = 0$.

²A constante multiplicativa κ deve, naturalmente, ser a mesma em κu_2 e κu_3 .

³Obtido após inúmeras tentativas (e erros). A motivação pela busca de tal transformação se deu pela tentativa de se eliminar o termo contendo a derivada de primeira ordem du_2/dz na equação original (3.15).

Logo,

$$\begin{aligned}\frac{du_2}{dz} &= u'_2 = -\frac{1}{4}z^{-5/4}W + z^{-1/4}W', \\ \frac{d^2u_2}{dz^2} &= u''_2 = \frac{5}{16}z^{-9/4}W - \frac{1}{2}z^{-5/4}W' + z^{-1/4}W'',\end{aligned}$$

o que conduz a

$$\frac{d^2u_2}{dz^2} + \frac{1}{2z} \frac{du_2}{dz} = z^{-1/4}W'' + \frac{3}{16}z^{-9/4}W.$$

Assim sendo, a equação (3.15) assume a forma

$$z^{-1/4} \frac{d^2W}{dz^2} + \frac{3}{16}z^{-9/4}W + \left[\frac{\left(\frac{b^2-ib}{4}\right)}{z^2} + \frac{\left(\frac{1}{4} - \frac{i(2\varepsilon)^2}{4c} - \frac{ib}{2}\right)}{z} - \frac{1}{4} \right] z^{-1/4}W = 0$$

ou, equivalentemente,

$$\frac{d^2W}{dz^2} + \left[\frac{\left(\frac{b^2-ib}{4} + \frac{3}{16}\right)}{z^2} + \frac{\left(\frac{1}{4} - \frac{i(2\varepsilon)^2}{4c} - \frac{ib}{2}\right)}{z} - \frac{1}{4} \right] W = 0, \quad (3.17)$$

que é uma *equação diferencial de Whittaker* (C.1). Além disso, pode-se definir as constantes

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{i(2\varepsilon)^2}{4c}, \quad \gamma = \frac{1}{2} - ib, \quad \mu = \frac{\gamma - 1}{2}, \\ \frac{1}{2} + \mu - \lambda &= \alpha, \quad \lambda = \frac{\gamma}{2} - \alpha,\end{aligned}$$

de modo que a expressão (3.17) possa ser reescrita como

$$\frac{d^2W}{dz^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{z} + \frac{\frac{1}{4} - \mu^2}{z^2} \right) W = 0,$$

a qual possui duas soluções linearmente independentes $M_{\lambda,\mu}(z)$ e $M_{\lambda,-\mu}(z)$ (vide Apêndice C), sendo

$$M_{\lambda,\mu}(z) = z^{\mu+1/2} e^{-z/2} \Phi\left(\frac{1}{2} + \mu - \lambda, 1 + 2\mu; z\right),$$

onde $\Phi(\alpha, \gamma; z)$ é a função hipergeométrica degenerada [28].

Finalmente, pela transformação $u_2 = z^{-1/4}W(z)$ (3.16), obtemos a solução

$$u_2 = \mathcal{C}_1 z^{-1/4} M_{\lambda,\mu}(z) + \mathcal{C}_2 z^{-1/4} M_{\lambda,-\mu}(z), \quad (3.18)$$

na qual $\mathcal{C}_1$ e $\mathcal{C}_2$ são constantes complexas arbitrárias.

As equações acopladas (2.13), neste caso em que $F_-(t) = b/t + ct$ e $J = \varepsilon$, são

$$i\dot{u}_2 = \left(\frac{b}{t} + ct\right) u_2 + 2\varepsilon u_3, \quad (3.19a)$$

$$i\dot{u}_3 = 2\varepsilon u_2 - \left(\frac{b}{t} + ct\right) u_3. \quad (3.19b)$$

Podemos, então, encontrar a solução para o coeficiente restante u_3 substituindo a solução u_2 (3.18) na equação acoplada (3.19a). A partir da relação de recorrência (C.4),

$$z \frac{d}{dz} M_{\lambda, \mu}(z) = \left(\frac{1}{2} z - \lambda \right) M_{\lambda, \mu}(z) + \left(\frac{1}{2} + \mu + \lambda \right) M_{\lambda+1, \mu}(z),$$

podemos então inferir que

$$\begin{aligned} u_2 &= \mathcal{C}_1 \varrho_1(z) + \mathcal{C}_2 \varrho_2(z), \\ u_3 &= \mathcal{C}_1 \varrho_3(z) + \mathcal{C}_2 \varrho_4(z), \end{aligned}$$

em que definimos

$$\left[\begin{aligned} \varrho_1 &= z^{-1/4} M_{\lambda, \mu}(z), & \varrho_2 &= z^{-1/4} M_{\lambda, -\mu}(z), \\ \varrho_3 &= -\frac{2ct}{(2\varepsilon)z^{5/4}} [(z + \alpha - \gamma) M_{\lambda, \mu}(z) + (\gamma - \alpha) M_{\lambda+1, \mu}(z)], \\ \varrho_4 &= -\frac{2ct}{(2\varepsilon)z^{5/4}} [(z + \alpha - \gamma) M_{\lambda, -\mu}(z) + (1 - \alpha) M_{\lambda+1, -\mu}(z)]. \end{aligned} \right.$$

3.3 $F_-(t) = b \tanh \varphi + c \coth \varphi$

Considere agora a equação (3.4a),

$$\ddot{u}_2 + \left[i \left(\dot{F}_- \right) + (F_-)^2 + (2\varepsilon)^2 \right] u_2 = 0, \quad (3.20)$$

para o caso em que a diferença de campos F_- seja da forma

$$\begin{aligned} F_-(t) &= b \tanh \varphi + c \coth \varphi, \\ \varphi &\equiv \varphi(t) := \omega t + \varphi_0, \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde b , c , ω e φ_0 são constantes reais. Fazendo na expressão (3.20) a mudança de variáveis

$$z(t) = \tanh^2(\varphi(t)), \quad (3.22)$$

podemos prontamente inferir que

$$\ddot{u}_2 = \left(\frac{d^2 z}{dt^2} \right) \frac{du_2}{dz} + \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 \frac{d^2 u_2}{dz^2} \stackrel{(3.22)}{=} 2\omega^2 (1-z)(1-3z) \frac{du_2}{dz} + 4\omega^2 z(1-z)^2 \frac{d^2 u_2}{dz^2}$$

e a equação (3.20) neste caso em que $F_- = b \tanh \varphi + c \coth \varphi$ pode, portanto, ser reescrita como

$$\frac{d^2 u_2}{dz^2} + \frac{\left(-\frac{1}{2} + \frac{3}{2}z\right)}{z(z-1)} \frac{du_2}{dz} + \left[\frac{\left(\frac{c^2 - i\omega c}{4\omega^2}\right) + \left(\frac{(2\varepsilon)^2 + 2bc + i\omega(b+c)}{4\omega^2}\right)z + \left(\frac{b^2 - i\omega b}{4\omega^2}\right)z^2}{z^2(z-1)^2} \right] u_2 = 0. \quad (3.23)$$

A expressão (3.23) é uma equação Fuchsiana de segunda ordem⁴,

$$y''(z) + \underbrace{\left(\frac{\gamma_1^{(0)} + \gamma_1^{(1)}z}{(z-z_1)(z-z_2)} \right)}_{=: a_1(z)} y'(z) + \underbrace{\left(\frac{\gamma_0^{(0)} + \gamma_0^{(1)}z + \gamma_0^{(2)}z^2}{(z-z_1)^2(z-z_2)^2} \right)}_{=: a_0(z)} y(z) = 0, \quad (3.24)$$

⁴Busque também por *equação de Riemann-Papperitz*.

com três pontos singulares $z_1 = 0$, $z_2 = 1$ e um ponto z_3 no infinito [29]. Os coeficientes $\gamma_0^{(n),s}$ e $\gamma_1^{(n),s}$ são

$$\begin{aligned}\gamma_1^{(0)} &= -\frac{1}{2}, \quad \gamma_1^{(1)} = \frac{3}{2}, \\ \gamma_0^{(0)} &= \frac{(c^2 - i\omega c)}{4\omega^2}, \quad \gamma_0^{(1)} = \frac{(2\varepsilon)^2 + 2bc + i\omega(b+c)}{4\omega^2}, \quad \gamma_0^{(2)} = \frac{(b^2 - i\omega b)}{4\omega^2}.\end{aligned}$$

A viabilidade da obtenção da solução exata para o problema abordado nesta seção reside no fato de que qualquer equação Fuchsiana de segunda ordem com três pontos singulares z_1 , z_2 e z_3 (0, 1 e ∞ no nosso caso) pode ser transformada em uma *equação diferencial hipergeométrica* (também conhecida como *equação de Gauss*) a partir da transformação

$$y(z) = (z - z_1)^{\lambda_{z_1}^+} (z - z_2)^{\lambda_{z_2}^+} Y(z) \quad (3.25)$$

na função incógnita y . Os parâmetros $\lambda_{z_1}^+$ e $\lambda_{z_2}^+$ são zeros do polinômio indicial $P_\zeta(\lambda)$ da equação diferencial Fuchsiana (3.24) em ζ ,

$$P_\zeta(\lambda) := \lambda^2 + (q_\zeta - 1)\lambda + p_\zeta,$$

$$\lambda_\zeta^+ = \frac{1 - q_\zeta + \sqrt{(q_\zeta - 1)^2 - 4p_\zeta}}{2}, \quad \lambda_\zeta^- = \frac{1 - q_\zeta - \sqrt{(q_\zeta - 1)^2 - 4p_\zeta}}{2}, \quad (3.26a)$$

$$p_\zeta := \lim_{z \rightarrow \zeta} (z - \zeta)^2 a_0(z), \quad q_\zeta := \lim_{z \rightarrow \zeta} (z - \zeta) a_1(z), \quad \zeta = z_1 \text{ ou } z_2, \quad (3.26b)$$

e são chamados índices da equação diferencial Fuchsiana (3.24) em z_1 e z_2 , respectivamente. Analogamente, para o ponto no infinito tem-se que (vide [29])

$$\lambda_\infty^+ = \frac{1 - q_\infty + \sqrt{(q_\infty - 1)^2 - 4p_\infty}}{2}, \quad \lambda_\infty^- = \frac{1 - q_\infty - \sqrt{(q_\infty - 1)^2 - 4p_\infty}}{2}, \quad (3.27a)$$

$$p_\infty := \lim_{|z| \rightarrow \infty} z^2 a_0(z), \quad q_\infty := 2 - \lim_{|z| \rightarrow \infty} z a_1(z). \quad (3.27b)$$

A equação diferencial hipergeométrica é a equação⁵

$$z(1 - z)Y''(z) + [c - (1 + a + b)z]Y'(z) - abY(z) = 0 \quad (3.28)$$

ou, equivalentemente,

$$Y''(z) + \left[\frac{c}{z} + \frac{1 - c + a + b}{z - 1} \right] Y'(z) + \frac{ab}{z(z - 1)} Y(z) = 0$$

onde, neste caso,

$$a \equiv \lambda_{z_1}^+ + \lambda_{z_2}^+ + \lambda_\infty^+, \quad b \equiv \lambda_{z_1}^+ + \lambda_{z_2}^+ + \lambda_\infty^-, \quad c \equiv 1 - (\lambda_{z_1}^- - \lambda_{z_1}^+). \quad (3.29)$$

⁵É importante salientar que os parâmetros b e c da equação hipergeométrica (3.28) não devem ser confundidos com os parâmetros b e c (3.21) do sistema físico estudado nesta seção.

A bem conhecida solução geral da equação hipergeométrica é

$$Y(z) = \mathcal{C}_1 F(a, b; c; z) + \mathcal{C}_2 z^{1-c} F(a+1-c, b+1-c; 2-c; z),$$

na qual $F(\alpha, \beta; \gamma; z)$ é a função hipergeométrica de Gauss [28], com $\mathcal{C}_{1,2}$ sendo constantes complexas. Portanto, pela transformação (3.25), temos que

$$u_2(z) = \mathcal{C}_1 z^{\lambda_{z_1}^+} (z-1)^{\lambda_{z_2}^+} F(a, b; c; z) + \mathcal{C}_2 z^{1-c+\lambda_{z_1}^+} (z-1)^{\lambda_{z_2}^+} F(a+1-c, b+1-c; 2-c; z). \quad (3.30)$$

Precisamos, agora, calcular os parâmetros $\lambda_{z_1}^+, \lambda_{z_2}^+, a, b$ e c em (3.30). Ocorre que sempre que

$$z_1 = 0, \quad z_2 = 1,$$

então, pelas expressões (3.26b) e (3.27b) temos que

$$\begin{aligned} p_{z_1} &= \gamma_0^{(0)}, & q_{z_1} &= -\gamma_1^{(0)}, \\ p_{z_2} &= \gamma_0^{(0)} + \gamma_0^{(1)} + \gamma_0^{(2)}, & q_{z_2} &= \gamma_1^{(0)} + \gamma_1^{(1)}, \\ p_\infty &= \gamma_0^{(2)}, & q_\infty &= 2 - \gamma_1^{(1)}, \end{aligned}$$

o que nos permite obter, a partir das expressões (3.26a) e (3.27a), que

$$\lambda_{z_1}^+ = \frac{1}{2} - \mu, \quad \lambda_{z_1}^- = \mu, \quad \lambda_{z_2}^+ = \nu, \quad \lambda_\infty^+ = \frac{1}{2} + \frac{ib}{2\omega}, \quad \lambda_\infty^- = -\frac{ib}{2\omega},$$

e, por (3.29),

$$a = \alpha - \gamma + 1, \quad b = \beta - \gamma + 1, \quad c = 2 - \gamma,$$

onde utilizamos a notação

$$\begin{aligned} \mu &= -\frac{ic}{2\omega}, \quad \nu = \frac{i}{2\omega} \sqrt{(2\varepsilon)^2 + (b+c)^2}, \\ \gamma &= \frac{1}{2} + 2\mu, \quad \alpha = \gamma + \nu + \frac{i}{2\omega} (b+c), \quad \beta = \nu - \frac{i}{2\omega} (b+c). \end{aligned}$$

Logo, a solução para u_2 (3.30) é

$$u_2(z) = \mathcal{C}_1 z^{\frac{1}{2}-\mu} (z-1)^\nu F(\alpha - \gamma + 1, \beta - \gamma + 1; 2 - \gamma; z) + \mathcal{C}_2 z^\mu (z-1)^\nu F(\alpha, \beta; \gamma; z). \quad (3.31)$$

As equações acopladas (2.13), neste caso em que $F_-(t) = b \tanh \varphi + c \coth \varphi$ e $J = \varepsilon$, são

$$i\ddot{u}_2 = (b \tanh \varphi + c \coth \varphi) u_2 + 2\varepsilon u_3, \quad (3.32a)$$

$$i\ddot{u}_3 = 2\varepsilon u_2 - (b \tanh \varphi + c \coth \varphi) u_3. \quad (3.32b)$$

Podemos, então, encontrar a solução para o coeficiente u_3 substituindo a solução u_2 (3.31) na equação acoplada (3.32a). Assim sendo, a partir da relação $\frac{dF(a,b;c;z)}{dz} = \frac{ab}{c} F(a+1, b+1; c+1; z)$ [28], encontramos, após um dispendioso esforço algébrico, a componente u_3 . Obtemos, portanto,

$$\begin{aligned} u_2 &= \mathcal{C}_1 \varrho_1(z) + \mathcal{C}_2 \varrho_2(z), \\ u_3 &= \mathcal{C}_1 \varrho_3(z) + \mathcal{C}_2 \varrho_4(z), \end{aligned}$$

em que definimos

$$\left\{ \begin{array}{l} \varrho_1 = z^{\frac{1}{2}-\mu} (z-1)^\nu F(\alpha - \gamma + 1, \beta - \gamma + 1; 2 - \gamma; z), \\ \varrho_2 = z^\mu (z-1)^\nu F(\alpha, \beta; \gamma; z), \\ \varrho_3 = \frac{2i\omega z^{1/2}}{(2\varepsilon)} \left[\left(\frac{1-\gamma}{z} + \gamma - 1 - \beta \right) \varrho_1 - z^{\frac{1}{2}-\mu} (z-1)^{\nu+1} \frac{(\alpha-\gamma+1)(\beta-\gamma+1)}{2-\gamma} F(\alpha - \gamma + 2, \beta - \gamma + 2; 3 - \gamma; z) \right], \\ \varrho_4 = -\frac{2i\omega \beta z^{1/2}}{(2\varepsilon)} \left[\varrho_2 + \frac{\alpha}{\gamma} z^\mu (z-1)^{\nu+1} F(\alpha + 1, \beta + 1; \gamma + 1; z) \right]. \end{array} \right.$$

As soluções analíticas **4** a **11** listadas na seção 4.1.1, seguem este roteiro de cálculo.

Capítulo 4

Lista de Soluções Exatas

Vamos aqui apresentar uma série de soluções exatas para sistemas quânticos de dois e três spins introduzidos nas seções 2.2 e 2.3, respectivamente. Considere, em todo o decorrer deste capítulo, a seguinte notação [28]:

$F(\alpha, \beta; \gamma; z) \equiv {}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z)$ é a função hipergeométrica de Gauss;
 $M_{\lambda, \mu}(z)$ é a função de Whittaker;
 $D_\mu(z)$ é a função cilíndrica parabólica;
 $\varphi \equiv \varphi(t) := \omega t + \varphi_0$;
 $A, A_0, b, c, \varepsilon, \omega$ e φ_0 são constantes reais;
 $\alpha, \beta, \gamma, \lambda, \mu, \nu, \mathcal{C}_{1,2}$ e $\kappa_{1,2}$ são, em geral, constantes complexas.

4.1 Soluções para Sistemas de Dois Spins

4.1.1 Interação de spin constante ou campos externos com uma diferença constante

Considere a seguir os casos (i) e (ii) estudados na seção *Campos magnéticos externos paralelos* (2.2.1).

(i) Função de interação constante

Para o caso em que

$$J = \varepsilon, \quad F_-(t) = f(t),$$

os coeficientes v_i do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ (2.6) são, por (2.11) e (2.14),

$$\left\{ \begin{array}{l} v_1(t) = c_1 e^{-i\varepsilon(t-t_0)} \exp \left[-i \int_{t_0}^t F_+(\tau) d\tau \right], \\ v_2(t) = e^{i\varepsilon(t-t_0)} \underbrace{[\mathcal{C}_1 \varrho_1(z) + \mathcal{C}_2 \varrho_2(z)]}_{=u_2}, \\ v_3(t) = e^{i\varepsilon(t-t_0)} \underbrace{[\mathcal{C}_1 \varrho_3(z) + \mathcal{C}_2 \varrho_4(z)]}_{=u_3}, \\ v_4(t) = c_4 e^{-i\varepsilon(t-t_0)} \exp \left[i \int_{t_0}^t F_+(\tau) d\tau \right], \end{array} \right. \quad (4.1)$$

onde as funções $\varrho_j(z(t))$ dependem da diferença $F_-(t) = f(t)$ e as constantes

$$\begin{aligned}\mathcal{C}_1(c_2, c_3) &= \frac{c_2 \varrho_4(z_0) - c_3 \varrho_2(z_0)}{\varrho_1(z_0) \varrho_4(z_0) - \varrho_2(z_0) \varrho_3(z_0)}, \\ \mathcal{C}_2(c_2, c_3) &= \frac{c_3 \varrho_1(z_0) - c_2 \varrho_3(z_0)}{\varrho_1(z_0) \varrho_4(z_0) - \varrho_2(z_0) \varrho_3(z_0)},\end{aligned}$$

com $z_0 \equiv z(t_0)$, foram determinadas a partir da condição de contorno no tempo inicial¹ t_0 , ou seja, foram obtidas em termos dos coeficientes $c_{2,3}$ do estado inicial normalizado arbitrário

$$|\Psi(t_0)\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t_0) & v_2(t_0) & v_3(t_0) & v_4(t_0) \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} c_1 & c_2 & c_3 & c_4 \end{pmatrix}^T, \quad \sum_{i=1}^4 |c_i|^2 = 1. \quad (4.2)$$

(ii) Campos magnéticos com uma diferença constante

Para o caso em que

$$F_- = 2\varepsilon, \quad 2J(t) = f(t),$$

os coeficientes v_i do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ (2.6) são, por (2.10, 2.20),

$$\left\{ \begin{aligned} v_1(t) &= c_1 \exp \left[-i \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau \right] \exp \left[-i \int_{t_0}^t F_+(\tau) d\tau \right], \\ v_2(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[i \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau \right] \underbrace{\left\{ \kappa_1 [\varrho_1(z) + \varrho_3(z)] + \kappa_2 [\varrho_2(z) + \varrho_4(z)] \right\}}_{=u_2+u_3}, \\ v_3(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[i \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau \right] \underbrace{\left\{ \kappa_1 [\varrho_1(z) - \varrho_3(z)] + \kappa_2 [\varrho_2(z) - \varrho_4(z)] \right\}}_{=u_2-u_3}, \\ v_4(t) &= c_4 \exp \left[-i \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau \right] \exp \left[i \int_{t_0}^t F_+(\tau) d\tau \right], \end{aligned} \right. \quad (4.3)$$

onde as funções $\varrho_j(z(t))$ dependem da função de interação $J(t) = \frac{f(t)}{2}$, $F_+(t)$ é dado por (2.21) e as constantes

$$\begin{aligned}\kappa_1(c_2, c_3) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\varrho_2(z_0)(c_2 - c_3) - \varrho_4(z_0)(c_2 + c_3)}{\varrho_2(z_0) \varrho_3(z_0) - \varrho_1(z_0) \varrho_4(z_0)}, \\ \kappa_2(c_2, c_3) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\varrho_1(z_0)(c_2 - c_3) - \varrho_3(z_0)(c_2 + c_3)}{\varrho_1(z_0) \varrho_4(z_0) - \varrho_2(z_0) \varrho_3(z_0)},\end{aligned}$$

foram também determinadas a partir da imposição da condição inicial (4.2).

Funções ϱ_i

Soluções exatas dos problemas anteriores (i) e (ii) foram calculadas para 11 diferentes funções $f(t)$. As correspondentes soluções ϱ_i são listadas a seguir e podem ser inseridas² em (4.1) e (4.3).

¹Sem perda de generalidade, podemos impor $t_0 = 0$.

²A renomeação dessas soluções por $\varrho_1 \leftrightarrow \varrho_2$ e/ou $\varrho_3 \leftrightarrow \varrho_4$ se faz, também, perfeitamente possível.

1. $f(t) = bt + c :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = 2\sqrt{b}D_\mu(z), \quad \varrho_2 = 2\sqrt{b}D_{-\mu-1}(iz), \\ \varrho_3 = (1+i)(2\varepsilon)D_{\mu-1}(z), \quad \varrho_4 = \frac{(1+i)(2b)}{(2\varepsilon)}D_{-\mu}(iz). \end{array} \right. \quad (4.4)$$

$$z(t) = \frac{1+i}{\sqrt{b}}(bt+c), \quad \mu = \frac{-i(2\varepsilon)^2}{2b}.$$

2. $f(t) = b/t + c :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = M_{\lambda,\mu}(z), \quad \varrho_2 = M_{\lambda,-\mu}(z), \\ \varrho_3 = \frac{i}{(2\varepsilon)t} \left[\left(\frac{z}{2} + \alpha - 2\gamma - \frac{\alpha}{2\gamma} + \frac{1}{2} \right) M_{\lambda,\mu}(z) + (2\gamma - \alpha) M_{\lambda+1,\mu}(z) \right], \\ \varrho_4 = \frac{i}{(2\varepsilon)t} \left[\left(\frac{z}{2} + \alpha - 2\gamma - \frac{\alpha}{2\gamma} + \frac{1}{2} \right) M_{\lambda,-\mu}(z) + (1 - \alpha) M_{\lambda+1,-\mu}(z) \right]. \end{array} \right.$$

$$z(t) = 2it\sqrt{(2\varepsilon)^2 + c^2}, \quad \gamma = -ib, \quad \alpha = \gamma \left(1 - \frac{c}{\sqrt{(2\varepsilon)^2 + c^2}} \right),$$

$$\lambda = \gamma - \alpha, \quad \mu = \gamma - 1/2.$$

3. $f(t) = b/t + ct :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = z^{-1/4}M_{\lambda,\mu}(z), \quad \varrho_2 = z^{-1/4}M_{\lambda,-\mu}(z), \\ \varrho_3 = -\frac{2ct}{(2\varepsilon)z^{5/4}} [(z + \alpha - \gamma) M_{\lambda,\mu}(z) + (\gamma - \alpha) M_{\lambda+1,\mu}(z)], \\ \varrho_4 = -\frac{2ct}{(2\varepsilon)z^{5/4}} [(z + \alpha - \gamma) M_{\lambda,-\mu}(z) + (1 - \alpha) M_{\lambda+1,-\mu}(z)]. \end{array} \right.$$

$$z(t) = ict^2, \quad \alpha = \frac{i(2\varepsilon)^2}{4c}, \quad \gamma = \frac{1}{2} - ib, \quad \mu = \frac{\gamma - 1}{2},$$

$$\frac{1}{2} + \mu - \lambda = \alpha, \quad \lambda = \frac{\gamma}{2} - \alpha.$$

4. $f(t) = b \tan(\varphi) + c :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = z^\mu (z-1)^\nu F(\alpha, \beta; \gamma; z), \\ \varrho_2 = z^{-\mu} (z-1)^\nu F(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 2-\gamma; z), \\ \varrho_3 = \frac{2\omega}{(2\varepsilon)} \left[\left(\mu + \frac{\nu}{2} - \frac{c}{2\omega} \right) \varrho_1 + z^{\mu+1} (z-1)^\nu \frac{\alpha\beta}{\gamma} F(\alpha+1, \beta+1; \gamma+1; z) \right], \\ \varrho_4 = \frac{2\omega}{(2\varepsilon)} \left[\left(\frac{\nu}{2} - \mu - \frac{c}{2\omega} \right) \varrho_2 + z^{1-\mu} (z-1)^\nu \frac{(\alpha+1-\gamma)(\beta+1-\gamma)}{2-\gamma} F(\alpha+2-\gamma, \beta+2-\gamma; 3-\gamma; z) \right]. \end{array} \right.$$

$$z(t) = -e^{-2i\varphi(t)}, \quad \mu = \frac{1}{2\omega} \sqrt{(2\varepsilon)^2 + (c - ib)^2}, \quad \alpha = \mu + \nu + \lambda,$$

$$\nu = \frac{ib}{\omega}, \quad \beta = \mu + \nu - \lambda, \quad \gamma = 1 + 2\mu, \quad \lambda = \frac{1}{2\omega} \sqrt{(2\varepsilon)^2 + (c + ib)^2}.$$

5. $f(t) = b \tanh(\varphi) + c \coth(\varphi) :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = z^{\frac{1}{2}-\mu} (z-1)^\nu F(\alpha - \gamma + 1, \beta - \gamma + 1; 2 - \gamma; z), \\ \varrho_2 = z^\mu (z-1)^\nu F(\alpha, \beta; \gamma; z), \\ \varrho_3 = \frac{2i\omega z^{1/2}}{(2\varepsilon)} \left[\left(\frac{1-\gamma}{z} + \gamma - 1 - \beta \right) \varrho_1 - z^{\frac{1}{2}-\mu} (z-1)^{\nu+1} \frac{(\alpha-\gamma+1)(\beta-\gamma+1)}{2-\gamma} F(\alpha - \gamma + 2, \beta - \gamma + 2; 3 - \gamma; z) \right], \\ \varrho_4 = -\frac{2i\omega \beta z^{1/2}}{(2\varepsilon)} \left[\varrho_2 + \frac{\alpha}{\gamma} z^\mu (z-1)^{\nu+1} F(\alpha + 1, \beta + 1; \gamma + 1; z) \right]. \end{array} \right.$$

$$z(t) = \tanh^2(\varphi(t)), \quad \mu = -\frac{ic}{2\omega}, \quad \nu = \frac{i}{2\omega} \sqrt{(2\varepsilon)^2 + (b+c)^2},$$

$$\gamma = \frac{1}{2} + 2\mu, \quad \alpha = \gamma + \nu + \frac{i}{2\omega} (b+c), \quad \beta = \nu - \frac{i}{2\omega} (b+c).$$

6. $f(t) = b \tanh(\varphi) + c :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = z^\mu (z-1)^\nu F(\alpha + 1, \beta; \gamma; z), \\ \varrho_2 = z^{-\mu} (z-1)^\nu F(\alpha + 2 - \gamma, \beta + 1 - \gamma; 2 - \gamma; z), \\ \varrho_3 = \frac{2i\omega}{(2\varepsilon)} \left\{ \left[\beta z - \mu + \frac{i(b+c)}{2\omega} \right] \varrho_1 + z^{\mu+1} (z-1)^{\nu+1} \frac{(\alpha+1)\beta}{\gamma} F(\alpha + 2, \beta + 1; \gamma + 1; z) \right\}, \\ \varrho_4 = \frac{2i\omega}{(2\varepsilon)} \left\{ \left[(\beta - \gamma + 1) z + \mu + \frac{i(b+c)}{2\omega} \right] \varrho_2 + z^{1-\mu} (z-1)^{\nu+1} \frac{(\alpha+2-\gamma)(\beta+1-\gamma)}{2-\gamma} F(\alpha + 3 - \gamma, \beta + 2 - \gamma; 3 - \gamma; z) \right\}. \end{array} \right.$$

$$z(t) = \frac{1}{2} (1 - \tanh \varphi(t)), \quad \alpha = \mu + \nu + \frac{ib}{\omega}, \quad \nu = \frac{i}{2\omega} \sqrt{(2\varepsilon)^2 + (b-c)^2},$$

$$\beta = \mu + \nu - \frac{ib}{\omega}, \quad \gamma = 1 + 2\mu, \quad \mu = \frac{i}{2\omega} \sqrt{(2\varepsilon)^2 + (b+c)^2}.$$

7. $f(t) = b \coth(\varphi) + c :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = z^{1-\mu} (z-1)^\nu F(\alpha + 1 - \gamma, \beta + 1 - \gamma; 2 - \gamma; z), \\ \varrho_2 = z^\mu (z-1)^\nu F(\alpha, \beta; \gamma; z), \\ \varrho_3 = \frac{2i\omega}{2\varepsilon} \left[\left(\frac{1-2\mu}{z} + \frac{3\mu}{2} - \nu - \frac{c}{2i\omega} - 1 \right) \varrho_1 - z^{1-\mu} (z-1)^{\nu+1} \frac{(\alpha+1-\gamma)(\beta+1-\gamma)}{2-\gamma} F(\alpha + 2 - \gamma, \beta + 2 - \gamma; 3 - \gamma; z) \right], \\ \varrho_4 = -\frac{2i\omega}{(2\varepsilon)} \left[\left(\frac{\mu}{2} + \nu + \frac{c}{2i\omega} \right) \varrho_2 + z^\mu (z-1)^{\nu+1} \frac{\alpha\beta}{\gamma} F(\alpha + 1, \beta + 1; \gamma + 1; z) \right]. \end{array} \right.$$

$$z(t) = 1 - e^{-2\varphi(t)}, \quad \mu = -\frac{ib}{\omega}, \quad \nu = \frac{i}{2\omega} \sqrt{(2\varepsilon)^2 + (b+c)^2}, \quad \alpha = \nu + \mu + \lambda,$$

$$\beta = \mu + \nu - \lambda, \quad \gamma = -\frac{2ib}{\omega}, \quad \lambda = \frac{i}{2\omega} \sqrt{(2\varepsilon)^2 + (b-c)^2}.$$

8. $f(t) = (b \cos 2\varphi + c) / \sin 2\varphi :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = \frac{i\omega \sin(2\varphi)}{(2\varepsilon)} \left[\left(\frac{\gamma}{z} + \frac{2\nu+1/2}{z-1} \right) \varrho_3 + z^{\mu+1/2} (z-1)^{\nu+1/2} \frac{(\alpha+1)(\beta+1)}{\gamma+1} F(\alpha+2, \beta+2; \gamma+2; z) \right], \\ \varrho_2 = \frac{i\omega \sin(2\varphi)}{(2\varepsilon)} \left[\frac{2\nu+1/2}{z-1} \varrho_4 + z^{-\mu} (z-1)^{\nu+1/2} \frac{(\alpha+1-\gamma)(\beta+1-\gamma)}{1-\gamma} F(\alpha+2-\gamma, \beta+2-\gamma; 2-\gamma; z) \right], \\ \varrho_3 = z^{\mu+1/2} (z-1)^{\nu+1/2} F(\alpha+1, \beta+1; \gamma+1; z), \\ \varrho_4 = z^{-\mu} (z-1)^{\nu+1/2} F(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 1-\gamma; z). \end{array} \right.$$

$$z(t) = \sin^2(\varphi(t)), \quad \mu = -\frac{i}{4\omega} (b+c), \quad \nu = \frac{i}{4\omega} (c-b), \quad \gamma = \frac{1}{2} + 2\mu,$$

$$\alpha = \frac{1}{2\omega} \left(\sqrt{(2\varepsilon)^2 - b^2 - ib} \right), \quad \beta = -\frac{1}{2\omega} \left(\sqrt{(2\varepsilon)^2 - b^2 + ib} \right).$$

9. $f(t) = b \tan \varphi + c \cot \varphi :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = \frac{i\omega}{(2\varepsilon)} \sin(2\varphi) \left[\left(\frac{\gamma}{z} + \frac{2\nu+1/2}{z-1} \right) \varrho_3 + z^{\mu+1/2} (z-1)^{\nu+1/2} \frac{(\alpha+1)(\beta+1)}{\gamma+1} F(\alpha+2, \beta+2; \gamma+2; z) \right], \\ \varrho_2 = \frac{i\omega}{(2\varepsilon)} \sin(2\varphi) \left[\frac{2\nu+1/2}{z-1} \varrho_4 + z^{-\mu} (z-1)^{\nu+1/2} \frac{(\alpha+1-\gamma)(\beta+1-\gamma)}{1-\gamma} F(\alpha+2-\gamma, \beta+2-\gamma; 2-\gamma; z) \right], \\ \varrho_3 = z^{\mu+1/2} (z-1)^{\nu+1/2} F(\alpha+1, \beta+1; \gamma+1; z), \\ \varrho_4 = z^{-\mu} (z-1)^{\nu+1/2} F(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 1-\gamma; z). \end{array} \right.$$

$$z(t) = \sin^2(\varphi(t)), \quad \mu = -\frac{ic}{2\omega}, \quad \nu = \frac{ib}{2\omega}, \quad \lambda = \frac{1}{2\omega} \sqrt{(2\varepsilon)^2 - (b-c)^2},$$

$$\alpha = \mu + \nu + \lambda, \quad \beta = \mu + \nu - \lambda, \quad \gamma = \frac{1}{2} + 2\mu.$$

10. $f(t) = (b \cosh 2\varphi + c) / \sinh 2\varphi :$

$$\left[\begin{array}{l} \varrho_1 = z^\mu (z-1)^\nu F(\alpha, \beta; \gamma; z), \\ \varrho_2 = z^{\frac{1}{2}-\mu} (z-1)^\nu F(\alpha-\gamma+1, \beta-\gamma+1; 2-\gamma; z), \\ \varrho_3 = \frac{-2i\omega\beta}{(2\varepsilon)} \tanh \varphi \left[\varrho_1 + z^\mu (z-1)^{\nu+1} \frac{\alpha}{\gamma} F(\alpha+1, \beta+1; \gamma+1; z) \right], \\ \varrho_4 = \frac{-2i\omega}{(2\varepsilon)} \tanh \varphi \left[\left(\frac{\gamma-1}{z} - \alpha + 2\nu + 1 \right) \varrho_2 + z^{\frac{1}{2}-\mu} (z-1)^{\nu+1} \frac{(\alpha-\gamma+1)(\beta-\gamma+1)}{2-\gamma} F(\alpha-\gamma+2, \beta-\gamma+2; 3-\gamma; z) \right]. \end{array} \right.$$

$$z(t) = \tanh^2(\varphi(t)), \quad \mu = -\frac{i}{4\omega}(b+c), \quad \nu = \frac{i}{2\omega}\sqrt{(2\varepsilon)^2 + b^2},$$

$$\alpha = \frac{1}{2} + \nu - \frac{ic}{2\omega}, \quad \beta = \nu - \frac{ib}{2\omega}, \quad \gamma = \frac{1}{2} + 2\mu.$$

11. $f(t) = c/\cosh(\varphi)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varrho_1 = z^\mu (z-1)^\nu F(\alpha, \nu; \gamma; z), \\ \varrho_2 = z^{\frac{1}{2}-\mu} (z-1)^\nu F(\alpha+1-\gamma, \nu+1-\gamma; 2-\gamma; z), \\ \varrho_3 = \frac{2\omega z}{(2\varepsilon)\cosh\varphi} \left[\frac{\nu}{z-1} \varrho_1 + z^\mu (z-1)^\nu \frac{\alpha\nu}{\gamma} F(\alpha+1, \nu+1; \gamma+1; z) \right], \\ \varrho_4 = \frac{2\omega z}{(2\varepsilon)\cosh\varphi} \left[\left(\frac{1-\gamma}{z} + \frac{\nu}{z-1} \right) \varrho_2 + z^{\frac{1}{2}-\mu} (z-1)^\nu \frac{(\alpha+1-\gamma)(\nu+1-\gamma)}{2-\gamma} F(\alpha+2-\gamma, \nu+2-\gamma; 3-\gamma; z) \right]. \end{array} \right.$$

$$z(t) = \frac{\sinh(\varphi(t)) + i}{\sinh(\varphi(t)) - i}, \quad \mu = \frac{c}{2\omega}, \quad \nu = \frac{i}{\omega}|2\varepsilon|, \quad \alpha = \gamma + \nu, \quad \gamma = \frac{1}{2} + 2\mu.$$

4.1.2 Caso simétrico

$\mathbf{F}^{(1)} = \mathbf{F}^{(2)} = (0, 0, F(t))$, $J = J(t)$:

Neste caso, as soluções v_j do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ do correspondente problema quântico ($i\partial_t |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$) relativo à Hamiltoniana (2.4) são

$$\left\{ \begin{array}{l} v_1(t) = c_1 e^{-i(\tilde{J}+2\tilde{F})}, \\ v_2(t) = e^{i\tilde{J}} \left[c_2 \cos(2\tilde{J}) - ic_3 \sin(2\tilde{J}) \right], \\ v_3(t) = e^{i\tilde{J}} \left[c_3 \cos(2\tilde{J}) - ic_2 \sin(2\tilde{J}) \right], \\ v_4(t) = c_4 e^{-i(\tilde{J}-2\tilde{F})}, \end{array} \right.$$

com

$$\tilde{J}(t) \equiv \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau, \quad \tilde{F}(t) \equiv \int_{t_0}^t F(\tau) d\tau,$$

para funções arbitrárias F e J . Este sistema corresponde ao problema analisado na seção (4.1.4) para o particular caso em que $\mu = \frac{\pi}{2}$.

4.1.3 Dois spins em um campo magnético girante

$\mathbf{F}^{(1)} = \mathbf{F}^{(2)} = (A \cos \omega t, A \sin \omega t, A_0)$, $J = J(t)$:

Considere o sistema de dois spins (2.4) para o caso em que ambas as partículas estão imersas em um campo externo girante

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

$$\mathbf{F}(t) = \mu_B \mathbf{B}(t),$$

onde A , A_0 e ω são constantes reais. Consequentemente, a Hamiltoniana neste caso toma a forma

$$\begin{aligned}\hat{H}(t) &= \mathbf{F} \cdot (\boldsymbol{\Sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\Sigma}^{(2)}) + J\Gamma, \\ \hat{H}(t) &= \mathbf{F}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes I + I \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(t) + J(t) [\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y + \sigma_z \otimes \sigma_z].\end{aligned}$$

Os operadores de interação $\Gamma^{ij} = \boldsymbol{\Sigma}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\Sigma}^{(j)}$ (2.2) são esfericamente simétricos e, portanto, comutam com rotações $\mathcal{R}_{\mathbf{n}}$ em torno de uma direção $\hat{\mathbf{n}}$ ($\hat{\mathbf{n}}^2 = 1$),

$$\begin{aligned}[\Gamma^{jk}, \mathcal{R}_{\mathbf{n}}] &= 0, \quad [\Gamma^{mn}, \Sigma_i^{(m)} + \Sigma_i^{(n)}] = 0 \quad (i = x, y, z), \\ \mathcal{R}_{\mathbf{n}}(\theta) &= \exp\left(-\frac{i\theta}{2} \hat{\mathbf{n}} \cdot \sum_{i=1}^n \boldsymbol{\Sigma}^i\right) = \prod_{k=1}^n \exp\left(-\frac{i\theta}{2} \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Sigma}^k\right).\end{aligned}\tag{4.5}$$

Este fato torna conveniente, como ficará claro logo a seguir, a utilização do método de *sistemas de coordenadas girantes* [27] afim de se encontrar a solução exata deste problema. Primeiramente, aplicando uma rotação de um ângulo ωt em torno do eixo $\hat{\mathbf{z}}$,

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_z(\omega t) &= \hat{r}_z \otimes \hat{r}_z, \\ \hat{r}_z &= \exp\left(\frac{-i\omega t}{2} \sigma_z\right),\end{aligned}\tag{4.6}$$

vemos, a partir da equação de dois spins³ $\hat{H}|\Psi\rangle = i\hbar\partial_t|\Psi\rangle$, que o espinor transformado $|\Psi'(t)\rangle = \mathcal{R}_z^{-1}(\omega t)|\Psi(t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger $\hat{H}'|\Psi'\rangle = i\hbar\partial_t|\Psi'\rangle$ com uma Hamiltoniana dada por

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= \mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z = \mathbf{F}' \cdot (\boldsymbol{\Sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\Sigma}^{(2)}) + J\Gamma, \\ \mathbf{F}' &= (A, 0, A'_0), \quad A'_0 = A_0 - \hbar\omega/2.\end{aligned}$$

Agora, aplicando uma segunda rotação é possível alinhar o campo *independente do tempo* $\mathbf{F}' = (A, 0, A'_0)$ ao longo da direção $\hat{\mathbf{z}}$. Para tanto, considere a transformação

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_y(\theta) &= \hat{r}_y \otimes \hat{r}_y, \\ \hat{r}_y &= \exp\left(\frac{-i\theta}{2} \sigma_y\right), \quad \tan\theta = \frac{A}{A'_0}.\end{aligned}\tag{4.7}$$

O vetor de estado $|\Psi''(t)\rangle = \mathcal{R}_y^{-1}(\theta)|\Psi'(t)\rangle$ obedece à equação $\hat{H}''|\Psi''\rangle = i\hbar\partial_t|\Psi''\rangle$, onde a nova Hamiltoniana é

$$\begin{aligned}\hat{H}'' &= \mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}'\mathcal{R}_y = \mathbf{F}'' \cdot (\boldsymbol{\Sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\Sigma}^{(2)}) + J\Gamma = F_z'' (\Sigma_z^{(1)} + \Sigma_z^{(2)}) + J(t)\Gamma, \\ \mathbf{F}'' &= (0, 0, A''_0), \quad (A''_0)^2 = (A'_0)^2 + A^2,\end{aligned}$$

i.e.,

$$\hat{H}'' = A''_0 \sigma_z \otimes I + I \otimes A''_0 \sigma_z + J(t)\Gamma.$$

³Neste particular problema (assim como no seu análogo para três spins apresentado um pouco mais adiante), optamos por explicitar a constante de Planck reduzida $\hbar$, diferentemente do que ocorre no restante do texto, onde utilizamos a unidade natural $\hbar = 1$.

Visto que⁴ $\left[\hat{H}''(\tau_1), \hat{H}''(\tau_2)\right] = 0$ ($\forall \tau_1, \tau_2$), o operador de evolução temporal neste novo referencial é (vide a expressão análoga (4.17)) $\hat{U}''(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}''(\tau) d\tau\right)$ e ele pode facilmente ser calculado neste caso. Sua forma explícita é

$$\hat{U}''(t, t_0) = \prod_{k=1}^2 \left[\cos(A_0''(t - t_0)/\hbar) - i\Sigma_z^{(k)} \sin(A_0''(t - t_0)/\hbar) \right] \times \exp\left(-\frac{i\Gamma}{\hbar} \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau\right). \quad (4.8)$$

Portanto, os vetores de estado

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle, \quad |\Psi''(t)\rangle = \hat{U}''(t, t_0) |\Psi''(t_0)\rangle \quad (4.9)$$

estão conectados pelas transformações

$$|\Psi(t)\rangle = \mathcal{R}_z(\omega t) |\Psi'(t)\rangle, \quad |\Psi'(t)\rangle = \mathcal{R}_y(\theta) |\Psi''(t)\rangle, \quad (4.10)$$

e, conseqüentemente, substituindo as equações (4.9) em (4.10), obtemos a solução exata

$$|\Psi(t)\rangle = \underbrace{\mathcal{R}_z(t) \mathcal{R}_y(\theta) \hat{U}''(t, t_0) \mathcal{R}_y^{-1}(\theta) \mathcal{R}_z^{-1}(t_0)}_{=\hat{U}(t, t_0)} |\Psi(t_0)\rangle.$$

Uma vez que $\mathcal{R}_z^{-1}(t_0) = I^{\otimes 2} = I \otimes I$, das expressões (4.6), (4.7) e (4.8) pode-se inferir que

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= \mathcal{R}_z(t) \mathcal{R}_y(\theta) \hat{U}''(t, t_0) \mathcal{R}_y(-\theta), \\ \hat{U}(t, t_0) &= e^{i\zeta} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} M_1 & e^{-i\omega t} M_4 & e^{-i\omega t} M_4 & e^{-i\omega t} M_6 \\ M_4 & M_2 & M_7 & M_5 \\ M_4 & M_7 & M_2 & M_5 \\ e^{i\omega t} M_6 & e^{i\omega t} M_5 & e^{i\omega t} M_5 & e^{i\omega t} M_3 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

ou alternativamente,

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) \\ v_2(t) \\ v_3(t) \\ v_4(t) \end{pmatrix} = e^{i\zeta} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} (c_1 M_1 + c_2 M_4 + c_3 M_4 + c_4 M_6) \\ c_1 M_4 + c_2 M_2 + c_3 M_7 + c_4 M_5 \\ c_1 M_4 + c_2 M_7 + c_3 M_2 + c_4 M_5 \\ e^{i\omega t} (c_1 M_6 + c_2 M_5 + c_3 M_5 + c_4 M_3) \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi_0\rangle, \quad |\Psi_0\rangle = \begin{pmatrix} c_1 & c_2 & c_3 & c_4 \end{pmatrix}^T, \quad \sum_{i=1}^4 |c_i|^2 = 1,$$

⁴Pois, por (4.5), $\left[\Gamma^{mn}, \Sigma_i^{(m)} + \Sigma_i^{(n)}\right] = 0$.

onde definimos

$$\left\{ \begin{array}{l} M_1 = e^{-2i(\zeta-\chi)} \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + e^{-2i(\chi+\zeta)} \cos^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \frac{1}{2} e^{-2i\zeta} \sin^2 \theta , \\ M_2 = \cos(2\zeta) - \left(\frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) \{ e^{-2i\zeta} [1 - \cos(2\chi)] \} , \\ M_3 = e^{-2i(\chi+\zeta)} \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + e^{-2i(-\chi+\zeta)} \cos^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \frac{1}{2} e^{-2i\zeta} \sin^2 \theta , \\ M_4 = \left(-\frac{1}{2} \sin \theta \right) \{ \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) [e^{-2i(\zeta-\chi)} - e^{-2i\zeta}] + \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) [e^{-2i\zeta} - e^{-2i(\chi+\zeta)}] \} , \\ M_5 = \left(\frac{1}{2} \sin \theta \right) \{ \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) [e^{-2i(\zeta+\chi)} - e^{-2i\zeta}] + \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) [e^{-2i\zeta} - e^{-2i(-\chi+\zeta)}] \} , \\ M_6 = \left(-\frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) \{ e^{-2i\zeta} [1 - \cos(2\chi)] \} , \\ M_7 = -i \sin(2\zeta) - \left(\frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) \{ e^{-2i\zeta} [1 - \cos(2\chi)] \} , \end{array} \right.$$

e

$$\tan \theta = \frac{A}{A'_0}, \quad \chi = \frac{A''_0(t-t_0)}{\hbar}, \quad \zeta = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau, \quad A'_0 = A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (A''_0)^2 = (A'_0)^2 + A^2, \quad t_0 = 0.$$

Cálculos e análises da *fase geométrica* (ou *fase de Pancharatnam-Berry*) para esse sistema de dois spins na presença de um campo magnético girante foram realizados, e.g., em [30, 31, 32].

Os estados separáveis (2.23) permitem, por exemplo, o cálculo da solução exata $|\Psi(t)\rangle$ para o caso de spins inicialmente orientados ao longo do campo magnético externo:

$$|\Psi(t_0 = 0)\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = |\mathbf{n} \uparrow, \mathbf{n}' \uparrow\rangle = |\mathbf{n}, \uparrow\rangle \otimes |\mathbf{n}', \uparrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{n}',$$

i.e.,

$$|\Psi(t_0 = 0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos^2(\theta/2) \\ \frac{1}{2} \sin(\theta) \\ \frac{1}{2} \sin(\theta) \\ \sin^2(\theta/2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix}.$$

No caso em que

$$J = 0 \quad (\Rightarrow \zeta = 0),$$

temos, então, a seguinte forma explícita do vetor de estado $\Psi(t)$:

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) \\ v_2(t) \\ v_3(t) \\ v_4(t) \end{pmatrix} = e^{-2i\chi} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \\ \frac{1}{2} \sin \theta \\ \frac{1}{2} \sin \theta \\ e^{i\omega t} \sin^2(\theta/2) \end{pmatrix}.$$

4.1.4 $2J(t) = q(t) \sin \mu$ e $F_-(t) = q(t) \cos \mu$

Estamos agora interessados em estudar o sistema de dois spins interagentes na presença de campos magnéticos externos paralelos descrito pela Hamiltoniana (2.8a),

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} F_+ + J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & F_- - J & 2J & 0 \\ 0 & 2J & -(F_- + J) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -F_+ + J \end{pmatrix},$$

para o caso em que as funções $J(t)$ e $F_-(t)$ sejam linearmente dependentes. Então, sem perda de generalidade,⁵ tais funções podem ser escritas como

$$2J(t) = q(t) \sin \mu, \quad F_-(t) = q(t) \cos \mu, \quad \mu = \text{const}, \quad (4.12)$$

onde $q(t)$ é uma função arbitrária do tempo e μ é uma constante real.

Os coeficientes v_1 e v_4 do vetor de estado (2.6),

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{s=1}^4 v_s(t) |\Theta_s\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) & v_2(t) & v_3(t) & v_4(t) \end{pmatrix}^T,$$

são dados pelas expressões (2.10),

$$\begin{aligned} v_1(t) &= c_1 \exp \left[-\frac{i}{2} \omega(t) \sin \mu \right] \exp \left(-i \int_0^t F_+(\tau) d\tau \right), \\ v_4(t) &= c_4 \exp \left[-\frac{i}{2} \omega(t) \sin \mu \right] \exp \left(+i \int_0^t F_+(\tau) d\tau \right), \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde utilizamos a notação, introduzida em [22],

$$\omega(t) = \int_0^t q(\tau) d\tau, \quad \omega(0) = 0, \quad \dot{\omega}(t) = q(t).$$

Já as componentes restantes, v_2 e v_3 , são dadas pela equação (2.11)

$$\begin{pmatrix} v_2(t) \\ v_3(t) \end{pmatrix} = \exp \left[i \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau \right] \begin{pmatrix} u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix},$$

onde o espinor $\psi(t) = \begin{pmatrix} u_2 & u_3 \end{pmatrix}^T$ satisfaz a equação de spin (2.3)

$$i\partial_t \psi = \hat{h} \psi, \quad \hat{h}(t) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{K}, \quad (4.14)$$

com o campo externo

$$\mathbf{K}(t) = (2J(t), 0, F_-(t)) \stackrel{(4.12)}{=} q(t) (\sin \mu, 0, \cos \mu).$$

O operador de evolução temporal $\hat{\mathcal{U}}(t)$ associado ao vetor de estado

$$\psi(t) = \hat{\mathcal{U}}(t) \psi(0), \quad \hat{\mathcal{U}}(0) = I, \quad (4.15)$$

⁵Pois $J(t) = \frac{1}{2} \tan(\mu) F_-(t)$ e $\text{Im}(\tan \mu) = \mathbb{R}$.

em (4.14), deve obedecer à *equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal* [33]

$$i\partial_t \hat{\mathcal{U}}(t) = \hat{h}(t) \hat{\mathcal{U}}(t). \quad (4.16)$$

Uma vez que a Hamiltoniana $\hat{h}(t) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{K}(t)$ comuta em instantes de tempo diferentes, i.e.,

$$\begin{aligned} [\hat{h}(t), \hat{h}(t')] &= [q(t) A, q(t') A] = 0, \quad \forall t, t', \\ A &:= \sigma_1 \sin \mu + \sigma_3 \cos \mu = \begin{pmatrix} \cos \mu & \sin \mu \\ \sin \mu & -\cos \mu \end{pmatrix}, \quad A^2 = I, \end{aligned}$$

a solução da equação diferencial (4.16) para o operador de evolução unitária $\hat{\mathcal{U}}$ é

$$\hat{\mathcal{U}}(t) = \exp \left(-i \int_0^t \hat{h}(\tau) d\tau \right). \quad (4.17)$$

Logo,

$$\hat{\mathcal{U}}(t) = \exp \left(-iA \int_0^t q(\tau) d\tau \right) = \exp(-iA\omega(t)) \stackrel{(A^2=I)}{=} I \cos \omega(t) - iA \sin \omega(t).$$

e as soluções v_2 e v_3 são, então,

$$\begin{pmatrix} v_2(t) \\ v_3(t) \end{pmatrix} = \exp \left[i \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau \right] \begin{pmatrix} u_2(t) \\ u_3(t) \end{pmatrix} \stackrel{(4.15)}{=} \exp \left[i \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau \right] \hat{\mathcal{U}}(t) \psi(0), \quad \psi(0) \equiv \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Portanto, pelas expressões (4.13) e (4.18), temos que

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) \\ v_2(t) \\ v_3(t) \\ v_4(t) \end{pmatrix} = \exp \left[\frac{i}{2} \omega(t) \sin \mu \right] \begin{pmatrix} c_1 \exp[-i\omega(t) \sin \mu] \exp \left(-i \int_0^t F_+(\tau) d\tau \right) \\ c_2 [\cos \omega(t) - i \sin \omega(t) \cos \mu] - ic_3 \sin \omega(t) \sin \mu \\ -ic_2 \sin \omega(t) \sin \mu + c_3 [\cos \omega(t) + i \sin \omega(t) \cos \mu] \\ c_4 \exp[-i\omega(t) \sin \mu] \exp \left(i \int_0^t F_+(\tau) d\tau \right) \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

O operador de evolução unitária $\hat{U}(t, t_0)$ associado ao vetor de estado

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0) |\Psi_0\rangle, \quad |\Psi_0\rangle = (c_1 \ c_2 \ c_3 \ c_4)^T, \quad \sum_{i=1}^4 |c_i|^2 = 1, \\ i\partial_t |\Psi(t)\rangle &= \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle, \quad |\Psi(t)\rangle = (v_1(t) \ v_2(t) \ v_3(t) \ v_4(t))^T, \end{aligned}$$

tem, portanto, a forma

$$\hat{U}(t) = \exp \left[\frac{i}{2} \omega(t) \sin \mu \right] \begin{pmatrix} U_{11}(t) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_{22}(t) & U_{23}(t) & 0 \\ 0 & U_{32}(t) & U_{33}(t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U_{44}(t) \end{pmatrix},$$

$$U_{11}(t) = \exp[-i\omega(t) \sin \mu] \exp \left(-i \int_0^t F_+(\tau) d\tau \right),$$

$$U_{22}(t) = \cos \omega(t) - i \sin \omega(t) \cos \mu, \quad U_{23}(t) = -i \sin \omega(t) \sin \mu,$$

$$U_{32}(t) = -i \sin \omega(t) \sin \mu, \quad U_{33}(t) = \cos \omega(t) + i \sin \omega(t) \cos \mu,$$

$$U_{44}(t) = \exp[-i\omega(t) \sin \mu] \exp \left(i \int_0^t F_+(\tau) d\tau \right).$$

Figura 4.1: Funções dependentes do tempo q_1 e q_2 .

No Capítulo 5 iremos calcular o emaranhamento desse sistema físico para o caso de duas diferentes funções dependentes do tempo $q(t)$. A primeira destas funções, $q_1(t)$, é representada por uma linha tracejada azul na figura 4.1 e corresponde a uma função monotonicamente crescente, de um dado valor fixo α em $t = 0$ até outro valor fixo β em $t = \infty$. Tal comportamento pode ser realizado analiticamente da seguinte maneira:

$$q_1(t) = \alpha + (\beta - \alpha) \tanh(\nu t), \quad \alpha, \beta, \nu = \text{const}, \quad \beta > \alpha, \quad (4.20a)$$

$$q_1(0) = \alpha, \quad q_1(+\infty) = \beta, \quad \omega_1(t) = \int_0^t q_1(\tau) d\tau = \alpha t + \frac{(\beta - \alpha)}{\nu} \ln \cosh(\nu t). \quad (4.20b)$$

A segunda função $q_2(t)$ é representada por uma linha vermelha na figura 4.1 e corresponde a uma função do tipo *pulso* localizado no tempo. Tal comportamento pode ser realizado analiticamente do seguinte modo:

$$q_2(t) = \frac{r}{\cosh \gamma(t - d)}, \quad r, d, \gamma = \text{const}, \quad (4.21a)$$

$$\omega_2(t) = \frac{2r}{\gamma} \left\{ \arctan \left[\tanh \left(\frac{\gamma d}{2} \right) \right] - \arctan \left[\tanh \left(\frac{\gamma(d - t)}{2} \right) \right] \right\}. \quad (4.21b)$$

Neste caso, $\alpha, \beta, \nu, \gamma, r, d$ são constantes reais.

4.2 Soluções para Sistemas de Três Spins

Completamos nossa lista com duas soluções exatas para sistemas de três partículas obtidas em [8].

4.2.1 Caso simétrico

Considere a Hamiltoniana (2.25) para o caso em que $\mathbf{F}^{(1)} = \mathbf{F}^{(2)} = \mathbf{F}^{(3)} = (0, 0, F(t))$ e $J_{mn} = J(t)$, onde $F(t)$ e $J(t)$ são funções arbitrárias, em geral, dependentes do tempo,

$$\hat{H} = F(t) (\Sigma_z^{(1)} + \Sigma_z^{(2)} + \Sigma_z^{(3)}) + \frac{1}{2} J(t) (\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}).$$

Neste caso, os coeficientes v_i do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ (2.26),

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{i,j,k=\{0,1\}} \vartheta_{ijk}|ijk\rangle = \sum_{s=1}^8 v_s(t) |\Theta_s\rangle = \begin{pmatrix} v_1(t) & v_2(t) & \cdots & v_8(t) \end{pmatrix}^T,$$

são

$$\begin{cases} v_1(t) = c_1 e^{-3i(\tilde{F}+\tilde{J}/3)}, \\ v_2(t) = e^{-i\tilde{F}} \left[c_2 \left(\cos \tilde{J} + \frac{i}{3} \sin \tilde{J} \right) - (c_3 + c_5) \frac{2i}{3} \sin \tilde{J} \right], \\ v_3(t) = e^{-i\tilde{F}} \left[c_3 \left(\cos \tilde{J} + \frac{i}{3} \sin \tilde{J} \right) - (c_2 + c_5) \frac{2i}{3} \sin \tilde{J} \right], \\ v_4(t) = e^{i\tilde{F}} \left[c_4 \left(\cos \tilde{J} + \frac{i}{3} \sin \tilde{J} \right) - (c_6 + c_7) \frac{2i}{3} \sin \tilde{J} \right], \\ v_5(t) = e^{-i\tilde{F}} \left[c_5 \left(\cos \tilde{J} + \frac{i}{3} \sin \tilde{J} \right) - (c_2 + c_3) \frac{2i}{3} \sin \tilde{J} \right], \\ v_6(t) = e^{i\tilde{F}} \left[c_6 \left(\cos \tilde{J} + \frac{i}{3} \sin \tilde{J} \right) - (c_4 + c_7) \frac{2i}{3} \sin \tilde{J} \right], \\ v_7(t) = e^{i\tilde{F}} \left[c_7 \left(\cos \tilde{J} + \frac{i}{3} \sin \tilde{J} \right) - (c_4 + c_6) \frac{2i}{3} \sin \tilde{J} \right], \\ v_8(t) = c_8 e^{3i(\tilde{F}-\tilde{J}/3)}, \end{cases}$$

onde definimos

$$\tilde{J}(t) \equiv \frac{3}{2} \int_{t_0}^t J(\tau) d\tau, \quad \tilde{F}(t) \equiv \int_{t_0}^t F(\tau) d\tau,$$

$$|\Psi_0\rangle \equiv |\Psi(t=t_0)\rangle := \begin{pmatrix} c_1 & c_2 & \cdots & c_8 \end{pmatrix}^T, \quad \sum_{i=1}^8 |c_i|^2 = 1.$$

4.2.2 Três spins em um campo magnético girante

$$\mathbf{F}^{(1)} = \mathbf{F}^{(2)} = \mathbf{F}^{(3)} = (A \cos \omega t, A \sin \omega t, A_0), \quad J = J(t) :$$

Considere o sistema de três spins (2.25) para o caso em que as partículas estão imersas em um campo externo girante

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= (A \cos \omega t, A \sin \omega t, A_0), \\ \mathbf{F}(t) &= \mu_B \mathbf{B}(t), \end{aligned}$$

onde A , A_0 e ω são constantes reais. Consequentemente, a Hamiltoniana neste caso toma a forma

$$\hat{H}(t) = \mathbf{F} \cdot (\boldsymbol{\Sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\Sigma}^{(2)} + \boldsymbol{\Sigma}^{(3)}) + \frac{1}{2} J(t) (\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}).$$

A obtenção da solução do correspondente problema quântico segue, *mutatis mutandis*, o mesmo roteiro para o cálculo da solução do problema análogo de dois spins imersos num campo magnético girante abordado na seção 4.1.3. O operador de evolução unitária nesse caso é

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

em que

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

onde $\mathbf{I}$ é a matriz identidade 8×8 e

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_z(\omega t) &= \hat{r}_z \otimes \hat{r}_z \otimes \hat{r}_z, \quad \hat{r}_z := \exp \left(\frac{-i\omega t}{2} \sigma_z \right), \\
\mathcal{R}_y(\theta) &= \hat{r}_y \otimes \hat{r}_y \otimes \hat{r}_y, \quad \hat{r}_y := \exp \left(\frac{-i\theta}{2} \sigma_2 \right).
\end{aligned}$$

Possíveis aplicações para sistemas de três spins interagentes sujeitos a campos magnéticos externos incluem a implementação de algoritmos quânticos de correção de erros [4, 8]. Alguns outros sistemas de três qubits de interesse físico são, e.g., o estado GHZ [34], $|GHZ\rangle = (1/\sqrt{2}) (|000\rangle + |111\rangle)$, e o estado W [35, 25, 36], $|W\rangle = (1/\sqrt{3}) (|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle)$.

Capítulo 5

Emaranhamento em Sistemas de 2 Qubits

Considere-se um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ de dimensão finita construído a partir do produto tensorial dos subespaços (também de dimensão finita) $\mathcal{H}_k$, $k = 1, \dots, n$, ou seja, $\mathcal{H} = \bigotimes_{k=1}^n \mathcal{H}_k = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$ com $\dim \mathcal{H} = \prod_{k=1}^n (\dim \mathcal{H}_k) < \infty$.

Um dos postulados da Mecânica Quântica nos diz que associa-se a cada sistema físico isolado um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, conhecido como o espaço de estados do sistema. O sistema é completamente descrito por seu vetor de estado $|\psi\rangle$, que é um vetor unitário no espaço de estados do sistema.

Um sistema físico descrito pelo vetor de estado¹ $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ é *não-emaranhado* se, e somente se, for possível escrever $|\psi\rangle$ como sendo o produto de estados

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle,$$

onde $|\psi_k\rangle \in \mathcal{H}_k$, $k = 1, \dots, n$. Porém, a despeito da razoavelmente simples definição de *emaranhamento*, nem sempre é uma tarefa fácil decidir se um sistema quântico está num estado emaranhado ou não². Além disso, no caso de estados emaranhados, é desejável saber o quão emaranhado este sistema está. Esta tarefa pode ser realizada com o auxílio das assim chamadas *medidas de emaranhamento*. Usualmente, para realizar tais tarefas se faz conveniente o uso dos formalismos relativos ao *operador densidade* e ao *traço parcial*, que são ferramentas muito úteis no estudo de sistemas quânticos compostos.

No caso geral, a medida de emaranhamento de um determinado estado³ $\hat{\rho}$ (onde $\hat{\rho}$ é o operador estatístico do sistema sob consideração) é qualquer função $E(\rho) \in \mathbb{R}_+$ de $\hat{\rho}$. Para estados separáveis (não-emaranhados por definição) $E(\rho) = 0$ e, além disso, a função atinge seu valor máximo no caso de estados maximamente emaranhados. Para sistemas de dois qubits $\max E(\rho) = 1$ *ebit*.

Existem muitas propostas para medidas de emaranhamento para diferentes fins. No caso dos estados puros de um *sistema bipartido*, uma escolha conveniente quando se deseja quantificar os recursos físicos necessários para armazenar e transmitir informação é a *entropia de emaranhamento*. No que se segue, iremos utilizar a medida de emaranhamento proposta por Bennett [24, 6],

$$\begin{aligned} E(\rho) &= S(\rho^{(A)}) = S(\rho^{(B)}), \\ S(\rho^{(A)}) &= -\text{tr}(\hat{\rho}^{(A)} \log \hat{\rho}^{(A)}), \quad S(\rho^{(B)}) = -\text{tr}(\hat{\rho}^{(B)} \log \hat{\rho}^{(B)}), \end{aligned} \quad (5.1)$$

¹Neste estudo, consideramos apenas *estados puros*. Uma abordagem mais geral deve incluir também os *estados mistos*.

²Experimentalmente (e teoricamente), existe a possibilidade de decidir se um estado quântico (de um sistema composto) está em um estado emaranhado verificando-se a respectiva possível violação da desigualdade de Bell, o que é feito medindo-se correlações entre os estados dos constituintes do sistema quântico composto.

³Lembrando que diferentes *ensembles* de estados quânticos podem dar origem ao mesmo operador densidade $\hat{\rho}$.

onde os logaritmos nas expressões acima são tomados na base dois. Além do mais, $S(\rho^{A,B})$ são entropias de von Neumann dos operadores estatísticos reduzidos $\hat{\rho}^{(A)}$ e $\hat{\rho}^{(B)}$ respectivamente. Para encontrarmos os operadores reduzidos $\hat{\rho}^{(A)}$ e $\hat{\rho}^{(B)}$ devemos calcular os traços sobre os subsistemas B ou A respectivamente,

$$\hat{\rho}^{(A)} = \text{tr}_B \hat{\rho}, \quad \hat{\rho}^{(B)} = \text{tr}_A \hat{\rho}. \quad (5.2)$$

Consideremos um estado puro geral $|\Psi(t)\rangle = \sum_{r=1}^4 v_r(t) |\Theta_r\rangle$ de dois spins (2.6). Seu operador estatístico é, então,

$$\hat{\rho}(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| = \sum_{r,s=1}^4 v_r(t) v_s^*(t) |\Theta_r\rangle \langle \Theta_s|.$$

De acordo com a equação (5.2), obtemos

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(A)} &= {}_B \langle 0 | \hat{\rho} | 0 \rangle_B + {}_B \langle 1 | \hat{\rho} | 1 \rangle_B = \begin{pmatrix} \rho_{11}^{(A)} & \rho_{12}^{(A)} \\ \rho_{21}^{(A)} & \rho_{22}^{(A)} \end{pmatrix}, \\ \rho_{11}^{(A)} &= |v_1(t)|^2 + |v_2(t)|^2, \quad \rho_{12}^{(A)} = v_1(t) v_3^*(t) + v_2(t) v_4^*(t), \\ \rho_{21}^{(A)} &= v_1^*(t) v_3(t) + v_2^*(t) v_4(t), \quad \rho_{22}^{(A)} = |v_3(t)|^2 + |v_4(t)|^2. \end{aligned}$$

Para se calcular a medida de emaranhamento (5.1), é suficiente encontrar os autovalores λ_a da matriz $\hat{\rho}^{(A)}$,

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(A)} P_j &= \lambda_j P_j, \quad j = 1, 2; \\ \lambda_j &= \frac{1}{2} \left[\rho_{11}^{(A)} + \rho_{22}^{(A)} + (-1)^j y \right], \quad P_j = \left(\frac{\rho_{11}^{(A)} - \rho_{22}^{(A)} + (-1)^j y}{2\rho_{21}^{(A)}}, 1 \right)^T, \\ y &= \sqrt{\left(\rho_{11}^{(A)} - \rho_{22}^{(A)} \right)^2 + 4 \left| \rho_{12}^{(A)} \right|^2} = \sqrt{(|v_1|^2 + |v_2|^2 - |v_3|^2 - |v_4|^2)^2 + 4 |v_1 v_3^* + v_2 v_4^*|^2}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

De fato, uma simples verificação nos dá $\text{tr} \hat{\rho}^{(A)} = \rho_{11}^{(A)} + \rho_{22}^{(A)} = \lambda_1 + \lambda_2 = 1$ para vetores de estado normalizados.

Agora, considere uma transformação de similaridade V que diagonaliza $\hat{\rho}^{(A)}$, i.e., $\hat{\rho}_{\text{diag}}^{(A)} = V^{-1} \hat{\rho}^{(A)} V$. A partir da propriedade cíclica do traço, $\text{tr}(M_1 M_2) = \text{tr}(M_2 M_1)$, é possível inferir que

$$\begin{aligned} E(\Psi(t)) &= -\text{tr} \left(\hat{\rho}^{(A)} \log_2 \hat{\rho}^{(A)} \right) = -\text{tr} \left[\hat{\rho}^{(A)} \log_2 \left(V \hat{\rho}_{\text{diag}}^{(A)} V^{-1} \right) \right] = -\text{tr} \left(\underbrace{\hat{\rho}^{(A)} V}_{M_1} \log_2 \underbrace{\left(\hat{\rho}_{\text{diag}}^{(A)} \right) V^{-1}}_{M_2} \right) \\ &= -\text{tr} \left(\log_2 \left(\hat{\rho}_{\text{diag}}^{(A)} \right) V^{-1} \hat{\rho}^{(A)} V \right) = -\text{tr} \left(\hat{\rho}_{\text{diag}}^{(A)} \log_2 \hat{\rho}_{\text{diag}}^{(A)} \right) = - \sum_{a=1,2} \lambda_a \log_2 \lambda_a, \end{aligned}$$

e finalmente obtemos

$$E(\Psi(t)) \stackrel{(5.3)}{=} 1 - \frac{1}{2} [(1+y) \log_2(1+y) + (1-y) \log_2(1-y)], \quad (5.4)$$

ou, de forma semelhante à *entropia binária* utilizada em teoria clássica da informação,

$$E(\Psi(t)) = -z \log_2 z - (1-z) \log_2(1-z), \quad z := \frac{1+y}{2}.$$

Por convenção, vamos adotar a definição⁴ $0 \log_2 0 \equiv 0$ (vide [4]).

Para ilustrar a parametrização oferecida pela medida de emaranhamento (5.4), consideramos os seguintes exemplos:

1. Estados maximamente emaranhados (perfeitas correlações e anti-correlações no experimento EPR)

$$\frac{|00\rangle \mp |11\rangle}{\sqrt{2}} \text{ or } \frac{|01\rangle \mp |10\rangle}{\sqrt{2}} \Rightarrow E = 1 \text{ ebit}$$

2. Estados parcialmente emaranhados

$$\frac{|00\rangle + |01\rangle + |11\rangle}{\sqrt{3}} \Rightarrow E \simeq 0,54 < 1$$

$$\cos \theta |01\rangle - \sin \theta |10\rangle \quad \left(\theta \neq \pm \frac{n\pi}{4} \right) \Rightarrow 0 < E < 1$$

3. Estados separáveis (ou estados produto)

$$\Psi = \psi_A \otimes \psi_B = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \end{pmatrix} \Rightarrow E = 0$$

$$\text{desde que } \sum_{i=1}^4 |v_i|^2 = (|z_1|^2 + |z_2|^2) (|\omega_1|^2 + |\omega_2|^2) = 1.$$

5.1 Funções $J(t)$ e $F_-(t)$ linearmente dependentes

Apresentaremos, a seguir, o comportamento dinâmico do emaranhamento do estado de dois spins construído na seção 4.1.4, na qual as funções $J(t)$ e $F_-(t)$ têm a forma

$$2J(t) = q(t) \sin \mu, \quad F_-(t) = q(t) \cos \mu.$$

Isto é, calculamos a evolução temporal da medida de emaranhamento $E(\Psi(t))$ (5.4) para o estado de dois spins $\Psi(t)$ (4.19), para funções $q(t) = q_1(t)$ ou $q_2(t)$, (4.20a) e (4.21a), respectivamente. Em todos os cálculos foram utilizados os parâmetros

$$\alpha = \nu = r = d = 1, \quad \beta = 3 \quad \text{e} \quad \gamma = 7 \quad \text{em} \quad \omega_{1,2}.$$

Para os **Casos 1, 2 e 3** listados a seguir, vamos tomar como estado inicial,

$$|\Psi_0\rangle = \begin{pmatrix} c_1 & c_2 & c_3 & c_4 \end{pmatrix}^T,$$

três dos estados separáveis (não-emaranhados portanto) da base computacional (2.5). Vamos, assim, considerar os estados de spins paralelos

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T, \\ |\downarrow\downarrow\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T, \end{aligned} \tag{5.5}$$

⁴Apesar da existência do limite $\lim_{x \rightarrow 0^+} (x \log_2 x) = 0$, a definição $0 \log_2 0 \equiv 0$ ainda se faz necessária já que, evidentemente, zero não faz parte do domínio da função logarítmica.

e um estado de spins antiparalelos

$$|\uparrow\downarrow\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T. \quad (5.6)$$

Já para os **Casos 4, 5 e 6** vamos considerar, como estados iniciais, certos estados de spins com uma *inclinação* entre si. Isto é, vamos escolher Ψ_0 como sendo os vetores de estados separáveis (2.24a), (2.24b) e (2.24c),

$$|\mathbf{n} \uparrow, \mathbf{n}' \uparrow\rangle = |\mathbf{n}, \uparrow\rangle \otimes |\mathbf{n}', \uparrow\rangle, \quad |\mathbf{n} \uparrow, \mathbf{n}' \downarrow\rangle = |\mathbf{n}, \uparrow\rangle \otimes |\mathbf{n}', \downarrow\rangle, \quad |\mathbf{n} \downarrow, \mathbf{n}' \downarrow\rangle = |\mathbf{n}, \downarrow\rangle \otimes |\mathbf{n}', \downarrow\rangle,$$

onde, neste caso,

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 1) = \widehat{\mathbf{k}},$$

e $\mathbf{n}' = (n'_1, n'_2, n'_3)$ é qualquer vetor unitário (2.22),

$$\mathbf{n}' = \sin \theta' \cos \varphi' \widehat{\mathbf{i}} + \sin \theta' \sin \varphi' \widehat{\mathbf{j}} + \cos \theta' \widehat{\mathbf{k}},$$

tal que⁵ $\theta' = \pi/4$ (sendo, portanto, independente de φ'). Isto é, como estado inicial Ψ_0 para esses casos vamos considerar os estados separáveis

$$\begin{aligned} \Psi_0 &= \{|\mathbf{n} \uparrow, \mathbf{n}' \downarrow\rangle, |\mathbf{n} \uparrow, \mathbf{n}' \uparrow\rangle \text{ ou } |\mathbf{n} \downarrow, \mathbf{n}' \downarrow\rangle\}, \\ \mathbf{n} &= \widehat{\mathbf{k}}, \quad \mathbf{n}' = \mathbf{n}' (\theta' = \pi/4). \end{aligned} \quad (5.7)$$

5.1.1 Dois spins colineares aos campos magnéticos

1(a) $\mu = 0, q = q_1(t)$

Neste caso, em que

$$F_-(t) = q_1(t), \quad J(t) = 0,$$

a medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para $\Psi_0 = \{|\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle \text{ ou } |\downarrow\downarrow\rangle\}$ é nula.

1(b) $\mu = 0, q = q_2(t)$

Neste caso, em que

$$F_-(t) = q_2(t), \quad J(t) = 0,$$

a medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para $\Psi_0 = \{|\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle \text{ ou } |\downarrow\downarrow\rangle\}$ é nula⁶.

2(a) $\mu = \frac{\pi}{2}, q = q_1(t)$

Neste caso, em que

$$F_-(t) = 0, \quad J(t) = \frac{q_1(t)}{2},$$

o comportamento da medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para $\Psi_0 = \{|\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle \text{ ou } |\downarrow\downarrow\rangle\}$ em função do tempo é apresentado na Fig. 5.1(a).

2(b) $\mu = \frac{\pi}{2}, q = q_2(t)$

Neste caso, em que

$$F_-(t) = 0, \quad J(t) = \frac{q_2(t)}{2},$$

o comportamento da medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para $\Psi_0 = \{|\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle \text{ ou } |\downarrow\downarrow\rangle\}$ em função do tempo é apresentado na Fig. 5.1(b).

⁵Um exemplo particular é, evidentemente, $\mathbf{n}' = (n'_1, n'_2, n'_3) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 0, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\widehat{\mathbf{i}} + \widehat{\mathbf{k}})$.

⁶De fato, uma pequena generalização em relação aos casos 1(a) e 1(b) é que suas medidas de emaranhamento são nulas para qualquer que seja a função $q(t)$, desde que o estado inicial Ψ_0 seja, e.g., $|\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\downarrow\rangle$.

Figura 5.1: Medidas de emaranhamento no caso 2 ($\mu = \frac{\pi}{2}$) como uma função do tempo. (a) $J = \frac{q_1}{2}$, $F_-(t) = 0$, (b) $J = \frac{q_2}{2}$, $F_-(t) = 0$.

3(a) $\mu = \frac{\pi}{4}$, $q = q_1(t)$
Neste caso, em que

$$F_-(t) = \frac{q_1(t)}{\sqrt{2}}, \quad J(t) = \frac{q_1(t)}{2\sqrt{2}},$$

o comportamento da medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para $\Psi_0 = \{|\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle \text{ ou } |\downarrow\downarrow\rangle\}$ em função do tempo é apresentado na Fig. 5.2(a).

3(b) $\mu = \frac{\pi}{4}$, $q = q_2(t)$
Neste caso, em que

$$F_-(t) = \frac{q_2(t)}{\sqrt{2}}, \quad J(t) = \frac{q_2(t)}{2\sqrt{2}},$$

o comportamento da medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para $\Psi_0 = \{|\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle \text{ ou } |\downarrow\downarrow\rangle\}$ em função do tempo é apresentado na Fig. 5.2(b).

5.1.2 Spins não-colineares

4(a) $\mu = 0$, $q = q_1(t)$
Neste caso, em que

$$F_-(t) = q_1(t), \quad J(t) = 0,$$

a medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para os três diferentes estados iniciais Ψ_0 (5.7) é nula.

4(b) $\mu = 0$, $q = q_2(t)$
Neste caso, em que

$$F_-(t) = q_2(t), \quad J(t) = 0,$$

a medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para os três diferentes estados iniciais Ψ_0 (5.7) é nula.

5(a) $\mu = \frac{\pi}{2}$, $q = q_1(t)$

Figura 5.2: Medidas de emaranhamento no caso 3 ($\mu = \frac{\pi}{4}$) como uma função do tempo. (a) $J = \frac{q_1}{2\sqrt{2}}$, $F_- = \frac{q_1}{\sqrt{2}}$, (b) $J = \frac{q_2}{2\sqrt{2}}$, $F_- = \frac{q_2}{\sqrt{2}}$.

Neste caso, em que

$$F_-(t) = 0, \quad J(t) = \frac{q_1(t)}{2},$$

o comportamento da medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para os três diferentes estados iniciais Ψ_0 (5.7) em função do tempo é apresentado na Fig. 5.3(a).

5(b) $\mu = \frac{\pi}{2}$, $q = q_2(t)$

Neste caso, em que

$$F_-(t) = 0, \quad J(t) = \frac{q_2(t)}{2},$$

o comportamento da medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para os três diferentes estados iniciais Ψ_0 (5.7) em função do tempo é apresentado na Fig. 5.3(b).

6(a) $\mu = \frac{\pi}{4}$, $q = q_1(t)$

Neste caso, em que

$$F_-(t) = \frac{q_1(t)}{\sqrt{2}}, \quad J(t) = \frac{q_1(t)}{2\sqrt{2}},$$

o comportamento da medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para os três diferentes estados iniciais Ψ_0 (5.7) em função do tempo é apresentado na Fig. 5.4(a).

6(b) $\mu = \frac{\pi}{4}$, $q = q_2(t)$

Neste caso, em que

$$F_-(t) = \frac{q_2(t)}{\sqrt{2}}, \quad J(t) = \frac{q_2(t)}{2\sqrt{2}},$$

o comportamento da medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ (4.19) para os três diferentes estados iniciais Ψ_0 (5.7) em função do tempo é apresentado na Fig. 5.4(b).

5.2 $F_- = 2\varepsilon$ e $2J(t) = bt + c$

Apresentamos agora a dependência temporal da medida de emaranhamento $E(\Psi(t))$ para um caso em que a função de interação de Heisenberg entre dois spins cresce linearmente no tempo. Con-

Figura 5.3: Medidas de emaranhamento no caso 5 ($\mu = \frac{\pi}{2}$, $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$, $\mathbf{n}'$ é tal que $\theta' = \pi/4$) como uma função do tempo. (a) $J = \frac{q_1}{2}$, $F_-(t) = 0$, (b) $J = \frac{q_2}{2}$, $F_-(t) = 0$.

Figura 5.4: Medidas de emaranhamento no caso 6 ($\mu = \frac{\pi}{4}$, $\mathbf{n} = \hat{\mathbf{k}}$, $\mathbf{n}' = \mathbf{n}'$ ($\theta' = \pi/4$)) como uma função do tempo. (a) $J = \frac{q_1}{2\sqrt{2}}$, $F_- = \frac{q_1}{\sqrt{2}}$, (b) $J = \frac{q_2}{2\sqrt{2}}$, $F_- = \frac{q_2}{\sqrt{2}}$.

Figura 5.5: Medidas de emaranhamento no caso $J(t) = (bt + c)/2$ e $F_- = 2\varepsilon = \text{const.}$

sidere, para tanto, a Hamiltoniana (2.8a), introduzida na seção *Campos magnéticos externos paralelos* (2.2.1), para o caso em que

$$\begin{aligned} F_- = 2\varepsilon = \text{const}, \quad 2J(t) = f(t), \\ f(t) = bt + c, \quad 2\varepsilon = b = c = 1.4. \end{aligned}$$

A solução $\Psi(t)$ do correspondente problema quântico é dada pelas expressões (4.3) e (4.4). Além disso, como estado inicial Ψ_0 vamos considerar os estados separáveis de spins paralelos e antiparalelos (5.5) e (5.6), respectivamente.

Assim como nos casos 2 e 3 da seção anterior, a medida de emaranhamento do estado $\Psi(t)$ neste caso é nula quando consideramos os estados iniciais de spins paralelos ($|\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle$) e diferente de zero (para $t > 0$) quando consideramos o estado inicial de spins antiparalelos $|\uparrow\downarrow\rangle$. Tais medidas são mostradas na Fig. 5.5.

Capítulo 6

Comentários Finais

Em relação à evolução temporal das medidas de emaranhamento apresentadas, a primeira conclusão que pode ser obtida está relacionada aos casos 1(a), 1(b) e 4(a), 4(b) e é a seguinte: spins não-interagentes, colineares ou não ao campo magnético, não são emaranhados pelo campo magnético. Na presença de uma interação dependente do tempo, a influência do campo magnético externo na medida de emaranhamento é significativamente menor do que a influência da interação entre os spins. Ambos os tipos de interações J que foram consideradas, $q_1(t)$ e $q_2(t)$, explicitamente causam emaranhamento no sistema de spins. O primeiro tipo de dependência temporal, que corresponde à linha tracejada azul na figura 4.1, produz um emaranhamento periódico que atinge seu possível máximo em alguns instantes de tempo que dependem dos parâmetros da função $q_1(t)$, e então produz estados separáveis quase periodicamente, vide figuras 2(a) e 3(a). O segundo tipo de dependência temporal, $q_2(t)$, que corresponde a um pulso restrito no tempo, produz um emaranhamento monotonicamente crescente no tempo, Fig. 2(b), e qualitativamente corresponde ao resultado da ação inicial (no intervalo de tempo $(0 - 0,5)$ na Fig. 2(a)) da interação $q_1(t)$. Nos casos 3(a) e 3(b), temos, diferentemente dos casos 2(a) e 2(b) (nos quais $F^{(1)}(t) = F^{(2)}(t)$), campos magnéticos externos com uma diferença dependente do tempo. Considerando os casos 4(a)–6(b), demonstramos que uma inclinação entre os spins altera essencialmente a *magnitude* da entropia de emaranhamento em relação aos casos 1(a)–3(b). No entanto, o emaranhamento depende somente do ângulo θ' entre os spins e não depende do ângulo φ' , como é de se esperar, devido à simetria azimutal do sistema físico. Em particular, tornou-se claro que qualquer par de spins interagentes não-colinares ao campo magnético são emaranhados na presença de interações dependentes do tempo.

Apêndice A

Transformações Unitárias e Simetrias

Algumas transformações úteis na resolução de uma classe de equações de um spin são apresentadas a seguir.

Corolário Se φ é uma solução da equação de Schrödinger (ou equação de spin)

$$i\hbar\partial_t\varphi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}) \varphi$$

com o campo externo $\mathbf{F} = (g(t), 0, f(t))$, então ψ é uma solução da equação de spin

$$i\hbar\partial_t\psi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{G}) \psi \tag{A.1}$$

com o campo externo $\mathbf{G} = (f(t), 0, g(t))$, pela transformação

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_1 + \sigma_3) \varphi . \tag{A.2}$$

ou, equivalentemente¹,

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_1 + \sigma_3) \psi .$$

Prova. Substituindo (A.2) na equação (A.1), nós temos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_1 + \sigma_3) \varphi \right] = [f(t)\sigma_1 + g(t)\sigma_3] \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_1 + \sigma_3) \varphi.$$

Então

$$i\hbar(\sigma_1 + \sigma_3) \dot{\varphi} = [f(t)\sigma_1 + g(t)\sigma_3] (\sigma_1 + \sigma_3) \varphi,$$

e

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\varphi} &= (\sigma_1 + \sigma_3)^{-1} [f(t)\sigma_1 + g(t)\sigma_3] (\sigma_1 + \sigma_3) \varphi \\ &= \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_3) [f(t)\sigma_1 + g(t)\sigma_3] (\sigma_1 + \sigma_3) \varphi. \end{aligned}$$

Agora, pela forma explícita das matrizes de Pauli, segue que

$$\frac{1}{2} f(t) (\sigma_1 + \sigma_3) \sigma_1 (\sigma_1 + \sigma_3) = f(t) \sigma_3,$$

¹Pois $T^2 = I$, onde $T = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_1 + \sigma_3)$.

$$\frac{1}{2}g(t)(\sigma_1 + \sigma_3)\sigma_3(\sigma_1 + \sigma_3) = g(t)\sigma_1,$$

e, conseqüentemente,

$$i\hbar\dot{\varphi} = [g(t)\sigma_1 + f(t)\sigma_3]\varphi = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F})\varphi,$$

quod erat demonstrandum. ■

Outras transformações possíveis são, vide [22],

$$\mathbf{F} = (g(t), 0, f(t)),$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= (g(t), f(t), 0) & \psi &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i\sigma_1)\varphi, \\ \mathbf{G} &= (g(t), 0, -f(t)) & \psi &= \sigma_1\varphi, \\ \mathbf{G} &= (-g(t), 0, f(t)) & \psi &= \sigma_3\varphi, \\ \mathbf{G} &= (-g(t), 0, -f(t)) & \psi &= \sigma_2\varphi, \\ \mathbf{G} &= (f(t), 0, g(t)) & \psi &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1 + \sigma_3)\varphi. \end{aligned}$$

Apêndice B

Função Cilíndrica Parabólica

A equação diferencial cilíndrica parabólica é a equação diferencial linear ordinária de segunda ordem

$$\frac{d^2 y}{dz^2} + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{1}{4} z^2 \right) y = 0, \quad (\text{B.1})$$

cujas soluções gerais são dadas por

$$y = \mathcal{C}_1 D_\nu(z) + \mathcal{C}_2 D_{-\nu-1}(iz), \quad (\text{B.2})$$

onde $D_\nu(z)$ é a função cilíndrica parabólica (vide [28]) e $\mathcal{C}_{1,2}$ são constantes complexas arbitrárias.

As funções parabólicas cilíndricas D_ν satisfazem as úteis relações de recorrência

$$D_{\nu+1}(z) - z D_\nu(z) + \nu D_{\nu-1}(z) = 0, \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{d}{dz} D_\nu(z) + \frac{1}{2} z D_\nu(z) - \nu D_{\nu-1}(z) = 0. \quad (\text{B.4})$$

B.1 Cálculo auxiliar

Considere as equações acopladas

$$\begin{aligned} (i-1) \sqrt{b} \frac{du_2}{dz} &= \frac{\sqrt{b} z}{1+i} u_2 + (2\varepsilon) u_3, \\ (i-1) \sqrt{b} \frac{du_3}{dz} &= (2\varepsilon) u_2 - \frac{\sqrt{b} z}{1+i} u_3. \end{aligned}$$

A primeira delas implica em

$$u_3 = \frac{-1}{(2\varepsilon)} \frac{\sqrt{b} z}{1+i} u_2 + \frac{(i-1)}{(2\varepsilon)} \sqrt{b} \frac{du_2}{dz}. \quad (\text{B.5})$$

Substituindo a solução geral para u_2 ,

$$u_2 = k_1 D_\mu(z) + k_2 D_{-\mu-1}(iz),$$

em (B.5) obtemos u_3 . Precisamos, então, calcular a derivada $\frac{du_2}{dz}$:

$$\frac{du_2}{dz} = \frac{d}{dz} [k_1 D_\mu(z) + k_2 D_{-\mu-1}(iz)].$$

Temos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} D_{-\mu-1} \overbrace{(iz)}^{=\alpha} &= \frac{d\alpha}{dz} \frac{d[D_{-\mu-1}(\alpha)]}{d\alpha} = i \left[\frac{1}{2} \alpha D_{-\mu-1}(\alpha) - D_{-\mu}(\alpha) \right] \\ &= i \left[\frac{1}{2} iz D_{-\mu-1}(iz) - D_{-\mu}(iz) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \frac{du_2}{dz} &= k_1 \frac{d}{dz} D_{\mu}(z) + k_2 \frac{d}{dz} D_{-\mu-1}(iz), \\ \frac{du_2}{dz} &\stackrel{(B.4+B.6)}{=} k_1 \left(-\frac{1}{2} z D_{\mu}(z) + \mu D_{\mu-1}(z) \right) + k_2 \left(-\frac{1}{2} z D_{-\mu-1}(iz) - i D_{-\mu}(iz) \right). \end{aligned}$$

Agora, (B.5) implica

$$\begin{aligned} u_3 &= \frac{-1}{(2\varepsilon)} \frac{\sqrt{b}z}{1+i} [k_1 D_{\mu}(z) + k_2 D_{-\mu-1}(iz)] + \\ &+ \frac{(i-1)}{(2\varepsilon)} \sqrt{b} \left[k_1 \left(-\frac{1}{2} z D_{\mu}(z) + \mu D_{\mu-1}(z) \right) + k_2 \left(-\frac{1}{2} z D_{-\mu-1}(iz) - i D_{-\mu}(iz) \right) \right], \\ u_3 &= k_1 \left[\frac{-1}{(2\varepsilon)} \frac{\sqrt{b}z}{1+i} D_{\mu}(z) + \frac{(i-1)}{(2\varepsilon)} \sqrt{b} \left(-\frac{1}{2} z D_{\mu}(z) + \mu D_{\mu-1}(z) \right) \right] + \\ &+ k_2 \left[\frac{-1}{(2\varepsilon)} \frac{\sqrt{b}z}{1+i} D_{-\mu-1}(iz) + \frac{(i-1)}{(2\varepsilon)} \sqrt{b} \left(-\frac{1}{2} z D_{-\mu-1}(iz) - i D_{-\mu}(iz) \right) \right], \\ u_3 &= k_1 \left[\underbrace{\frac{-1}{(2\varepsilon)} \frac{\sqrt{b}z}{1+i} D_{\mu}(z) + \frac{(i-1)}{(2\varepsilon)} \sqrt{b} \left(-\frac{1}{2} z D_{\mu}(z) \right)}_{=0} + \frac{(i-1)}{(2\varepsilon)} \sqrt{b} \mu D_{\mu-1}(z) \right] + \\ &+ k_2 \left[\underbrace{\frac{-1}{(2\varepsilon)} \frac{\sqrt{b}z}{1+i} D_{-\mu-1}(iz) + \frac{(i-1)}{(2\varepsilon)} \sqrt{b} \left(-\frac{1}{2} z D_{-\mu-1}(iz) \right)}_{=0} + \frac{(i-1)}{(2\varepsilon)} \sqrt{b} (-i D_{-\mu}(iz)) \right], \end{aligned}$$

e, então,

$$u_3 = k_1 \frac{(1+i)(2\varepsilon)}{2\sqrt{b}} D_{\mu-1}(z) + k_2 \frac{(1+i)\sqrt{b}}{(2\varepsilon)} D_{-\mu}(iz),$$

como esperávamos demonstrar.

Apêndice C

Funções de Whittaker

As funções de Whittaker surgem como soluções para a *equação diferencial de Whittaker*

$$\frac{d^2 W}{dz^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{z} + \frac{\frac{1}{4} - \mu^2}{z^2} \right) W = 0 . \quad (\text{C.1})$$

A equação (C.1) tem as seguintes duas soluções linearmente independentes $M_{\lambda,\mu}(z)$ e $M_{\lambda,-\mu}(z)$:

$$M_{\lambda,\mu}(z) = z^{\mu+1/2} e^{-z/2} \Phi \left(\frac{1}{2} + \mu - \lambda, 1 + 2\mu; z \right) , \quad (\text{C.2})$$

$$M_{\lambda,-\mu}(z) = z^{-\mu+1/2} e^{-z/2} \Phi \left(\frac{1}{2} - \mu - \lambda, 1 - 2\mu; z \right) , \quad (\text{C.3})$$

onde $\Phi(\alpha, \gamma; z)$ é a função hipergeométrica degenerada [28].

Além disso, são satisfeitas as seguintes relações de recorrência

$$z \frac{d}{dz} M_{\lambda,\mu}(z) = \left(\frac{1}{2} z - \lambda \right) M_{\lambda,\mu}(z) + \left(\frac{1}{2} + \mu + \lambda \right) M_{\lambda+1,\mu}(z) , \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} 2\mu M_{\lambda-\frac{1}{2},\mu-\frac{1}{2}}(z) - z^{1/2} M_{\lambda,\mu}(z) &= 2\mu M_{\lambda+\frac{1}{2},\mu-\frac{1}{2}}(z) , \\ (1 + 2\mu + 2\lambda) M_{\lambda+1,\mu}(z) - (1 + 2\mu - 2\lambda) M_{\lambda-1,\mu}(z) &= 2(2\lambda - z) M_{\lambda,\mu}(z) . \end{aligned}$$

Apêndice D

O Operador Densidade

Considerando-se uma coleção de estados $\{|\psi_j\rangle\}$, suponha que um sistema físico esteja em um dos estados $|\psi_j\rangle$, com respectiva probabilidade p_j . Ao conjunto

$$\{p_j, |\psi_j\rangle\}$$

dá-se o nome *ensemble* de estados puros. O operador densidade para o sistema é, então, definido pela expressão

$$\rho \equiv \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|,$$

onde os números p_j devem satisfazer $\sum_j p_j = 1$ e $p_j \geq 0$.

Supondo, agora, que o sistema esteja inicialmente no estado $|\psi_j\rangle$ com probabilidade p_j . Depois de uma evolução unitária U ,

$$|\psi_j\rangle \longrightarrow U |\psi_j\rangle,$$

segue

$$\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \xrightarrow{U} \sum_j p_j U |\psi_j\rangle \langle \psi_j| U^\dagger = U \left(\sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \right) U^\dagger = U \rho U^\dagger.$$

Propriedades características do operador densidade são:

$$\begin{cases} \text{tr}(\rho) = 1, \\ \rho \text{ é um operador positivo.} \end{cases}$$

Demonstração:

$$\text{tr}(\rho) = \text{tr} \left(\sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \right) = \sum_j p_j \underbrace{\text{tr}(|\psi_j\rangle \langle \psi_j|)}_{=1} = \sum_j p_j = 1$$

pois, pela linearidade do traço, $\text{tr}(A + B) = \text{tr}(A) + \text{tr}(B)$ e $\text{tr}(zA) = z\text{tr}(A)$, onde A e B são operadores lineares e z um número complexo arbitrário. Além disso,

$$\langle \chi | \rho | \chi \rangle = \sum_j p_j \langle \chi | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \chi \rangle = \sum_j p_j |\langle \chi | \psi_j \rangle|^2 \geq 0$$

pois $p_j \geq 0$.

$$\rho = \sum_j p_j \rho_j$$

Critério para decidir se um estado quântico é puro ou misto:

Um sistema quântico está em um *estado puro* quando seu vetor de estado $|\psi\rangle$ é conhecido exatamente. Neste caso o operador densidade é simplesmente

$$\rho = |\psi\rangle \langle\psi|.$$

Caso contrário, ρ está em um *estado misto*, ou seja, o sistema é uma *mistura* de diferentes estados puros no *ensemble* para ρ .

Segue que, para toda matriz densidade ρ , vale a desigualdade $\text{tr}(\rho^2) \leq 1$. Além disso

$$\begin{cases} \text{tr}(\rho^2) = 1, & \text{se } \rho \text{ é um estado puro} \\ \text{tr}(\rho^2) < 1, & \text{se } \rho \text{ é um estado misto} \end{cases}$$

Prova:

1) Caso particular para estados puros:

Para um estado puro, $\rho = |\psi\rangle \langle\psi|$, tem-se que ρ é idempotente, ou seja,

$$\rho^2 = |\psi\rangle \langle\psi| |\psi\rangle \langle\psi| = |\psi\rangle \langle\psi| = \rho.$$

Portanto

$$\text{tr}(\rho^2) = \text{tr}(\rho) = 1,$$

como queríamos mostrar.

2) Caso geral:

Considere-se o operador densidade

$$\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle\psi_j|.$$

Segue, então, que

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \left(\sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle\psi_j| \right) \left(\sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle\psi_k| \right) \\ &= \sum_{j,k} p_j p_k |\psi_j\rangle \langle\psi_j| |\psi_k\rangle \langle\psi_k|. \end{aligned}$$

Considerando, agora uma base completa formada pelos vetores de estado $|l\rangle$, ou seja, que satis-

fazem $\sum_l |l\rangle \langle l| = I$, é possível obter a desigualdade que se deseja provar em relação a $tr(\rho^2)$:

$$\begin{aligned}
tr(\rho^2) &= \sum_l \langle l| \underbrace{\left(\sum_{j,k} p_j p_k |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \psi_k\rangle \langle \psi_k| \right)}_{=\rho^2} |l\rangle \\
&= \sum_{j,k,l} p_j p_k \langle l| \psi_j\rangle \langle \psi_j| \psi_k\rangle \langle \psi_k| l\rangle \\
&= \sum_{j,k,l} p_j p_k \langle \psi_j| \psi_k\rangle \langle \psi_k| l\rangle \langle l| \psi_j\rangle \\
&= \sum_{j,k} p_j p_k \underbrace{|\langle \psi_j| \psi_k\rangle|^2}_{\leq 1} \\
&\leq \left(\sum_j p_j \right)^2 = 1
\end{aligned}$$

como queríamos demonstrar.

Referências Bibliográficas

- [1] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki, *Quantum Entanglement*, Reviews of Modern Physics, Volume **81** (2009).
- [2] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?*, Phys. Rev. **47**, 777 (1935).
- [3] E. Schrödinger, Naturwiss. **23**, 807 (1935).
- [4] Nielsen M.A., Chuang I.L., *Quantum Computation and Quantum Information*, (Cambridge University Press, Cambridge 2000).
- [5] M. J. Bremner et al., *Practical Scheme for Quantum Computation with Any Two-Qubit Entangling Gate*, Phys. Rev. Lett. **89**, 247902 (2002).
- [6] A.D. Levin, D.M. Gitman, R.A. Castro, *Entanglement of two-qubit photon beam by magnetic field*, The European Physical Journal C, (2014).
- [7] W. Heisenberg, *Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik*, Z. Phys. **38**, 441 (1926).
- [8] M.C. Baldiotti, D.M. Gitman, M.M. Santos, *Two and three coupled spins in magnetic field*, Third International Satellite Conference on Mathematical Methods in Physics, Londrina - PR (Brazil), Proceedings of Science, (2013).
- [9] L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wójs, *Quantum dots*, (Springer, Berlin, 1997).
- [10] D. Loss and D. P. DiVincenzo. *Quantum computation with quantum dots*, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
- [11] A. Zeilinger et al., *Significant-Loophole-Free Test of Bell's Theorem with Entangled Photons*, Phys. Rev. Lett. **115**, 250401 (2015).
- [12] R. Hanson *et al.* *Loophole-free Bell inequality violation using electron spins separated by 1.3 kilometres*, Nature (2015).
- [13] R. Hanson *et al.* *Loophole-free Bell test using electron spins in diamond: second experiment and additional analysis*. Nature (2016).
- [14] G. Burkard, D. Loss and D. P. DiVincenzo. *Coupled quantum dots as a quantum gate*, Phys. Rev. B **59**, 1829 (1999).
- [15] G. Burkard, D. Loss, D. P. DiVincenzo, J.A Smolin, *Physical optimization of quantum error correction circuits*, Phys. Rev. B **60**, 11404 (1999).

- [16] H. Engel, L.P. Kouwenhoven, D. Loss and C.M. Marcus, *Controlling Spin Qubits in Quantum Dots*, Quant. Info. Proc. **3**, 115 (2004).
- [17] J.M. Taylor et al., *Fault-tolerant architecture for quantum computation using electrically controlled semiconductors spins*, Nature Physics, **1**, 177-183, (2005).
- [18] J.R. Petta et al., *Coherent Manipulation of Coupled Electron Spins in Semiconductor Quantum Dots*, 2180-2184, (2016).
- [19] V.G. Bagrov, M.C. Baldiotti, D.M. Gitman and A.D. Levin. *Two interacting spins in external fields. Four-level systems*. Ann. Phys.(Berlin) **16**, 274, (2007).
- [20] M.C. Baldiotti, V.G. Bagrov, D.M. Gitman, A.D. Levin. *Two- and Four-Level Systems in Magnetic Fields*. Brazilian Journal of Physics, 41, pp. 71-77, (2011).
- [21] M.C. Baldiotti and D.M. Gitman, *Four-level systems and a universal quantum gate*, Ann. Phys. **17**, 7 (2008).
- [22] V.G. Bagrov, D.M. Gitman, M.C. Baldiotti and A.D. Levin. *Spin equation and its solutions*. Ann. Phys.(Leipzig) **14**, No. 11-12, 764-789(2006).
- [23] V.G. Bagrov, M.C. Baldiotti, D.M. Gitman and V.V. Shamshutdinova, Ann. Phys. (Leipzig) **14**(6), 390 (2005).
- [24] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu, and B. Schumacher, *Concentrating partial entanglement by local operations*, Phys. Rev. A **53**, 2046 (1996).
- [25] V. Coffman, J. Kundu, and W. K. Wootters, *Distributed entanglement*, Phys. Rev. A, **61**, 052306 (1999).
- [26] Rabi I.I., *Space Quantization in a Gyrrating Magnetic Field*, Phys. Rev. **51**, 652 (1937).
- [27] Rabi I.I., Ramsey N.F., Schwinger J., *Use of Rotating Coordinates in Magnetic Resonance Problems*, Rev. Mod. Phys. **26**, 167 (1954)
- [28] I.S. Gradshteyn and N.M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Sums, Series and Products* (Nauka, Moscow 1971).
- [29] J. C. A. Barata. *Curso de Física-Matemática*. E-book. (2017).
- [30] D.M. Tong, L.C. Kwek and C. H. Oh, *Geometric phase for entangled states of two spin-1/2 particles in rotating magnetic field*, J. Phys. A: Math. Gen. **36** (2003).
- [31] X.-H. Yi, X.-D. Zhang, *Geometric Phase for Two Entangled Spin-1/2 Particles in a Magnetic Field*, Int. J. Theor. Phys. **50**: 122–128, (2011).
- [32] W. Yang, W. Zhang, H. Tang, Z.S. Wang, *Entanglement and Geometric Phase for Two-Particle System in Nuclear Magnetic Resonance*, Int. J. Theor. Phys. **50**: 260–268, (2011).
- [33] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*, Revised version. Addison-Wesley. (1994).

- [34] D. Greenberger, M.A. Horne, A. Zeilinger, *Going beyond Bell's Theorem*, in “*Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe*”, p. 69, M. Kafatos (Ed.), Kluwer, Dordrecht (1989).
- [35] W. Dür; G. Vidal & J.I. Cirac, *Three qubits can be entangled in two inequivalent ways*. Phys. Rev. A. **62**: 062314, (2000).
- [36] J. Joo, Y. Park, S. Oh and J. Kim, *Quantum teleportation via a W state*, New Journal of Physics **5**, (2003).