

Jiusandro Kühn

CONTROLE PARAMÉTRICO DE EVOLUÇÃO
QUÂNTICA

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

Curitiba

2008

FOLHA DE APROVAÇÃO

RESUMO

No presente trabalho mostramos como controlar diferentes sistemas quânticos através de um procedimento que utiliza campos externos estáticos por partes. O procedimento é fundamentado na aplicação da teoria do controle inverso e na solução da equação de Schrödinger independente do tempo. Com base neste procedimento apresentamos um estudo analítico do controle do valor esperado de um observável para um sistema de dois e três níveis. Neste problema destinamos nossos esforços na busca de um campo externo paramétrico, dependente do tempo, que conduzirá o valor esperado de um observável por um caminho específico. Para esses sistemas estudamos como as imprecisões e flutuações no campo externo interferem na qualidade do controle. Em seguida, aplicamos a técnica para controlar os efeitos de reconstrução de um pacote de ondas para diferentes momentos iniciais em um bilhar circular. Neste problema, utilizamos um campo magnético externo para mostrar como incoerências nas energias interferem na qualidade do controle. Finalmente, no último capítulo, fazemos um estudo do espalhamento de um pacote de ondas Gaussiano por um potencial de contato geral movendo-se com velocidade constante. Neste último, mostramos como é possível usar potenciais de contato para controlar o momento médio do pacote de ondas.

ABSTRACT

In the present work, we develop a parametric procedure based on tuning time-independent external fields piecewisely to control different quantum systems. For so, we use the so called inverse method for the time-independent Schrödinger equation. We discuss the particular cases of controlling the expectation values of arbitrary operators for two and three levels systems. We show how to set the external potential, which changes in time intervals Δt , making the expected value of an observable to follow a determined trajectory. Also, for the two levels case, we analyze how the presence of small errors in the control parameters values influences the control accuracy. We furthermore apply the method to control the revivals of a wave packet confined in a circular billiard. If we consider initial wave packets with increasing values of linear momentum, then the possibility of reconstruction of the packet at certain times (the revival times) dies out. Here we demonstrate how to recover, at least partially, the revival behavior by means of an applied constant magnetic field. Finally, we study the scattering of wave packets by contact interaction potentials in 1D. We assume the potentials to move with constant velocity. We discuss how the characteristics of the transmitted packets can be “tailored” through the appropriate choice of the potential parameters.

AGRADECIMENTOS

Em memória de meu pai

Hélio Roberto Kühn

Gostaria de agradecer a todas as pessoas que de alguma forma contribuíram para que esta tese pudesse ser realizada. Ao Prof. Marcos Gomes Eleutério da Luz pela orientação e paciência a mim dedicada desde 2002, quando começamos a trabalhar juntos. Pela oportunidade a mim concedida de desenvolver meus primeiros trabalhos em mecânica quântica, em especial, nessa fascinante área do conhecimento que é o controle quântico. Aos estudantes da pós-graduação, em especial, ao pessoal da sala (“sala- π B”) pela convivência durante esses anos: Jane Rosa, Camila Tonezer, Sílvio Buchner, Adriano Willian da Silva, Paulo César Rech, Milton Domingues Michel, César Manchein, Denize Kalempa, Ezequiel Burkarter, Alexandre Mikowski. Aos colegas Fabiano Manoel de Andrade e Cristiano Francisco Woellner pelas discussões sobre computação.

Agradeço ao Departamento de Física pela estrutura cedida para o desenvolvimento da pesquisa. Pelos laboratórios de informática que permitiram a realização deste trabalho. Ao Prof. Carlos Carvalho pelo suporte computacional. Ao grupo de física atômica e molecular (Atomol) pelos seminários e oportunidades de discussões. Aos professores, Prof. Marcus Werner Beims pela dedicação e confiança nos projetos

de pesquisa. A banca de qualificação, Prof. Márcio Henrique Franco Bettega, Prof. Miguel Abbate e Prof. Renato Moreira Angelo, pelas contribuições na leitura, revisão e sugestões na primeira versão da tese. Aos membros da banca de defesa, Prof. Flavio Caldas da Cruz, Prof. Jayme Vicente de Luca Filho, Prof. Marcus Werner Beims e Prof. Márcio Henrique Franco Bettega. Aos funcionários do departamento, em especial à secretária da pós-graduação Tânia Aparecida dos Santos.

Agradeço também a Fábio Marcel Zanetti, Adam Luiz de Azevedo, Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt e Bin Kang Cheng pela colaboração no trabalho sobre os potenciais de contato. Ao Guilherme Jurkevicz Delben pela colaboração no trabalho sobre o controle quântico no bilhar circular.

À CAPES pelo apóio financeiro fornecido a mim e ao projeto de pesquisa sem o qual não seria possível realizá-lo.

Gostaria de agradecer a minha maravilhosa família. Aos meus pais, Rosemari e Hélio, e ao meu irmão Jimiandreas (juízo). A minha doce esposa Jane, pela convivência durante esses anos, e pelas longas discussões sobre física, e em particular, sobre o meu trabalho. À minha enteada Caroline, sabemos que não é fácil conviver com dois físicos em casa! Obrigado também aos meus amigos pelas horas agradáveis que passamos juntos.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	SELEÇÃO DE MODOS EM QUÍMICA	3
1.2	CONTROLE COERENTE	5
1.2.1	CONTROLE COM FEIXES DE LASER DE ONDA CONTÍNUA . .	6
1.2.2	CONTROLE COM LASER PULSADO	9
1.3	O CONTROLE ÓTIMO	13
1.4	O CONTROLE DA TRAJETÓRIA	15
1.4.1	O CONTROLE INVERSO E OS TEMAS RELACIONADOS COM A TESE	18
1.5	O CONTROLE QUÂNTICO EM LABORATÓRIO	20
1.6	OBJETIVO E ESTRUTURA DA TESE	25
2	CONTROLE QUÂNTICO EM UM SISTEMA DE DOIS NÍVEIS	28
2.1	O MÉTODO	30
2.1.1	A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER	32
2.1.2	O ESTADO QUÂNTICO	33
2.2	O VALOR ESPERADO DE UM OBSERVÁVEL	35
2.3	RESULTADOS E EXEMPLOS	40
2.3.1	CONTROLE DE $S(t)$ PARA DETERMINADOS INSTANTES DE TEMPO	41
2.3.2	CONTROLE DE $S(t)$ COMO UMA TRAJETÓRIA	43

2.4	DISCUSSÃO	48
2.4.1	A SENSIBILIDADE DO CONTROLE A ERROS NOS VALORES DOS PARÂMETROS	48
2.4.2	A GENERALIDADE DO MÉTODO EM RELAÇÃO AO ESTADO INICIAL $ \Psi(t_0)\rangle$ E O OBSERVÁVEL V	51
2.4.3	GENERALIDADE DO MÉTODO: DEMONSTRAÇÃO	53
2.4.4	CONEXÃO COM OS PARÂMETROS DO CAMPO DE UM LASER	55
2.5	CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	58
3	CONTROLE QUÂNTICO EM UM SISTEMA DE TRÊS NÍVEIS	62
3.1	O SISTEMA	64
3.2	A EVOLUÇÃO TEMPORAL DO SISTEMA	66
3.2.1	O VETOR DE ESTADO	69
3.2.2	O VALOR ESPERADO	71
3.3	RESULTADOS E EXEMPLOS	73
3.4	CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	79
4	CONTROLE DE RECONSTRUÇÕES DE UM PACOTE DE ONDAS EM UM BI- LHAR CIRCULAR	81
4.1	O SISTEMA	83
4.1.1	FUNÇÕES E ENERGIAS PRÓPRIAS DO SISTEMA	84
4.2	O PACOTE DE ONDAS	90
4.3	AS PROPRIEDADES DO PACOTE DE ONDAS	93
4.4	A PROPAGAÇÃO DO PACOTE DE ONDAS	95
4.5	CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	103
5	CONTROLE DE TRANSMISSÃO DE PACOTES DE ONDAS ATRAVÉS DE PO- TENCIAIS DE CONTATO DEPENDENTES DO TEMPO	106
5.1	POTENCIAIS EM MOVIMENTO	108
5.1.1	BARREIRA DE POTENCIAL INFINITA	108

5.1.2	INTERAÇÃO PONTUAL GERAL	110
5.2	ESPALHAMENTO DO PACOTE DE ONDAS	112
5.2.1	CASO DA BARREIRA DE POTENCIAL INFINITA	115
5.2.2	CASO DE INTERAÇÕES PONTUAIS	117
5.3	CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	122
	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	124
A	CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE TRANSMISSÃO E REFLEXÃO	129
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	132

INTRODUÇÃO

Neste capítulo introdutório faremos uma breve revisão histórica acerca do controle quântico. Buscaremos enfatizar as principais contribuições — teóricas e experimentais — desta nova, porém, já estabelecida área de pesquisa. A Seção 1.4 foi reservada à contextualização desta tese nesse vasto campo de estudos que se tornou o controle quântico. Nas Seções 1.4.1 e 1.6 faremos a explanação dos objetivos e diretrizes que nos motivaram a desenvolver tal pesquisa.

O desejo de controlar fenômenos em escalas microscópicas é relativamente antigo, e nos remete ao período do surgimento da mecânica quântica, por volta do ano de 1920¹. Nos anos em que se seguiram houveram muitos avanços rumo ao entendimento da estrutura de átomos e moléculas, e com isso, ganhamos uma nova forma de pensar a estrutura da matéria, e a maneira como essa estrutura interage com os sistemas à nossa volta. A interação da radiação com a matéria é um dos processos conhecidos mais elementares. Este tipo de interação nos permitiu argumentar a respeito da possibilidade de se controlar fenômenos em escalas atômicas

¹Anteriormente a esse período, questões muito profundas estavam sendo discutidas acerca das leis que governam a dinâmica de partículas em escalas microscópicas, tais como o próprio significado dessa nova ciência.

através da aplicação de um campo de radiação. Com isso, poderíamos idealizar esses campos externos como se fossem uma espécie de “pinça ótica” para manipular o comportamento atômico e molecular; mas para isso precisaríamos ter a disposição um campo de radiação com as propriedades adequadas para esta tarefa. É importante lembrar que esse campo de radiação não era disponível na época em que as primeiras idéias sobre o controle começaram a surgir. Desse modo, as investigações ficavam apenas no âmbito teórico, e as implementações experimentais só poderiam surgir com profundos avanços científicos e tecnológicos.

A esperança de se conseguir controlar fenômenos em escalas atômicas renasceu em 1960, com a publicação de uma nota por Theodore Maiman na revista *Nature* [1], a respeito de uma nova fonte de luz emitida por um cristal de rubi. Nessa nota ele comenta sobre uma técnica de bombeamento ótico capaz de produzir uma emissão ótica estimulada de comprimento de onda de $6,943\text{\AA}$, ou seja, no espectro visível (vermelho). Essa técnica deu origem à primeira fonte de luz laser da história [2]; o laser de rubi. Logo em seguida, em 1961, Ali Javan, William R. Bennett e Donald R. Herriott, publicam um artigo na revista *Physical Review Letters* [3], no qual descrevem as propriedades do laser de gás hélio-neônio, o primeiro laser de onda contínua (CW - *continue wave*). Essa nova fonte de energia criou perspectivas na física, na química [4] e em outros campos de pesquisa [5]. Mas somente cerca de 10 anos mais tarde — com a invenção do laser pulsado — essa tecnologia começou a ser empregada de forma efetiva em outras áreas, em especial, na química. Esse foi um período em que os experimentos com lasers tornaram-se viáveis, e intensos estudos de processos atômicos e moleculares começaram a ser realizados.

Atualmente as técnicas de fabricação de lasers constituem um intenso campo de estudos na ótica, sendo que muitos avanços foram alcançados e novas fontes de luz foram inventadas. Para aplicação em controle, é muito importante que o campo elétrico de saída do laser tenha a possibilidade de ser configurado, para que posteriormente seja aplicado no sistema que se deseja controlar. Uma opção é criar pulsos ultracurtos no domínio tempo. No presente, temos dois tipos de lasers que se

mostram adequados para essa tarefa: os lasers de estado sólido (*solid-state laser*) e os lasers de corante (*dye laser*). Nos lasers de estado sólido, geralmente um cristal sólido é dopado com íons que produzem os estados energéticos de interesse, como por exemplo no laser de titânio-safira (*Ti:sapphire*), no qual um cristal de safira é dopado com titânio para produzir um pulso de saída configurável na região do infravermelho. Já os lasers de corante usam um corante orgânico — normalmente em estado líquido — como meio ativo para produzir um pulso ultracurto da ordem de uns poucos femtosegundos. Há ainda muitos outros tipos de lasers que são utilizados para as mais diversas aplicações; desde lasers de baixa potência utilizados em eletrônica (dispositivos óticos) e aplicações médicas [5] até lasers de alta potência utilizados na indústria para cortar e/ou fundir metal.

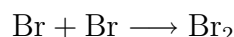
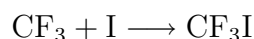
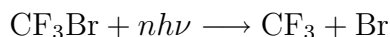
1.1 SELEÇÃO DE MODOS EM QUÍMICA

Após a invenção e aprimoramento do laser, começaram a surgir muitas propostas de aplicação para o controle de processos moleculares — ou mais especificamente para o controle de reações químicas. Esses avanços deram início a novas áreas de pesquisa, tais como: a fotoquímica [6], a espectroscopia molecular e mais tarde, a femtoquímica [7]. A partir deste ponto, começaram a surgir trabalhos no qual depositava-se enormes quantidades de energia em ligações químicas específicas de moléculas, sendo essas, idealizadas como molas individuais com diferentes forças, vibrando como uma certa quantidade de energia. Esse método ficou conhecido na literatura como química de modo seletivo (*mode-selective chemistry*), e consiste em ajustar a frequência de um laser de alta potência² com a frequência do modo de vibração da molécula, até ocorrer a ruptura ou a formação de uma ligação específica de interesse.

²Em um trabalho publicado na *Physics Today* (1980) [8] Letokhov descreve em seus experimentos um laser de CO₂ TEA (*Transverse Excitation Atmospheric pressure*) com repetição de pulso acima de 200Hz e potência média de 1kW.

Essa técnica foi muito utilizada por volta de 1980, quando experimentos com diferentes moléculas foram realizados. Como um breve exemplo, discutiremos a dissociação da molécula CF_3Br para formar a molécula CF_3I . Essa molécula foi amplamente usada para demonstrar a potencialidade da fotoquímica; e foram descritas, por exemplo, nos trabalhos de Vladilen S. Letokhov [8], Nicolaas Bloembergen e Ahmed H. Zewail³ [9]. Nesses trabalhos eles demonstraram que a conversão fotoquímica da molécula CF_3Br , misturada com o aceitador I_2 , com o objetivo de gerar a molécula CF_3I , é altamente eficiente (próximo de 100%) à pressão acima de 10 torr.

Nesse processo, a molécula CF_3Br é irradiada com um pulso intenso de laser de frequência ν (na região do infravermelho), a qual é ajustada próximo da frequência de vibração da ligação C-Br. Com a absorção do fóton essa molécula fica altamente excitada, ocorrendo então a dissociação molecular. Em seguida, esta molécula se liga ao aceitador, formando finalmente a molécula CF_3I . Esse exemplo procede da seguinte forma:



Por outro lado, se irradiarmos a molécula com um pulso de laser com frequência ν' , próximo da frequência da ligação C-F, poderíamos esperar a dissociação $\text{CF}_3\text{Br} + nh\nu' \longrightarrow \text{CF}_2\text{Br} + \text{F}$, o que não ocorre. Assim, a técnica de modo seletivo mostrou ter sucesso limitado. De fato, essa técnica demonstrou-se ineficiente para a grande maioria das moléculas, e os pesquisadores perceberam que quando os graus de liberdade vibracionais da molécula estão suficientemente acoplados, a energia aplicada na ligação é rapidamente redistribuída entre os outros modos vi-

³Ahmed H. Zewail recebeu em 1999 o prêmio Nobel de química pelas suas contribuições à femtoquímica.

bracionais moleculares; e nesse caso, a ligação não absorve energia suficiente para se quebrar, e a dissociação não pode acontecer. Para que a dissociação ocorra é necessário que a taxa de transferência de energia para a ligação seja maior que a redistribuição de energia para os outros modos vibracionais. Com isso, a energia permanecerá localizada nessa ligação até que a molécula se quebre.

A partir daí, o foco central do problema passou a ser o estudo do “casamento” entre o laser e as ligações intramoleculares, que ficou conhecido como *laser chemistry* [4]. Um outro problema importante era compreender como a energia era redistribuída entre os graus de liberdade da molécula. Esse problema ficou conhecido na literatura como IVR (da sigla em inglês para *Intramolecular Vibrational-energy Redistribution*). Uma discussão bastante didática sobre a IVR em macro moléculas foi feita por Ahmed H. Zewail na revista *Physics Today* (1980) [10].

Essa questão sobre a redistribuição de energia para os modos vibracionais intramoleculares havia limitado muitos esforços em estabelecer o controle sobre reações químicas, e o antigo sonho de usar fótons como “reagente” em reações químicas, perdeu muito do seu fascínio. Nesse momento muitas dúvidas sobre as reais possibilidades de se controlar fenômenos quânticos foram levantadas [11, 12]. O laser é a ferramenta adequada para se realizar o controle? É necessário desenvolver um novo método de controle? Estamos olhando para as propriedades físicas corretas? É possível tornar o sonho de controlar os fenômenos em escalas microscópicas realidade?

1.2 CONTROLE COERENTE

Com o sucesso limitado da técnica de seleção de modos em química, uma nova abordagem começou a ser desenvolvida para buscar contornar as barreiras impostas pela IVR. O primeiro passo foi abandonar a idealização de uma ligação química como uma mola vibrando. Essa aproximação não era mais adequada para progredir nas técnicas de controle em escalas atômicas. Como consequência, uma nova abordagem denominada de controle coerente — que se utilizava das propriedades

ondulatórias da luz laser (coerência) e da matéria — começou a ser elaborada.

Essa nova abordagem iniciou-se por volta de 1985 com os trabalhos de David J. Tannor e Stuart A. Rice [13], e em seguida, com a contribuição de Moshe Shapiro, Paul Brumer [14–16], e na seqüência por muitos outros colaboradores⁴. A presente abordagem utilizava fundamentalmente as propriedades de coerência da luz laser⁵ para conduzir uma reação química, dessa forma, produzindo uma particular molécula e extinguindo outra. A luz coerente tem uma propriedade fundamental para o controle: o processo de interferência (construtiva e destrutiva). Essa importante propriedade refere-se à forma com que todas as ondas se combinam, e para nosso interesse, podemos incluir aqui também as ondas de matéria [17]. O controle coerente se utiliza deste princípio (interferência em ondas de matéria) para atingir um objetivo particular de evolução quântica. Observe que essa forma de controle leva em conta explicitamente as propriedades ondulatórias da matéria. Mas afinal, como explorar os fenômenos de interferência em reações químicas?

Para isso, algumas técnicas foram desenvolvidas, entre elas, destacamos o controle através da aplicação de dois feixes de laser CW [18,19], e através da aplicação de dois pulsos [20–22], técnica amplamente utilizada até hoje.

1.2.1 CONTROLE COM FEIXES DE LASER DE ONDA CONTÍNUA

Trataremos agora de um caso importante de dissociação molecular. Vamos supor que desejamos dissociar a molécula ABC em suas componentes⁶ [23]. Dessa

⁴Anteriormente a esses trabalhos específicos sobre controle quântico, muitas técnicas de espectroscopia haviam sido empregadas para obter informação a respeito da estrutura eletrônica de átomos e moléculas.

⁵A coerência está relacionada à forma como os átomos emitem luz. Em resumo, uma fonte é dita coerente se todos os átomos que estão excitados emitem simultaneamente, e em fase, o excesso de energia em forma de radiação, decaindo portanto para um estado de menor energia. No entanto, devemos acrescentar que esta propriedade deve ser analisada em um sentido mais amplo, como por exemplo de coerência temporal, espacial, espectral e de polarização.

⁶Não estamos considerando aqui o caso em que há cadeia fechada.

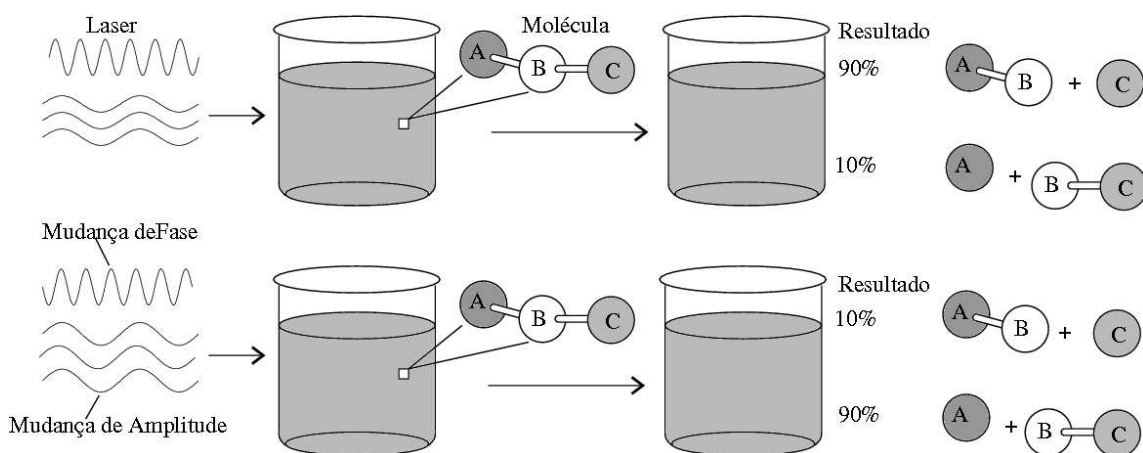


Fig. 1.1: O controle da dissociação química pode ser realizado irradiando simultaneamente a molécula com dois fótons diferentes. O processo de controle de um certo componente molecular é feito ajustando-se corretamente a amplitude e a fase dos feixes do laser. Esta figura foi adaptada da Ref. [23].

forma podemos obter duas possíveis reações: $ABC \rightarrow A + BC$ ou $ABC \rightarrow AB + C$; e uma terceira reação com pouco interesse para o controle coerente, a saber, $ABC \rightarrow A + B + C$. Para isso, precisamos quebrar as ligações entre os constituintes moleculares, ou seja, as ligações entre A e B, ou B e C. Para essa tarefa podemos empregar uma técnica que utiliza dois feixes de laser CW.

A molécula é irradiada pelos dois feixes simultaneamente, como ilustrado na Fig. 1.1. Um feixe irradia a molécula com um fóton de frequência conhecida, capaz de ser absorvido pela molécula, enquanto o outro irradia a molécula com, por exemplo, três fótons com um terço da frequência do primeiro, isto é, um terço de energia para cada fóton. A informação sobre a natureza dos fótons envolvidos no processo fica contida na função de onda da molécula gerando fenômenos de interferência. Podemos então controlar esse processo de interferência e, conseqüentemente, a dinâmica molecular, modificando a frequência e o número de fótons envolvidos no processo. Esses parâmetros dependem do tipo de molécula envolvida na reação.

Essas características ondulatórias da matéria e, conseqüentemente, dos processos de interferência, são a essência da mecânica quântica; e o controle sobre esses

processos de interferência constitui a essência do assim chamado, controle radiativo coerente. Utilizando o laser como ferramenta podemos manipular indiretamente a função de onda molecular, e com isso privilegiar uma determinada reação, por exemplo, a reação $ABC \longrightarrow AB + C$, e omitir outra, simplesmente ajustando os termos de interferência. Isto é feito ajustando-se a amplitude e a fase relativa entre os dois feixes. Note que como o controle reside nos processos de interferência, o método não requer o uso de lasers intensos, ou seja, um laser de baixa intensidade pode ter um efeito considerável sobre a dinâmica molecular.

Como um exemplo da aplicação deste método, podemos citar os trabalhos sobre a dissociação da molécula de IBr (Brometo de iodo) [24]. Essa molécula pode ser separada em $I + Br$ ou $I + Br^*$, no qual o asterisco indica que o átomo de bromo tem um excesso de energia e encontra-se em um estado excitado. Os cálculos prevêem que mudanças na amplitude e na fase dos dois lasers, podem variar a quantidade de bromo energético entre 25% e 95% do total do produto formado. Este método de controle é muito mais eficiente que os métodos químicos tradicionais, que atingem em torno de 10% do total. Tal método tem sido empregado com sucesso em outras moléculas diatômicas, e também em moléculas poliatômicas [19].

LIMITAÇÃO DO MÉTODO

Apesar do conceito por trás do controle de reações químicas aplicar-se a uma gama grande de moléculas isoladas, existem dois grandes obstáculos:

O primeiro é que a eficiência do método cai significativamente quando a função de onda molecular não tem uma fase definida. Essa perda de fase ocorre principalmente quando há colisão entre moléculas. Essas colisões tornam-se mais freqüentes com o aumento da temperatura e da pressão. Para contornar essa dificuldades práticas, trabalha-se com gases a baixa pressão, com a técnica de feixes moleculares ou com átomos frios (*cold atoms*).

O segundo obstáculo envolve a fase da luz laser. Dadas duas fontes arbitrárias (independentes), geralmente não conhecemos a diferença de fase entre os feixes,

além dessa diferença ser afetada por qualquer instabilidade que possa ocorrer nos equipamentos. Essas instabilidades reduzem significativamente o grau de interferência e por conseqüência, o controle na reação. Alguns métodos sofisticados em ótica têm sido desenvolvidos para eliminar o problema da fase. Entre eles, destacamos a proposta feita em 1995 por Zhidang Chen [25] de usar um feixe de laser intenso, e nesse caso, o controle não fica somente a cargo da configuração de fase, mas também do controle da amplitude do campo elétrico externo, permitindo um maior controle em sistemas com um número maior de colisões moleculares. A utilização de lasers pulsados é uma outra proposta que tem chamado a atenção da comunidade científica e tem sido aplicada largamente em técnicas de controle mais modernas, por razões que discutiremos a seguir.

1.2.2 CONTROLE COM LASER PULSADO

Qualquer cenário em mecânica quântica que possa induzir processos de interferência pode servir como um meio de estabelecer controle em sistemas microscópicos. Assim, podemos usar como cenário de controle, a aplicação de pulsos de luz laser ultracurtos no domínio tempo, ao invés de usar dois feixes de laser CW. Ao contrário da radiação de onda contínua, um pulso de luz é construído com uma coleção de distintas frequências (banda) e, portanto, de uma coleção de fótons com diferentes energias. O pulso curto (banda larga) e a gama de energia que o constitui, tem um papel fundamental no método de controle de reações químicas com laser pulsado. Essa gama de energia pode induzir uma dinâmica molecular (tais como vibração e/ou rotação), na qual a molécula pode interagir com um outro pulso de luz. Um sistema quântico com uma energia fixa reside em um estado denominado estado estacionário, e não apresenta dinâmica temporal. Quando o pulso eletromagnético interage com a molécula, a mesma passa a existir em vários níveis de energia simultaneamente, e esta configuração é chamada de estado de superposição. Para aplicações em dissociação molecular, o estado de superposição é freqüentemente construído com

a superposição de estados vibracionais. Nesta configuração o sistema quântico possui uma dinâmica temporal que depende da natureza do pulso de luz, e da sua interação com a molécula. Desse modo, podemos mudar a dinâmica molecular controlando as frequências que compõem o pulso, ou seja, a forma do pulso eletromagnético.

Embora um único pulso de luz possa alterar a dinâmica da molécula, o mesmo não é capaz de controlar a taxa de reação química. Um método introduzido por Rice e Tannor [13] e subsequentemente estendido por outros pesquisadores, permitiu controlar reações empregando uma seqüência de dois pulsos. Nesse método o primeiro pulso coloca a molécula em um estado de superposição, determinando como a molécula responderá ao pulso seguinte. O segundo pulso tem como finalidade quebrar a molécula em diferentes componentes. Esse cenário é similar ao método descrito por dois lasers de onda contínua, em que o processo de interferência entre as funções de onda é responsável pelo controle. Para os pulsos, as frequências que o compõe, induzem nas funções de onda moleculares processos de interferências. Essas interferências, e desse modo, o ganho no produto formado, pode ser alterado variando-se o intervalo entre os pulsos, e a frequência que os compõe. Diferentemente dos experimentos com laser CW, os pulsos de laser têm a vantagem da introdução do tempo como uma variável experimental.

Um dos primeiros trabalhos visando a aplicação de pulsos de radiação para fazer o controle de reações foi publicado em 1985 em *Journal of Chemical Physics* por David J. Tannor e Stuart A. Rice [13]. Neste trabalho os autores utilizaram o método variacional para otimizar a probabilidade de dissociação de uma determinada molécula triatômica, considerando a dinâmica molecular em uma aproximação de superfície de potencial de Born-Oppenheimer⁷.

O método teórico desenvolvido por eles utiliza dois pulsos de luz, sendo que a configuração do segundo pulso depende das características do primeiro, veja

⁷Nessa aproximação é considerada apenas a dinâmica dos elétrons, de modo que e os núcleos atômicos são considerados fixos. Portanto, as coordenadas nucleares não aparecem explicitamente na função de onda.

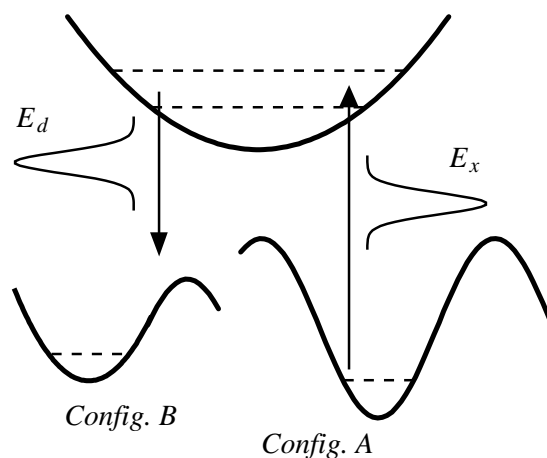


Fig. 1.2: Essa figura mostra esquematicamente o método do controle radiativo coerente. Na superfície de potencial inferior (config. A) a molécula encontra-se no estado fundamental. Quando então, um pulso gaussiano E_x coloca a molécula em um estado de superposição contendo apenas dois níveis vibracionais. Nesse estado, a molécula apresenta uma dinâmica devido a evolução do pacote de onda. Após um tempo Δt um segundo pulso E_d interage com a molécula, fazendo-a retornar para o estado fundamental, em uma nova região do potencial (config. B), e portanto, como uma nova molécula.

a Fig. 1.2. O primeiro pulso E_x atinge a molécula (inicialmente no estado fundamental) e a coloca em um estado de superposição no qual a molécula apresenta uma dinâmica temporal definida por uma superfície de potencial⁸. Então, após um intervalo de tempo Δt , o segundo pulso E_d atinge a molécula fazendo-a retornar para o estado fundamental em uma nova configuração, ou equivalentemente, como uma nova molécula. Nesse processo a reação é vista basicamente como a evolução de um pacote de ondas na superfície de potencial (Fig. 1.2), sendo o tempo um parâmetro determinante na reação. Essa abordagem, embora original, tinha fortes limitações experimentais. Para controlar a dinâmica do pacote de ondas — construído com muitos estados — exigia-se uma fonte de radiação muito curta no domínio tempo (femtosegundo); mas tal fonte não era disponível na época, limitando severamente

⁸Essa é a superfície de Born-Oppenheimer. Os detalhes sobre essa superfície podem ser vistos nas Refs. [13, 15].

qualquer configuração experimental.

Em 1989 Tamar Seideman, Moshe Shapiro e Paul Brumer propuseram uma técnica que utilizava dois pulsos gaussianos para controlar reações químicas unimoleculares [15, 16]. Nessa técnica, o primeiro pulso colocava a molécula em um estado de superposição, criando um pacote de ondas contendo apenas dois níveis de energia, de modo que o segundo pulso, quando atingia a molécula, gerava os processos de interferência necessários à dissociação. Essas interferências puderam ser controladas através do atraso temporal entre os dois pulsos. A partir deste esquema uma importante equação pôde ser deduzida, demonstrando isoladamente os efeitos da fotodissociação e da interferência⁹:

$$P(q) \propto |C_1|^2 \mu_{1,1}^{(q)}(E_m) + |C_2|^2 \mu_{2,2}^{(q)}(E_m) + 2|C_1 C_2 \mu_{1,2}^{(q)}(E_m)| e^{-\tau_d^2 (E_2 - E_1)^2 / 8} \cos[\omega_{2,1} \Delta T + \alpha_{1,2}^{(q)}(E) + \phi] \quad , \quad (1.1)$$

sendo $P(q)$ a probabilidade de formar um determinado produto q , os C 's são os coeficientes do pacote de ondas formado pelo primeiro pulso, os μ 's são os momentos de dipolo do produto. Os dois primeiros termos da expressão (1.1) são responsáveis pela fotodissociação e não carregam informação sobre o atraso temporal dos pulsos, enquanto o terceiro termo é responsável pelos fenômenos de interferência, e ΔT é o intervalo de tempo entre os pulsos, que pode ser controlado experimentalmente.

Esse trabalho tornou-se um dos mais importantes na literatura do controle quântico, porque foi a primeira vez que se mostrou a possibilidade real de se obter o controle de reações químicas em uma gama maior de moléculas com uma tecnologia de laser disponível na época (laser de picosegundo). A expressão (1.1) é análoga à expressão obtida para explicar padrões de interferência em experimentos de dupla fenda, e a partir daí, começaram-se a fazer comparações entre o controle quântico e esses tipos de experimentos.

⁹Para a dedução dessa equação os pesquisadores utilizaram a teoria de perturbação de primeira ordem e a aproximação de pacote de onda rotacional. Mais detalhes sobre essa equação podem ser vistos na Ref. [15].

As idéias originais do controle coerente deram uma grande contribuição ao entendimento dos processos de controle de reações químicas. Mas logo ficou claro que para superfícies de potencial mais realísticas, e para moléculas mais complexas, era necessário usar um pulso configurável e com frequências que otimizavam a probabilidade de se obter uma determinada reação. Este pulso precisava levar em conta a dinâmica do pacote de ondas, já que o mesmo, uma vez criado, não permanecia localizado, ao contrário, se dispersava rapidamente. Como consequência, a intuição (na qual se baseava os trabalhos [15,16]) foi “abandonada” em favor de um esquema mais sistemático, denominado controle ótimo (*Optimal Control*).

1.3 O CONTROLE ÓTIMO

O princípio fundamental de qualquer técnica de controle é a manipulação de interferências quânticas construtivas e destrutivas. A promessa do controle coerente, especialmente a formulação ótima, é criar apenas as interferências quânticas corretas para guiar a molécula ao produto final desejado, denominado estado alvo. Essa nova abordagem denominada teoria do controle ótimo [26,27], tem como meta maximizar (minimizar) uma certa probabilidade de transição, chamada de objetivo. Portanto, dado um sistema quântico, como deve ser a configuração do pulso de laser aplicado que conduza o sistema de um estado A para um estado B em um intervalo de tempo finito? Essa é uma questão fundamental estudada no âmbito da teoria do controle ótimo, cuja resposta apropriada dá-se por meio da configuração do pulso.

Matematicamente expressam-se essas idéias através da otimização do seguinte funcional:

$$J = \langle \Psi(t_f) | A | \Psi(t_f) \rangle \quad , \quad (1.2)$$

sendo A um observável qualquer, e $|\Psi\rangle$ é o estado do sistema em $t = t_f$, que é obtido da solução da equação de Schrödinger. Para otimizar J precisamos então inserir um conjunto de vínculos fisicamente aceitáveis e práticos.

Como não dispomos de uma fonte de laser que forneça energia infinita, e

por razões práticas muitas vezes deseja-se manter a energia I do pulso fixa, podemos usar esse argumento para estabelecer o primeiro vínculo no problema. Esse vínculo é conhecido na literatura [26] como *penalty*, sendo

$$\int_{t_0}^{t_f} dt |\vec{\varepsilon}(t)|^2 - I = 0 \quad . \quad (1.3)$$

Na expressão acima, $\vec{\varepsilon}(t)$ representa o campo elétrico clássico de um laser.

Como a Eq. (1.2) depende do estado $|\Psi\rangle$, que por sua vez depende do campo aplicado, a dinâmica quântica é introduzida como um vínculo adicional, e deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H(t)|\Psi\rangle \quad . \quad (1.4)$$

O problema da otimização de J pode ser resolvido utilizando-se os multiplicadores de Lagrange. De acordo com o procedimento padrão, multiplicamos a Eq. (1.3) por um número à determinar λ , e a Eq. (1.4) por um estado desconhecido $|\chi\rangle$, para então generalizarmos a Eq. (1.2), tal que

$$J = \langle \Psi(t_f) | A | \Psi(t_f) \rangle + \lambda \left[\int_{t_0}^{t_f} dt |\vec{\varepsilon}(t)|^2 - I \right] + i \int_{t_0}^{t_f} dt \left\{ \langle \chi | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] | \Psi \rangle + c.c. \right\} \quad (1.5)$$

Fazendo $\delta J = 0$ podemos escrever $|\chi\rangle$ e λ em função dos parâmetros conhecidos do problema, isto é, em função de $|\Psi\rangle$, A e $\vec{\varepsilon}(t)$. Agora esse conjunto de equações pode ser resolvido, desde que seja inserida uma função tentativa para $\vec{\varepsilon}(t)$.

O problema é resolvido da seguinte forma: com o campo tentativa determinamos $H(t)$, então propagamos $|\Psi\rangle$ de t_0 até t_f utilizando a Eq. (1.4). Assim, determinamos $|\chi\rangle$ e λ . Com esse novo campo repetimos o procedimento iterativamente. O resultado final será um campo $\vec{\varepsilon}(t)$ que otimiza, isto é, maximiza (minimiza) o funcional J em $t = t_f$.

Esse procedimento foi aplicado para diversos tipos de moléculas, como por exemplo, nos estudos de Kosloff *et al.* [28] sobre o modelo teórico da dissociação da molécula HHD, Amstrup *et al.* [29] sobre o controle da fotodissociação de HgAr e

I_2 , e também os trabalhos de Hartke *et al.* [30] sobre a simulação da dinâmica de controle da dissociação da molécula Br_2 em Br^*/Br .

A técnica de controle ótimo tornou-se relevante porque permitia uma maior flexibilidade na escolha dos vínculos físicos estabelecidos no problema (*penalties*), e nos objetivos moleculares. Mas nessa técnica usualmente só nos preocupamos em atingir o estado alvo desejado em um instante de tempo $t = t_f$, sem dar atenção para o caminho entre t_0 e t_f . Para atender à necessidade de conduzir o sistema a um estado desejado por um caminho previamente estabelecido, criou-se um método alternativo de controle, denominado de controle da trajetória (*tracking control*)¹⁰.

1.4 O CONTROLE DA TRAJETÓRIA

O controle da trajetória, da mesma forma que os outros métodos já discutidos, é obtido através da aplicação de um campo externo. Mas agora, tem-se como objetivo conduzir o sistema por uma trajetória estabelecida *a priori*, ao invés de simplesmente atingir o objetivo em um tempo t_f . Geralmente o problema é posto em termos da configuração do campo que conduzirá a esse objetivo. Esse método alternativo de condução de um sistema quântico-mecânico por um caminho específico, se baseia fundamentalmente na solução de uma equação não linear, e normalmente tem-se como meta a solução de um problema inverso. Por essa razão o controle de trajetória também é conhecido na literatura como controle inverso (*inverse control*).

A base teórica matemática da técnica de controle inverso em mecânica quântica foi estabelecida primeiramente em dois artigos publicados por Ong *et al.* em *Mathematical Systems Theory* [31, 32]. Nesses artigos foram descritas as condições necessárias e suficientes para a existência de soluções para o problema do controle quando aplicado à mecânica quântica.

¹⁰Essa técnica foi utilizada em nosso trabalho para fazer o controle sobre um sistema de dois níveis. No capítulo 2 explicaremos em detalhes como a técnica foi empregada nesse sistema, e quais os resultados que obtivemos.

A utilização do controle inverso é conceitualmente simples, e também inexplorado em dinâmica molecular; embora a versão clássica já tenha sido explorada em diversos problemas de engenharia. Mas agora, na abordagem quântica, o caminho dependente do tempo (trajetória), denotado aqui por $S(t)$, é especificado *a priori*. Geralmente escolhemos como meta de controle o valor esperado de um certo observável, isto é,

$$\langle A \rangle(t) = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \quad . \quad (1.6)$$

O controle é feito então quando impomos ao valor esperado de A que siga exatamente a trajetória previamente definida por nós, ou seja, quando $\langle A \rangle(t) = S(t)$. Dessa forma, como $\langle A \rangle(t)$ depende do campo ótico aplicado, podemos nos perguntar: como deve ser a configuração desse campo ótico para que o sistema tenha como resposta para o valor esperado exatamente o caminho $S(t)$?

Uma resposta para essa questão começou a ser investigada por Herschel Rabitz *et al.* [33] a partir da solução da equação de Heisenberg

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H_0] \rangle - \frac{1}{i\hbar} \langle [A, \vec{\mu}(\vec{r})] \rangle \cdot \vec{E}(t) + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad . \quad (1.7)$$

Essa expressão pode ser deduzida diferenciando-se a Eq. (1.6) em relação ao tempo, e depois utilizando-se a equação de Schrödinger (1.4), para $H = H_0 - \vec{\mu}(\vec{r}) \cdot \vec{E}(t)$, sendo $\vec{\mu}(\vec{r})$ o operador de dipolo elétrico e $\vec{E}(t)$ o campo elétrico clássico¹¹. Nessa expressão $[A, H_0]$ e $[A, \vec{\mu}(\vec{r})]$ denotam os comutadores de A com H_0 e $\vec{\mu}(\vec{r})$, respectivamente. Observa-se também que o estado do sistema $|\Psi(t)\rangle$ está implícito nessa expressão, de forma que para determinar a dinâmica do valor esperado do observável precisamos, em geral, resolver um sistema com duas equações, sendo que uma delas — a saber, é a equação de Schrödinger dependente do tempo.

Para facilitar a tarefa, é conveniente escolher um campo polarizado, de forma que $\vec{E}(t) = \hat{e}E(t)$. A solução do controle é encontrada invertendo-se e resolvendo-se

¹¹A expressão (1.7) só é válida na aproximação de dipolo.

a Eq. (1.7). Observa-se nessa expressão que quando os operadores A e $\vec{\mu}$ comutam, a expressão perde sua dependência com o campo, ocorrendo uma divergência em $E(t)$; e como conseqüência temos uma perda de controle devido ao desacoplamento entre o campo ótico e o sistema. Uma discussão sobre a natureza dessas singularidades foi feita por Herschel Rabitz *et al.* em 1999 [34].

A Eq. (1.7) fornece a solução inversa para o campo de controle. No entanto, podemos observar que o campo de controle depende de $\Psi(\vec{r}, t)$ através dos termos $\langle [A, H_0] \rangle$, $\langle [A, \vec{\mu}(\vec{r})] \rangle$ e $\langle \partial A / \partial t \rangle$ e portanto $E = E(t, \Psi(\vec{r}, t))$. Devemos enfatizar aqui que a solução da equação de Schrödinger é, em geral, muito complicada, porque o campo externo depende — matematicamente falando — do estado do sistema, e nesse caso a Eq. (1.4) fica:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(\vec{r}, t)\rangle}{\partial t} = [H_0 - \vec{\mu}(\vec{r}) \cdot \hat{e} E(t, \Psi(\vec{r}, t))] |\Psi(\vec{r}, t)\rangle \quad . \quad (1.8)$$

Essa é uma equação diferencial não linear, e através dela podemos observar a complexidade em se resolver um problema inverso para um potencial geral. Da expressão acima observa-se também porque a intuição, diferentemente da proposta do controle coerente, não é mais suficiente para configurar o campo externo.

Nesse contexto, é de grande interesse buscar expressões que cheguem a uma solução para o campo que também possa ser implementada em um algoritmo em um procedimento experimental. A solução numérica das Eqs. (1.7) e (1.8) requer um grande esforço computacional, o que agrava, ou até mesmo proíbe, a sua implementação direta em qualquer algoritmo genético¹². Por isso, o procedimento padrão consiste em simplificar o problema especificando-se a curva de energia potencial e manipulando-se as equações de forma analítica o máximo possível para minimizar trabalhos numéricos posteriores. Exceto para potenciais muito simples — que normalmente não servem para representar moléculas — não consegue-se obter uma solução analítica do valor esperado. Alguns exemplos de aplicação do controle

¹²Um algoritmo genético é uma técnica de procura utilizada na ciência da computação para achar soluções aproximadas em problemas de otimização e busca.

da trajetória podem ser encontrados nas Refs. [33–35]. Para esses exemplos foram resolvidas as Eqs. (1.4) e (1.7) para potenciais específicos.

1.4.1 O CONTROLE INVERSO E OS TEMAS RELACIONADOS COM A TESE

O método do controle inverso mostrou-se bem mais geral que os métodos anteriores por duas razões: (i) trata do controle sobre o valor esperado de uma observável qualquer, o que é interessante para a aplicação em diversas áreas da física e da química; (ii) o controle é mantido sobre toda a trajetória, e não visa somente um único instante de tempo t_f .

No contexto da teoria do controle é fundamental buscar soluções analíticas que nos permitam fazer uma análise física que mostre o comportamento geral do problema. Isso é bastante difícil de se conseguir resolvendo-se as Eqs. (1.7) e (1.8). No entanto, propomos uma forma mais simples de realizar o controle inverso e com isso, elaboramos um protocolo capaz de contornar algumas dificuldades práticas. O protocolo consiste em fazer um controle inverso por partes, de tal forma que o Hamiltoniano em cada um desses intervalos é independente do tempo por partes, e com isso não precisamos mais resolver a equação de um problema dependente do tempo. No entanto, a dependência temporal é obtida incrementando-se passo a passo o processo de controle. Esta é uma outra vantagem desse protocolo, pois em alguns casos é interessante obter apenas poucos passos de controle — em muitos casos apenas um passo é necessário (veja por exemplo o Cap. 4) —, e neste caso a aplicação do método torna-se direta.

Por isso escolhemos como tarefa inicial para essa finalidade, a aplicação do método em um sistema de dois níveis, tendo em vista que essa classe de sistemas tem importância prática, como por exemplo, em ótica quântica [36–38], e mais recentemente em física da matéria condensada [39, 40], visando aplicações na área da computação quântica [41–43]. Como resultado da aplicação do método, obtivemos

uma expressão geral e analítica para o valor esperado de um observável qualquer. Aqui, a palavra geral foi usada no sentido de que não precisamos especificar o potencial do problema, e portanto, os resultados são válidos para qualquer problema, desde que o mesmo possa ser representado por um sistema de dois níveis.

Devemos lembrar que esse tipo de sistema tem uma gama ampla de aplicações, e já foi utilizado em importantes trabalhos sobre controle. Como por exemplo no artigo publicado por Moshe Shapiro e Paul Brumer em 1989 [15] que já discutimos na Seção 1.2. Nesse artigo eles aplicaram dois pulsos de laser gaussianos em um sistema de dois níveis com o objetivo de controlar a taxa de reações químicas.

O que fizemos no Cap. 2 foi utilizar os mesmos elementos, porém sem aproximações, aplicando um método mais robusto (controle inverso) para fazer o controle sobre o valor esperado do observável. Os resultados obtidos puderam ser comparados aos resultados descritos na Eq. (1.1) e ao experimento de fenda dupla, já que também encontramos o termo de interferência — principal responsável pelo controle — e os termos de fotodissociação.

A solução do problema inverso encontrada é muito eficiente, porque agora não precisamos mais resolver a equação diferencial, e com isso abre-se a possibilidade de ser implementada diretamente em um algoritmo genético, freqüentemente utilizado em experimentos de controle. A forma do campo externo, é claro, depende do caminho $S(t)$ e, em geral, assume uma configuração bastante complicada, que jamais poderia ser projetada intuitivamente. Mas algumas características puderam ser identificadas, tais como: a aplicação de pulsos intensos quando são exigidas variações rápidas no valor esperado e, a convergência do campo quando o valor esperado é uniforme. Os detalhes da solução e a discussão dos resultados será visto no Cap. 2.

Quando acrescentamos mais estados de superposição, como por exemplo em um sistema de três níveis, o problema começa a ganhar complexidade. Nessas condições ainda podemos aplicar a técnica de controle inverso, porém, algumas análises adicionais são necessárias, e a preparação do estado inicial do sistema — o qual está relacionado com o pulso *pump* — torna-se importante. O estado inicial gera uma

janela em que a qualidade, e conseqüentemente, a viabilidade do controle é satisfeita. Estes resultados será descritos no Cap. 3.

A técnica do controle inverso pode ser aplicada para uma partícula carregada no interior de um bilhar circular. Um bilhar é caracterizado por um potencial de confinamento, isto é, quando partículas são aprisionadas devido a ação de potenciais. No problema proposto a partícula sente o potencial somente em $r = R_0$, sendo R_0 o raio do bilhar. Neste sistema, o parâmetro de controle é um campo magnético externo, e neste caso nos preocupamos em fazer somente um passo de controle. Para realizar o controle inverso, aplicamos um campo magnético perpendicular à superfície do bilhar de tal forma que ajustando-se apropriadamente a intensidade do campo externo conseguimos recuperar as reconstruções do pacote de ondas. Neste sistema particular a grandeza física de interesse a ser controlada é a função de autocorrelação; que traz informações sobre os processos de recorrência em um sistema quântico. Um aspecto importante é que para este sistema obtivemos as soluções analíticas para um regime de campos magnéticos intensos, o qual possibilitou um maior controle, mesmo com efeitos de incoerências nas energias. Uma discussão sobre esta análise será apresentada no Cap. 4.

1.5 O CONTROLE QUÂNTICO EM LABORATÓRIO

O protocolo geral para se fazer o controle sobre um sistema quântico é, em princípio, direto: introduzimos um campo externo tentativa, como por exemplo, um campo de radiação, e fazemos as medidas de interesse no sistema. Esta medida, em geral, está associada com o valor esperado de um certo observável. Então reconfiguramos o campo por meio da amplitude e da fase das componentes espectrais, afim de corrigir os possíveis desvios ocorridos do estado alvo. Esse procedimento deve se repetir até que se consiga atingir o estado desejado com uma precisão previamente definida. Esse protocolo é conhecido na literatura como *closed-loop learning* (CLL) [44] sendo utilizado até hoje em configurações experimentais. Chamamos a

atenção, para o fato da necessidade de usarmos uma “boa” função tentativa para o campo externo inicial¹³, caso contrário, qualquer investigação experimental torna-se difícil, ou em alguns casos, até mesmo proibitiva, em função da quantidade de fótons por mol envolvidos na reação. Portanto, se a função tentativa inicial para o campo externo não for suficientemente boa, se gastará no processo uma quantidade de energia muito grande (em virtude do número de fótons) para se obter pouco controle, tornando o processo de controle inviável. Nesse contexto, teoria e experimentos precisam caminhar lado a lado, pois além do campo tentativa inicial previsto pela teoria, precisamos conhecer também as forças intramoleculares, ou em outras palavras, o Hamiltoniano do sistema, afim de resolver iterativamente a equação de Schrödinger buscando sempre pelo campo que conduza ao objetivo molecular. Essas soluções são focadas principalmente em explorações numéricas, por isso é de grande utilidade buscar algoritmos que aceleram o processo de solução.

Um desafio especial inclui buscar configurações de campo num regime de forte excitação (denominado regime de campos intensos), nas quais soluções analíticas são, em geral, difíceis de serem obtidas. Buscar por essas soluções é particularmente importante porque nesse caso podemos incluir os efeitos de incoerência, que ocorrem principalmente por causa das colisões moleculares, ou através de processos de emissão de radiação espontânea [37]. Atualmente existem duas formas gerais de aplicação da técnica de controle de ciclo fechado (*closed-loop control*) [45], a saber: o controle inteligente (*learning control*) e o controle com resposta (*feedback control*); sendo que a principal diferença entre os dois está na amostra molecular. Na técnica de controle inteligente o procedimento de repetição da busca pela configuração do campo externo é feita sempre em uma nova amostra molecular. Geralmente para esta técnica, a amostra é preparada utilizando-se feixes moleculares. Já na técnica de controle com resposta, o campo é reconfigurado na mesma amostra molecular. Deste modo, a amostra molecular geralmente fica contida em um recipiente a baixa pres-

¹³Para essa tarefa vem-se demandando consideráveis esforços teóricos a pelo menos uma década.

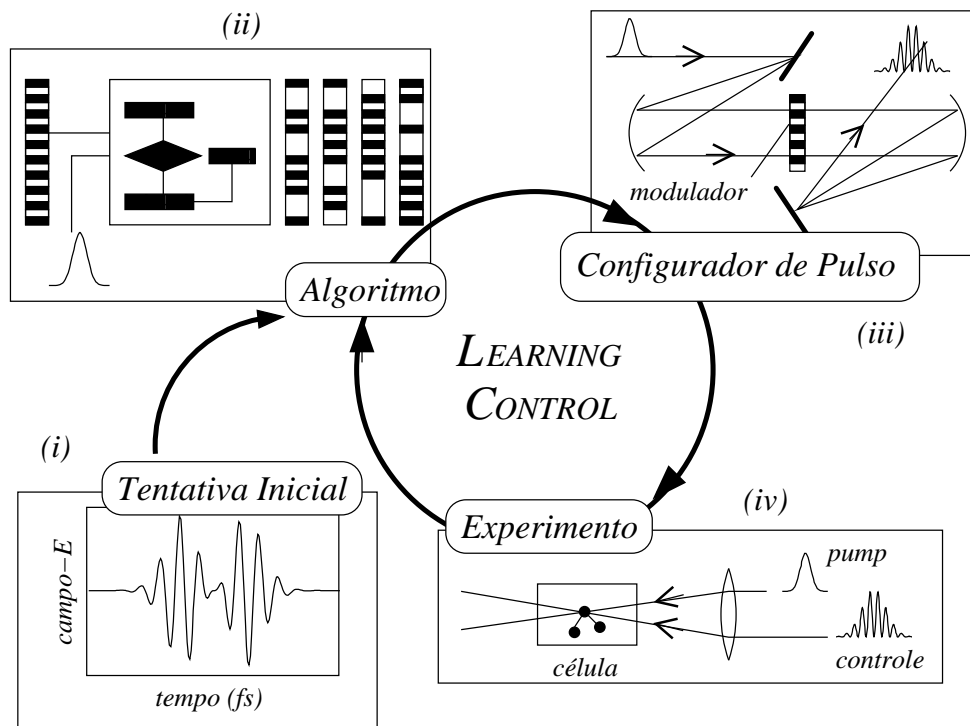


Fig. 1.3: Esta figura mostra esquematicamente o método de controle de ciclo fechado. Em (i) um campo tentativa é introduzido e em (ii) as componentes espectrais que compõem este pulso são determinadas. Estas informações são enviadas para um modulador óptico (iii) que configurará o pulso. Após a configuração do pulso eletromagnético, o mesmo é redirecionado para a amostra molecular (iv). A amostra pode ser uma célula contendo as moléculas em baixa pressão ou um feixe molecular. Esta figura foi adaptada da Ref. [12].

são. Essas duas técnicas possuem características bem distintas, e os elementos gerais que estão envolvidos nessas duas técnicas de controle são mostrados na Fig. 1.3. O procedimento completo envolve quatro partes: (i) uma configuração tentativa para o pulso de laser de entrada, (ii) o algoritmo de aprendizagem que calcula a forma do próximo pulso de controle e determina as componentes espectrais necessárias para a geração do mesmo, e finalmente em (iii) a geração do pulso eletromagnético em laboratório que posteriormente (iv) será aplicado na amostra molecular. Essas quatro partes devem ser aplicadas em ciclo até que se atinja o objetivo molecular. Observe que as partes (i) e (ii) possuem um forte apelo teórico, porque tanto a configuração, quanto as expressões que são usadas na composição do algoritmo, vêm dos avanços

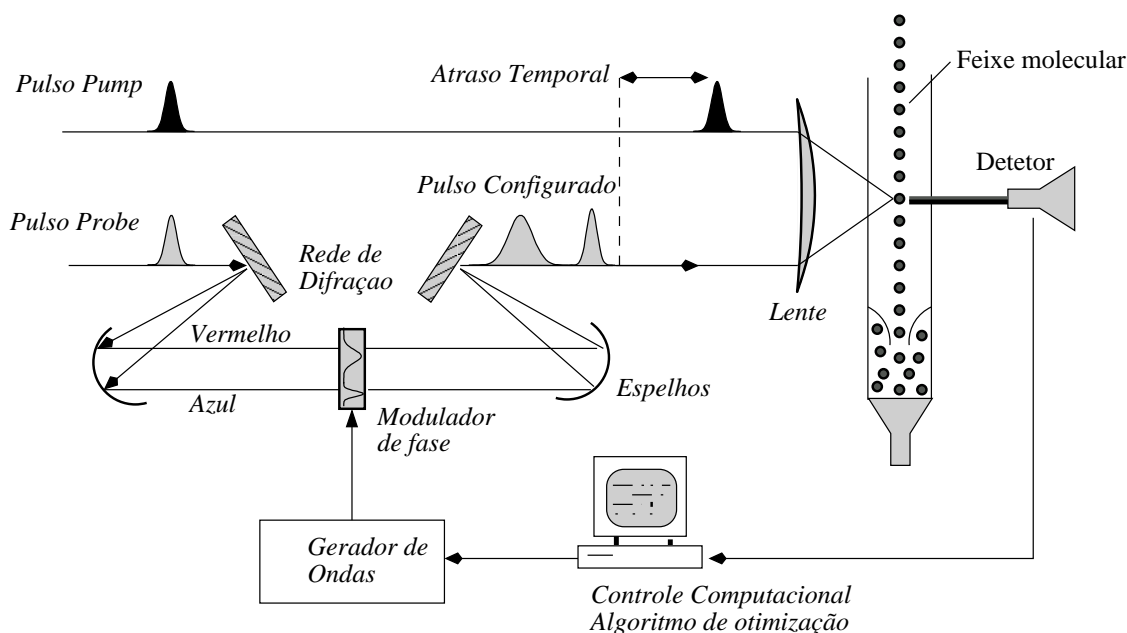


Fig. 1.4: Exemplo típico de um experimento de quebra molecular [21, 46]. Esta figura foi adaptada das Refs. [7, 20].

dos atuais métodos e modelos teóricos. Já as partes (iii) e (iv) estão relacionadas fortemente com os avanços tecnológicos experimentais, tais como, inovações na fonte de luz laser e nos moduladores de amplitude e de fase¹⁴.

A seguir vamos descrever com mais detalhes um esquema experimental típico de controle de quebra molecular ¹⁵. A montagem é constituída basicamente de um laser pulsado (com duração típica de ~ 100 fs), um modulador de fase, e um detetor (como por exemplo, um espectrômetro de massa). O objetivo do experimento é encontrar o campo elétrico do laser que otimiza a quebra molecular. Acompanhe na sequência os passos ilustrados na Fig. 1.4.

¹⁴As técnicas mais modernas geralmente empregam laser de femtosegundo e moduladores acusto-óptico (*Acousto-Optical Modulator* - AOM) ou modulares de cristal líquido (*Liquid Cristal Modulator* - LCM) para a configuração do campo.

¹⁵Devemos esclarecer que os elementos que compõem a montagem experimental variam de acordo com o experimento em estudo. A figura ilustra apenas os principais elementos de um experimento de controle.

Inicialmente uma fonte de luz laser produz um único pulso de luz ultracurto no domínio tempo; este pulso é então dividido em dois pulsos secundários denominados *pump* e *probe*, o primeiro segue livremente o seu caminho enquanto o segundo atinge uma rede de difração. A rede de difração dispersa o pulso em diferentes cores (componentes espectrais), denotados esquematicamente na figura como um feixe indo do azul ao vermelho¹⁶, sendo que cada componente espectral passa através de um modulador de fase. Este dispositivo permite variar espacialmente o índice de refração do meio, de modo que cada componente espectral, quando atravessa o dispositivo, sofre um atraso em sua fase [45]. Após passar através do modulador de fase as componentes são colimadas novamente em um único feixe; devido à diferença de fase introduzida pelo modulador o pulso adquire uma configuração diferente da forma inicial. Por causa da diferença de caminho ótico o pulso *probe* é atrasado em relação ao *pump*, como ilustrado na figura; deste modo, o pulso *pump* atinge a molécula primeiro colocando-a em um estado de superposição (preparação do estado quântico) e, após um atraso temporal o segundo pulso (*probe*), já configurado, atinge a molécula. O resultado deste processo de interação é então coletado no detector. Caso o objetivo molecular tenha sido atingido, o processo é cessado, caso contrário, os dados coletados no detector, bem como a configuração atual do campo elétrico, são fornecidos a um algoritmo de otimização que calcula como deve ser a nova configuração do campo elétrico, e o resultado desde cálculo é passado para um gerador de ondas que envia um sinal para que o modulador ótico reconfigure o campo. Este processo se repete até que se atinja o objetivo molecular, ou seja, até que a quebra molecular atinja o seu melhor resultado.

¹⁶Aqui, o azul e o vermelho é meramente uma convenção, pois em algumas montagens experimentais são usados outras faixas do espectro, tais como, infravermelho, ultravioleta, raio-x, *etc*, além de a decomposição espectral depender das características do pulso original.

1.6 OBJETIVO E ESTRUTURA DA TESE

Desde o trabalho pioneiro desenvolvido em 1985 por D. J. Tannor e S. A. Rice [13], temos presenciado avanços na área do controle quântico; passando pelas primeiras realizações experimentais em 1989, mostrando a eficiência desse tipo de controle na quebra molecular [15], até a proposta de um novo procedimento de controle que culminou no atual e complexo campo de estudos denominado controle ótimo [44]. O estado da arte nesse campo de estudo aponta para novos procedimentos de controle em sistemas quânticos grandes, como por exemplo, em pontos quânticos, a fim de criar novos dispositivos com possíveis aplicações práticas, tais como, em computação quântica [22, 39, 40, 47–52].

Deste modo, o objetivo central da tese consiste em desenvolver um controle quântico paramétrico integrado às técnicas usuais de controle inverso. Para isso, o método exige a construção de um Hamiltoniano que descreva apropriadamente a interação entre o sistema que se deseja controlar e o campo externo de controle, para então, realizar o controle manipulando-se temporalmente esses parâmetros externos. Uma clara vantagem deste procedimento é que, uma vez resolvido o problema do controle para esse Hamiltoniano paramétrico, os resultados podem ser aplicados quase que diretamente para qualquer outro sistema físico que seja descrito por esse Hamiltoniano, restando então a tarefa de identificar e relacionar os parâmetros desse potencial com um campo físico externo real. O método de controle desenvolvido nesta tese é baseado em um protocolo de controle independente do tempo por partes, desta forma, a dinâmica temporal é obtida através da aplicação de uma seqüência de passos de controle. Este ponto é importante porque ganhamos a liberdade de escolher o número de passos de controle, e dessa maneira podemos adaptar o método levando em conta o problema de interesse. A partir daí, desenvolvemos um novo procedimento de controle com possíveis empregos em bilhares quânticos e problemas correlatos. Além disso, a tese objetiva propor ferramentas de controle em um regime de campos intensos.

A tese, em sua totalidade, é constituída por cinco capítulos, além de uma parte endereçada às conclusões e perspectivas. O título de cada capítulo indica cada assunto abordado. Em princípio, todos os capítulos podem ser lidos mais ou menos independentemente e, caso seja necessário, apontaremos para informações localizadas em outras partes da tese. A seguir apresentamos a relação dos capítulos.

CAPÍTULO 1 : Apresentamos uma revisão bibliográfica e fizemos uma breve introdução histórica acerca do controle quântico.

CAPÍTULO 2 : Para este capítulo propusemos a obtenção do controle do valor esperado de um observável por meio de um campo elétrico estático independente do tempo por partes. O foco neste problema é compreender como o campo externo interfere na dinâmica do pacote de ondas gerado pela superposição de dois níveis e observar como o surgimento de erros interferem na qualidade do controle [51].

CAPÍTULO 3 : Neste capítulo utilizamos a técnica do controle inverso para controlar a dinâmica temporal em um sistema constituído por três níveis [53]. Com isso, mostramos como o controle pode ser realizado mesmo em sistemas nos quais soluções analíticas não são mais disponíveis. Para o controle utilizamos o protocolo de controle independente do tempo por partes de maneira similar ao procedimento utilizado na Ref. [51].

CAPÍTULO 4 : Para o bilhar circular, objetivamos estudar o efeito do campo magnético em um regime de campos intensos para a recuperação dos padrões de reconstrução de um pacote de ondas Gaussiano. Observamos também como os efeitos de incoerências nas energias interferem nesses padrões de reconstrução [54].

CAPÍTULO 5 : Para o estudo do espalhamento de um pacote de ondas por um potencial de contato mostramos como podemos alterar a taxa de transmissão e de reflexão através do “controle” da velocidade desse potencial [55].

Procuramos também acrescentar ao longo do texto algumas demonstrações e exemplos que achamos serem importantes para auxiliar o leitor no entendimento deste trabalho. Esses complementos, em sua grande maioria, ajudam na dedução de uma equação ou no entendimento de um conceito físico. Porém, o leitor pode sentir-se livre para pular essas deduções e exemplos, uma vez que os mesmos não constituem uma parte indispensável do texto.

CONTROLE QUÂNTICO EM UM SISTEMA DE DOIS NÍVEIS

Neste capítulo apresentaremos um método de controle geral, e matematicamente simples, para um sistema de dois níveis. Tal método é baseado em um procedimento no qual os parâmetros externos são independentes do tempo em um certo intervalo Δt . Admitimos também que a troca nos valores dos parâmetros entre um intervalo Δt_j e Δt_{j+1} possa ser realizada “rapidamente”. O controle é realizado determinando-se apropriadamente os valores dos parâmetros que conduzirá à dinâmica temporal do valor esperado de um observável arbitrário por um caminho previamente definido. A busca dos parâmetros de controle é feita através de uma equação algébrica, ao invés de uma equação diferencial ou integral. Como exemplo, aplicamos o método para produzir rápidas variações no valor esperado do observável e também para atingir os extremos da janela de controle. Discutimos também alguns aspectos técnicos, bem como a robustez do método mediante erros nos valores dos parâmetros de controle.

A manipulação e o controle de processos quânticos estão entre os desafios atuais e futuros da física e da química, e têm recebido considerável atenção teórica

e experimental [12, 45]. Parte do entusiasmo na área vem dos rápidos avanços na fabricação de lasers de pulsos ultracurtos, tornando possível produzir efeitos de interferências diretamente em sistemas atômicos e moleculares [13, 15, 26, 56, 57], para possíveis aplicações em matéria condensada [40, 58, 59], na condução de reações químicas [23, 60], em implementações de qubits para a computação quântica [39, 50], entre outras.

Aliados a esses rápidos progressos experimentais, esforços têm sido feitos rumo ao desenvolvimento de procedimentos teóricos mais eficazes na busca por soluções de campo de controle. A meta é desenvolver métodos rápidos e precisos que predigam como um dado sistema quântico evoluirá sob a ação de um potencial externo “configurável”, como por exemplo, um campo eletromagnético. A partir daí, podemos tirar proveito deste campo configurável para conduzir apropriadamente a evolução temporal do sistema físico em questão. Obviamente um certo grau de intuição física é útil nesta tarefa [33]; no entanto, anos de pesquisas mostram que, de fato, análises matemáticas mais sólidas são necessárias para estabelecer as condições para o controle quântico [31, 32, 61, 62].

Como contribuição neste campo de estudos, propomos um procedimento geral para o controle quântico, na qual baseia-se no protocolo de solução de um problema inverso. Não obstante, o método apresenta duas grande vantagens: a sua simplicidade matemática, e — quase como consequência da primeira — a maior facilidade de implementação computacional¹. De fato, evitamos técnicas comumente empregadas, tais como, maximização de funcional ou solução de um conjunto de equações diferenciais dependentes do tempo. O “truque” é implementar o controle através de um potencial externo U , que depende de um conjunto de parâmetros $\{\lambda_n\}$. Os λ_n 's são modificados para os valores apropriados no instante de tempo t_j , quando então são mantidos constantes durante o intervalo de tempo Δt_j . Portanto,

¹Embora enunciamos este método como tendo algumas facilidades frente a outros já estabelecidos na literatura, é nosso dever notificar ao leitor que sua real implementação requer muitos cuidados práticos, tornando-se claro o desafio da busca por soluções de problemas inversos.

em cada intervalo de tempo Δt_j teremos um problema independente do tempo, com possível solução analítica. Configurando apropriadamente os tempos e os valores dos parâmetros, podemos conduzir adequadamente a evolução temporal de uma certa grandeza física intrínseca do sistema. Além das vantagens matemáticas, o método permite um panorama claro de todas as características físicas envolvidas no processo de controle, as quais muitas vezes estão escondidas em sofisticadas descrições matemáticas. Devemos mencionar que uma idéia similar, mas usada em um contexto diferente, foi aplicada na investigação de um sistema de dois níveis (*black-box*) em um processo de tomografia quântica (*quantum tomography*) [63].

Através deste capítulo as derivações, resultados, e exemplos são focados num sistema de dois níveis. Este sistema foi escolhido devido a sua importância prática, tendo em vista que uma gama de fenômenos podem ser descritos e controlados em termos de um sistema de dois níveis [15, 36, 40, 63–68]. Mesmo em casos onde o problema é efetivamente um sistema de muitos níveis [69–72], uma idealização por um problema de dois níveis muitas vezes torna-se adequada². Além disso, um sistema de dois níveis nos permite realizar o controle com um número mínimo de parâmetros, dois ou eventualmente apenas um. Deste modo, podemos introduzir o método sem a necessidade de utilizar um espaço de parâmetros multidimensional. O protocolo, no entanto, pode ser aplicado igualmente bem em situações mais gerais, como será visto nos Capítulos 3 e 4.

2.1 O MÉTODO

Considere um sistema quântico com Hamiltoniano interno H_0 preparado em um estado inicial $|\Psi_0\rangle$, o qual pode ser descrito como a superposição de dois vetores de base $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (bases de H_0), tal que $|0\rangle$ denota o estado fundamental

²É claro que há casos onde devemos abandonar completamente esta idealização frente a um modelo mais adequado para tratar o sistema físico. Por exemplo, para tratar efeitos de aprisionamento quântico e transparência, um sistema constituído por três níveis é mais apropriado.

com energia E_0 , e $|1\rangle$ o estado excitado com energia E_1 . Em $t = t_j$ um campo externo começa a interagir com o sistema, fazendo-o evoluir de um estado caracterizado por $|\Psi(t_j)\rangle = C_0(t_j)|0\rangle + C_1(t_j)|1\rangle$ para $|\Psi(t)\rangle = C_0(t)|0\rangle + C_1(t)|1\rangle$, segundo a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle, \quad \text{para} \quad H = \begin{pmatrix} E_0 & u e^{-i\varphi} \\ u e^{i\varphi} & E_1 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

sendo H o Hamiltoniano que descreve a interação entre o campo externo e o sistema ($H = H_0 + U$). O acoplamento entre o campo e o sistema, e a forma desse campo, são descritos pelos parâmetros u e φ . Esses são os parâmetros de entrada que desejamos configurar para a realização do controle quântico. Da Eq. (2.1) vemos que $\langle n|U|n\rangle = 0$ ($n = 0, 1$). Este é o caso típico quando os estados não perturbados possuem paridade definida, e o potencial é ímpar — esta é uma situação típica de interação dipolar, como mostra o exemplo abaixo.

Exemplo

Tomemos como um exemplo um oscilador harmônico³, tal que os estados próprios do sistema não perturbado são caracterizados pela equação:

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = 2^{-n/2} (n!)^{-1/2} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right).$$

Se o operador de dipolo elétrico for aproximado por $\hat{\mu} \approx x$, então os elementos de matriz podem ser escritos como $U_{nk} = \langle n|\hat{\mu} \cdot \epsilon|k\rangle = \langle n|x|k\rangle \epsilon$, sendo

$$\langle n|x|k\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) x \psi_k(x) dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{k,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{k,n+1} \right].$$

Observe agora que se $n = k$ então $\delta_{n,n-1} = \delta_{n,n+1} = 0$, na qual obtemos

$$\langle n|x|n\rangle = 0, \quad ,$$

³Veja como referência o capítulo 5 do livro *Quantum Mechanics* de Eugen Merzbacher [73].

e portanto $U_{nn} = 0$, como queríamos mostrar. Este é um caso típico de moléculas sem momento de dipolo elétrico permanente⁴.

Além disso, os parâmetros que aparecem em U podem ser relacionados com os parâmetros de saída de um laser, como por exemplo, a intensidade e a fase do campo eletromagnético, que estão diretamente relacionados com $0 \leq u \leq +\infty$ e $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ através da equação: $\langle 1|U|0\rangle = u \exp(i\varphi)$. Esta reparametrização será útil porque nos permitirá discutir o método simplesmente em termos de u e φ .

2.1.1 A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Quando mencionamos a solução da equação de Schrödinger, estamos nos referindo à obtenção das energias próprias e dos estados próprios do sistema quando o mesmo interage com um potencial externo. Se os parâmetros externos u e φ são independentes do tempo, podemos simplesmente resolver a equação: $H|\Psi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\Psi_{\pm}\rangle$; e a solução torna-se agora um problema de valores próprios, tais que $|\Psi_{\pm}\rangle$ denotam os dois estados próprios, cuja energia é E_{\pm} , obtidos da diagonalização da matriz (2.1). Na Fig. 2.1 mostramos as energias próprias E_{\pm} em função do campo externo aplicado. Uma dedução das expressões para os estados e para as energias próprias pode ser encontrada na Ref. [74]⁵, sendo

$$E_{\pm} = \frac{(E_1 + E_0) \pm \Gamma}{2} \quad , \quad \Gamma = \sqrt{4u^2 + (E_1 - E_0)^2} \quad , \quad (2.2)$$

e os estados próprios escritos na base de H_0 são

$$\begin{aligned} |\Psi_{+}\rangle &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\frac{\varphi}{2}}|0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\frac{\varphi}{2}}|1\rangle \quad , \\ |\Psi_{-}\rangle &= -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\frac{\varphi}{2}}|0\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\frac{\varphi}{2}}|1\rangle \quad , \end{aligned}$$

⁴Uma rápida discussão sobre o tema pode ser encontrada na pág. 460 da Ref. [73].

⁵Ver Capítulo IV, pág. 420-423, *Quantum Mechanics* de C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë.

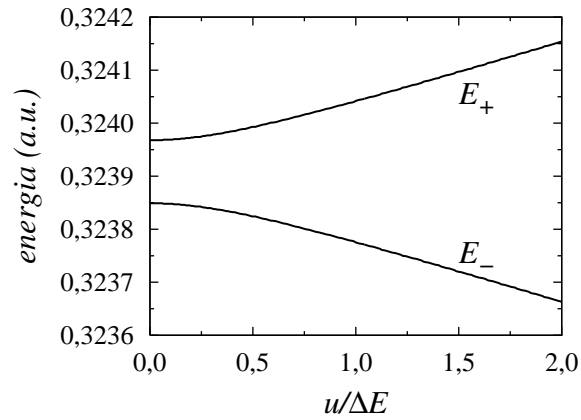


Fig. 2.1: Variação de energia E_+ e E_- com relação ao campo aplicado $u/\Delta E$ para $\Delta E = E_1 - E_0$. Na ausência do campo externo os níveis de energia convergem para $E_0 = 0,323849$ a.u. e $E_1 = 0,323968$ a.u.. Para campos intensos as energias aproximam-se assintoticamente de um regime linear.

sendo

$$\tan(\theta) = \frac{2u}{E_0 - E_1} \quad .$$

2.1.2 O ESTADO QUÂNTICO

Considere um sistema quântico, devidamente preparado em um estado inicial $|\Psi(t = t_0)\rangle = C_0(t_0)|0\rangle + C_1(t_0)|1\rangle$. O nosso objetivo será determinar o estado final $|\Psi(t)\rangle$ quando o sistema está sob a ação do campo externo. O estado quântico, representado na base $\{|\Psi_-\rangle, |\Psi_+\rangle\}$ (base estacionária de H) é dado por

$$|\Psi(t)\rangle = C_- e^{-iE_-t/\hbar}|\Psi_-\rangle + C_+ e^{-iE_+t/\hbar}|\Psi_+\rangle \quad . \quad (2.4)$$

Escrevendo a Eq. (2.4) na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ e relacionando C_+ e C_- com os coeficientes $C_0(t_0)$ e $C_1(t_0)$ chegamos à seguinte expressão

$$|\Psi(t)\rangle = C_0(t)|0\rangle + C_1(t)|1\rangle \quad , \quad (2.5)$$

sendo

$$C_0(t) = C_0(t_0) \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} e^{-iE_+\Delta t/\hbar} + \sin^2 \frac{\theta}{2} e^{-iE_-\Delta t/\hbar} \right) + \frac{C_1(t_0)}{2} \sin \theta e^{-i\varphi} (e^{-iE_+\Delta t/\hbar} - e^{-iE_-\Delta t/\hbar}) \quad , \quad (2.6a)$$

$$C_1(t) = C_1(t_0) \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} e^{-iE_+\Delta t/\hbar} + \cos^2 \frac{\theta}{2} e^{-iE_-\Delta t/\hbar} \right) + \frac{C_0(t_0)}{2} \sin \theta e^{i\varphi} (e^{-iE_+\Delta t/\hbar} - e^{-iE_-\Delta t/\hbar}) \quad . \quad (2.6b)$$

Nesta expressão $\Delta t = t - t_0$, $\tan \theta = 2u/(E_0 - E_1)$ para $(0 \leq \theta < \pi)$, $C_0(t_0) = r_0 e^{i\sigma_0}$ e $C_1(t_0) = r_1 e^{i\sigma_1}$, tal que $|C_0(t_0)|^2 + |C_1(t_0)|^2 = 1$. Essas expressões descrevem completamente a dinâmica quântica de um sistema de dois níveis quando u e φ são independentes do tempo.

Porém, em controle quântico, constantemente precisamos ajustar um potencial de interação para conduzir corretamente $|\Psi(t)\rangle$. Se o potencial de interação muda continuamente no tempo, isto é, $H = H(t)$, então, o vetor de estado é calculado através da equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H(t) |\Psi\rangle \quad , \quad (2.7)$$

ao invés da fórmula descrita pelas Eqs. (2.6). Nesse caso, o estudo do controle freqüentemente demandará uma análise teórica relativamente avançada para determinar a melhor forma de $U(t)$ para a busca do comportamento da evolução do estado. Nossa meta aqui ainda é controlar a evolução temporal do sistema ajustando temporalmente os parâmetros relevantes do potencial. No entanto, para evitar complicações técnicas, tais como, resolver um conjunto de equações diferenciais acopladas, propomos um procedimento de controle independente do tempo por partes. Para tal, admitiremos que em um determinado instante t_j podemos variar muito rapidamente u e φ para um valor específico u_j e φ_j , para em seguida mantê-los constantes durante o intervalo de tempo $\Delta t_{j+1} = t_{j+1} - t_j$ ($j = 0, 1, 2, \dots$). Aqui, “muito rapidamente” significa que o tempo transcorrido para a transição $u_{j-1}, \varphi_{j-1} \rightarrow u_j, \varphi_j$, é muito menor que qualquer tempo característico do sistema (veja a Seção 2.3 para

mais detalhes). Admitindo essa hipótese, $|\Psi(t)\rangle$ para cada intervalo de tempo Δt_{j+1} é dado pela Eq. (2.6), sendo

$$u = u_j \quad , \quad \varphi = \varphi_j \quad , \quad e \quad t_0 \rightarrow t_j \quad . \quad (2.8)$$

A descrição feita acima assegura que as mudanças repentinas nos valores dos parâmetros nos permitem obter $|\Psi(t_j^+)\rangle$ a partir de $|\Psi(t_j^-)\rangle$ mediante a projeção do estado $|\Psi(t_j^-)\rangle$ no “novo” estado de H em $t_j < t < t_{j+1}$ (aqui, t_j^+ (t_j^-) significa um instante imediatamente depois (antes) de $t = t_j$). Em outras palavras, o estado final no intervalo Δt_j será o estado inicial para o intervalo Δt_{j+1} . Este procedimento é ilustrado na Fig. 2.2.

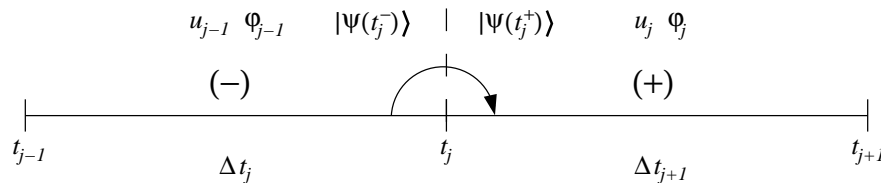


Fig. 2.2: No primeiro passo de controle (-) o sistema evolui de um estado qualquer em $t = t_{j-1}$ para o estado $|\Psi(t_j^-)\rangle$ sob a ação de um campo caracterizado por u_{j-1}, φ_{j-1} . Neste ponto, o estado quântico é projetado para o intervalo de tempo seguinte ($|\Psi(t_j^+)\rangle$). A partir daí, o sistema evolui até $t = t_{j+1}$ sob a ação do novo campo u_j, φ_j .

Portanto, no presente protocolo de controle precisamos determinar os conjuntos $\{t_1; t_2; \dots\}$ e $\{u_1, \varphi_1; u_2, \varphi_2; \dots\}$ que conduzirão o sistema apropriadamente para o estado $|\Psi(t)\rangle$.

2.2 O VALOR ESPERADO DE UM OBSERVÁVEL

Geralmente, o objetivo principal em se controlar um estado quântico é obter um valor esperado específico para um observável de interesse, representado pelo operador V . Em outras palavras, queremos obter um certo valor \tilde{S} para $S(t) = \langle \Psi(t) | V | \Psi(t) \rangle$ em $t = \tilde{t}$. Lembrando que $S(t)$ está restrito à janela de controle $v_- \leq S(t) \leq v_+$, sendo v_{\pm} os dois valores próprios do operador Hermiteano V .

Supondo que o operador V seja escrito na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, então o valor esperado do observável é calculado através da seguinte equação

$$S(t) = \langle \Psi(t) | V | \Psi(t) \rangle \quad \text{para} \quad V = \begin{pmatrix} v_0 & v e^{-i\alpha} \\ v e^{i\alpha} & v_1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

com v_0, v_1, v e α reais e $0 \leq \alpha < 2\pi$.

Para um sistema independente do tempo o vetor de estado é dado pela Eq. (2.5), e substituindo esta equação em (2.9) obtemos

$$S(t) = |C_0(t)|^2 v_0 + |C_1(t)|^2 v_1 + 2v \operatorname{Re}\{C_0^*(t)C_1(t) \exp[-i\alpha]\} \quad . \quad (2.10)$$

Substituindo agora a forma explícita de $C_0(t)$ e $C_1(t)$ (Eqs. (2.6a) e (2.6b)) na Eq. (2.10), e escrevendo a dependência temporal dos termos $|C_0(t)|^2$, $|C_1(t)|^2$ e $C_0^*(t)C_1(t)$ em termos das funções trigonométricas $\operatorname{sen}[\omega(t - t_0)]$ e $\operatorname{cos}[\omega(t - t_0)]$ para $\omega = (E_+ - E_-)/\hbar$, temos

$$S(t) = V_0 + V_1 \operatorname{sen}[\omega(t - t_0)] + V_2 \operatorname{cos}[\omega(t - t_0)] \quad , \quad (2.11)$$

tal que os coeficientes V_j na Eq. (2.11) são dados pelas seguintes equações

$$\begin{aligned} V_0 &= (v_0 r_0^2 + v_1 r_1^2)(\operatorname{cos}^4[\theta/2] + \operatorname{sen}^4[\theta/2]) + (v_0 r_1^2 + v_1 r_0^2)\operatorname{sen}^2[\theta]/2 \\ &+ (v_0 - v_1)r_0 r_1 \operatorname{cos}[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi](\operatorname{cos}^2[\theta/2] - \operatorname{sen}^2[\theta/2])\operatorname{sen}[\theta] \\ &+ v r_0 r_1 \operatorname{cos}[\sigma_0 - \sigma_1 + \alpha]\operatorname{sen}^2[\theta] + v r_0 r_1 \operatorname{cos}[\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi - \alpha]\operatorname{sen}^2[\theta] \\ &+ v(r_0^2 - r_1^2) \operatorname{cos}[\varphi - \alpha](\operatorname{cos}^2[\theta/2] - \operatorname{sen}^2[\theta/2])\operatorname{sen}[\theta] \quad , \\ V_1 &= v(r_0^2 - r_1^2)\operatorname{sen}[\varphi - \alpha]\operatorname{sen}[\theta] - (v_0 - v_1)r_0 r_1 \operatorname{sen}[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi]\operatorname{sen}[\theta] \\ &+ 2v r_0 r_1 \operatorname{sen}[\sigma_0 - \sigma_1 + \alpha](\operatorname{cos}^4[\theta/2] - \operatorname{sen}^4[\theta/2]) \quad , \\ V_2 &= (v_0 - v_1)(r_0^2 - r_1^2)\operatorname{sen}^2[\theta]/2 \\ &- v(v_0^2 - v_1^2) \operatorname{cos}[\varphi - \alpha](\operatorname{cos}^2[\theta/2] - \operatorname{sen}^2[\theta/2])\operatorname{sen}[\theta] \\ &- (v_0 - v_1)r_0 r_1 \operatorname{cos}[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi](\operatorname{cos}^2[\theta/2] - \operatorname{sen}^2[\theta/2])\operatorname{sen}[\theta] \\ &+ 2r_0 r_1 \operatorname{cos}[\sigma_0 - \sigma_1 + \alpha](\operatorname{cos}^4[\theta/2] + \operatorname{sen}^4[\theta/2]) \\ &- v r_0 r_1 \operatorname{cos}[\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi - \alpha]\operatorname{sen}^2[\theta] \quad . \end{aligned} \quad (2.12)$$

A obtenção destas equações é um pouco extensa, no entanto, no intuito de auxiliar o leitor realizamos algumas passagens intermediárias na demonstração na pág 38.

Note que o período característico de oscilação do valor esperado do observável (Eq. (2.11)) é, $\tau = 2\pi/\omega$, que depende somente da frequência de Rabi ($\omega = \sqrt{4u^2 + (E_1 - E_0)^2/\hbar}$). Então, rápidas variações no valor esperado do observável estão relacionadas com acentuadas variações em u .

Para encontrar os valores específicos de u , φ e $t = \tilde{t}$, que conduzem o sistema a um certo alvo \tilde{S} , colocamos este alvo como uma entrada na Eq. (2.11), isto é, fazemos $S(t) = \tilde{S}$ e resolvemos esta equação para u e φ . Apesar da expressão (2.11) parecer um pouco complicada, a sua solução numérica é direta, pois o que temos na realidade é uma equação polinomial trigonométrica. O procedimento para impor uma “trajetória” específica $S(t)$ é o seguinte:

1. O primeiro passo é definir o conjunto de intervalos de tempo $\{\Delta t_j\}$. Na prática, sua escolha está relacionada com os detalhes de quão rápido os parâmetros do Hamiltoniano podem variar, como por exemplo, o tempo de resposta determinado por um campo externo de um laser; e o quão próximo da trajetória alvo o sistema deve estar para uma determinada aplicação.
2. O segundo passo é escolher \tilde{t} . Para cada Δt_j , escolhemos um \tilde{t} para o qual $S(\tilde{t})$ atinge o valor desejado \tilde{S} . O valor exato de \tilde{t} não é muito importante, desde que Δt_j seja pequeno o suficiente. Em nossas simulações sempre fizemos $\tilde{t} = t_{j+1}^-$.
3. Finalmente, resolvemos apropriadamente a Eq. (2.11), no tempo $t = \tilde{t}$, com o intuito de encontrar os valores correspondentes de u e φ .

O controle quântico é obtido dos cálculos do conjunto de parâmetros u e φ . É claramente observado, das discussões prévias, que a “qualidade” do controle está relacionada com a razão entre o tempo Δt_j em cada passo de controle j e o período de Rabi τ . Para que tenhamos um controle mais apurado é necessário que $\Delta t_j < \tau$.

Observamos que a nossa abordagem do controle está de acordo com o controle obtido com outros métodos, tais como os apresentados nas Ref. [26,33,34], porém os métodos descritos nas referências demandam métodos numéricos mais complicados.

Demonstração

Vamos fazer aqui a dedução das expressões (2.11) e (2.12). O objetivo é obter uma expressão geral para o cálculo do valor esperado do observável V (Eq. (2.9)). O estado do sistema em um instante t foi calculado na expressão (2.5), portanto, vamos iniciar a dedução partindo da expressão geral para $S(t)$,

$$\begin{aligned} S(t) &= \langle \Psi(t) | V | \Psi(t) \rangle \\ &= \begin{pmatrix} C_0^*(t) & C_1^*(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_0 & v e^{-i\alpha} \\ v e^{i\alpha} & v_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0(t) \\ C_1(t) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} S(t) &= |C_0(t)|^2 v_0 + |C_1(t)|^2 v_1 + C_0^*(t) C_1(t) v \exp(i\alpha) + C_0(t) C_1^*(t) v \exp(-i\alpha) \\ &= |C_0(t)|^2 v_0 + |C_1(t)|^2 v_1 + 2v \operatorname{Re}\{C_0^*(t) C_1(t) \exp(-i\alpha)\} \quad . \end{aligned} \quad (2.14)$$

Substituindo as Eqs. (2.6a) e (2.6b) em (2.14) obtem-se

$$\begin{aligned} |C_0(t)|^2 &= r_0^2(\cos^4[\theta/2] + \sin^4[\theta/2]) + r_1^2 \sin^2[\theta]/2 \\ &+ r_0 r_1 \sin[\theta](\cos^2[\theta/2] - \sin^2[\theta/2]) \cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi] \\ &+ (r_0^2 - r_1^2) \sin^2[\theta] \cos[\omega(t - t_0)]/2 \\ &- r_0 r_1 \sin[\theta] \cos^2[\theta/2] \cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi - \omega(t - t_0)] \\ &+ r_0 r_1 \sin[\theta] \sin^2[\theta/2] \cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi + \omega(t - t_0)] \quad , \\ |C_1(t)|^2 &= r_1^2(\cos^4[\theta/2] + \sin^4[\theta/2]) + r_0^2 \sin^2[\theta]/2 \\ &- r_0 r_1 \sin[\theta](\cos^2[\theta/2] - \sin^2[\theta/2]) \cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi] \\ &+ (r_1^2 - r_0^2) \sin^2[\theta] \cos[\omega(t - t_0)]/2 \\ &+ r_0 r_1 \sin[\theta] \cos^2[\theta/2] \cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi - \omega(t - t_0)] \\ &- r_0 r_1 \sin[\theta] \sin^2[\theta/2] \cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi + \omega(t - t_0)] \quad , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_0^*(t)C_1(t) &= r_0r_1\text{sen}^2[\theta]\exp[-i(\sigma_0 - \sigma_1)]/2 + r_0r_1\text{sen}^2[\theta]\exp[i(\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi)]/2 \\
&+ (r_0^2 - r_1^2)\text{sen}[\theta](\cos^2[\theta/2] - \text{sen}^2[\theta/2])\exp[i\varphi]/2 \\
&+ r_0r_1\cos^4[\theta/2]\exp[-i(\sigma_0 - \sigma_1 - \omega(t - t_0))] \\
&+ r_0r_1\text{sen}^4[\theta/2]\exp[-i(\sigma_0 - \sigma_1 + \omega(t - t_0))] \\
&- r_0r_1\text{sen}^2[\theta]\exp[i(\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi + \omega(t - t_0))]/4 \\
&- r_0r_1\text{sen}^2[\theta]\exp[i(\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi - \omega(t - t_0))]/4 \\
&- (r_0^2 - r_1^2)\text{sen}[\theta]\cos^2[\theta/2]\exp[i(\varphi + \omega(t - t_0))]/2 \\
&+ (r_0^2 - r_1^2)\text{sen}[\theta]\text{sen}^2[\theta/2]\exp[i(\varphi - \omega(t - t_0))]/2 .
\end{aligned}$$

Substituindo as expressões acima em (2.14), e separando os termos que contem as dependências temporais, obtemos:

$$\begin{aligned}
S(t) &= A_0 + \{A_1 + (A_2 + A_3)\cos[\varphi + \alpha] \\
&+ (A_4 + A_5)\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi] + (A_6 + A_7)\cos[\sigma_0 - \sigma_1 - \alpha] \\
&+ (A_8 + A_9)\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi + \alpha]\}\cos[\omega(t - t_0)] \\
&+ \{(A_2 - A_3)\text{sen}[\varphi + \alpha] + (A_4 - A_5)\text{sen}[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi] \\
&+ (A_6 - A_7)\text{sen}[\sigma_0 - \sigma_1 - \alpha] \\
&+ (A_8 - A_9)\text{sen}[\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi + \alpha]\}\text{sen}[\omega(t - t_0)]
\end{aligned} \tag{2.15}$$

tal que os coeficientes A_n que aparecem nesta expressão são dados por:

$$\begin{aligned}
A_0 &= (v_0r_0^2 + v_1r_1^2)(\cos^4[\theta/2] + \text{sen}^2[\theta/2]) + (v_0r_1^2 + v_1r_0^2)\text{sen}^2[\theta]/2 \\
&+ (v_0 - v_1)r_0r_1\text{sen}[\theta](\cos^2[\theta/2] - \text{sen}^2[\theta/2])\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi] \\
&+ vr_0r_1\text{sen}^2[\theta]\cos[\sigma_0 - \sigma_1 - \alpha] + vr_0r_1\text{sen}^2[\theta]\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi + \alpha] \\
&+ v(r_0^2 - r_1^2)\text{sen}[\theta](\cos^2[\theta/2] - \text{sen}^2[\theta/2])\cos[\varphi + \alpha] \\
A_1 &= (v_0 - v_1)(r_0^2 - r_1^2)\text{sen}^2[\theta]/2 \\
A_2 &= v(r_0^2 - r_1^2)\text{sen}[\theta]\text{sen}^2[\theta/2] \\
A_3 &= -v(r_0^2 - r_1^2)\text{sen}[\theta]\cos^2[\theta/2] \\
A_4 &= -(v_0 - v_1)r_0r_1\text{sen}[\theta]\cos^2[\theta/2]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_5 &= (v_0 - v_1)r_0r_1\text{sen}[\theta]\text{sen}^2[\theta/2] \\
A_6 &= 2vr_0r_1\cos^4[\theta/2] \\
A_7 &= 2vr_0r_1\text{sen}^4[\theta/2] \\
A_8 &= A_9 = -vr_0r_1\text{sen}^2[\theta]/2
\end{aligned}$$

Substituindo esses coeficientes em (2.15) e reorganizando os termos entre chaves, podemos escrever uma expressão fechada em termos de V_0 , V_1 e V_2 , quando então, a equação assume sua forma final

$$S(t) = V_0 + V_1 \cos[\omega(t - t_0)] + V_2 \text{sen}[\omega(t - t_0)]$$

para

$$\begin{aligned}
V_0 &= (v_0r_0^2 + v_1r_1^2)(\cos^4[\theta/2] + \text{sen}^4[\theta/2]) + (v_0r_1^2 + v_1r_0^2)\text{sen}^2[\theta]/2 \\
&+ (v_0 - v_1)r_0r_1\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi](\cos^2[\theta/2] - \text{sen}^2[\theta/2])\text{sen}[\theta] \\
&+ vr_0r_1\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \alpha]\text{sen}^2[\theta] + vr_0r_1\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi - \alpha]\text{sen}^2[\theta] \\
&+ v(r_0^2 - r_1^2)\cos[\varphi - \alpha](\cos^2[\theta/2] - \text{sen}^2[\theta/2])\text{sen}[\theta] \quad , \\
V_1 &= v(r_0^2 - r_1^2)\text{sen}[\varphi - \alpha]\text{sen}[\theta] - (v_0 - v_1)r_0r_1\text{sen}[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi]\text{sen}[\theta] \\
&+ 2vr_0r_1\text{sen}[\sigma_0 - \sigma_1 + \alpha](\cos^4[\theta/2] - \text{sen}^4[\theta/2]) \quad , \\
V_2 &= (v_0 - v_1)(r_0^2 - r_1^2)\text{sen}^2[\theta]/2 \\
&- v(v_0^2 - v_1^2)\cos[\varphi - \alpha](\cos^2[\theta/2] - \text{sen}^2[\theta/2])\text{sen}[\theta] \\
&- (v_0 - v_1)r_0r_1\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \varphi](\cos^2[\theta/2] - \text{sen}^2[\theta/2])\text{sen}[\theta] \\
&+ 2r_0r_1\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + \alpha](\cos^4[\theta/2] + \text{sen}^4[\theta/2]) \\
&- vr_0r_1\cos[\sigma_0 - \sigma_1 + 2\varphi - \alpha]\text{sen}^2[\theta] \quad .
\end{aligned} \tag{2.16}$$

que era onde queríamos chegar.

2.3 RESULTADOS E EXEMPLOS

Nesta seção mostraremos a potencialidade do nosso método de controle discutindo diferentes exemplos. Admitiremos em todas as aplicações um sistema de

dois níveis com energias (no sistema atômico de unidades, no qual $\hbar = m = e = 1$) $E_0 = 0,323849$ a.u. e $E_1 = 0,323968$ a.u., tal que $\Delta E = E_1 - E_0 = 0,119 \times 10^{-3}$ a.u., com um tempo natural associado $\tau_0 = 1,28$ ps. Esses valores particulares de energia foram escolhidos apenas como exemplo, e portanto, não há nenhum interesse específico maior. No entanto, é interessante mencionar que eles correspondem a dois estados excitados da molécula DH_2 usados para demonstrar o processo controlável de quebra molecular feito nos primeiros trabalhos sobre controle quântico [15]. O controle quântico é implementado ajustando-se os parâmetros u e φ , como discutido previamente. No laboratório este procedimento é realizado aplicando-se campos externos ajustáveis, como por exemplo, um feixe de *laser* com amplitude variável e fase configurável por um modulador de fase [21]. Os parâmetros u e φ estão relacionados com o campo externo através dos elementos de matriz $\langle 1|U|0\rangle$, para $U = \mu \epsilon(t)$ [26, 33, 34, 75, 76], sendo μ o operador de dipolo e $\epsilon(t)$ é o campo elétrico independente do tempo por partes, que pode ser ajustado apropriadamente por um valor constante durante o intervalo de tempo.

2.3.1 CONTROLE DE $S(t)$ PARA DETERMINADOS INSTANTES DE TEMPO

Vamos iniciar com uma simples situação de controle, sendo o observável dado por $V = |n\rangle\langle n|$ ($n = 0, 1$) [20, 26]. Deste modo, $S(t)$ é interpretado como a probabilidade de um sistema ser encontrado em um estado n em um tempo t . Os parâmetros que definem V são $v_0 = 1 - n$, $v_1 = n$, e $v = 0$. O objetivo é conduzir a evolução de tal forma que em tempos iguais a 1, 2, 3 e 4 ps, a população no nível $n = 0$ seja dada por $\tilde{S}_a(t) = 0,2t/\Delta t$, Fig. 2.3(a), e $\tilde{S}_b(t) = 0,05(t/\Delta t)^2$, Fig. 2.3(b). Os valores dos parâmetros estão listados na Tab. 2.1. Os valores mudam apenas após um intervalo de tempo $\Delta t = 1$ ps. No entanto, no intervalo de tempo Δt a quantidade $S(t)$ segue a dinâmica de um sistema de dois níveis sob a ação de um potencial independente do tempo, apresentando simplesmente oscilações de Rabi.

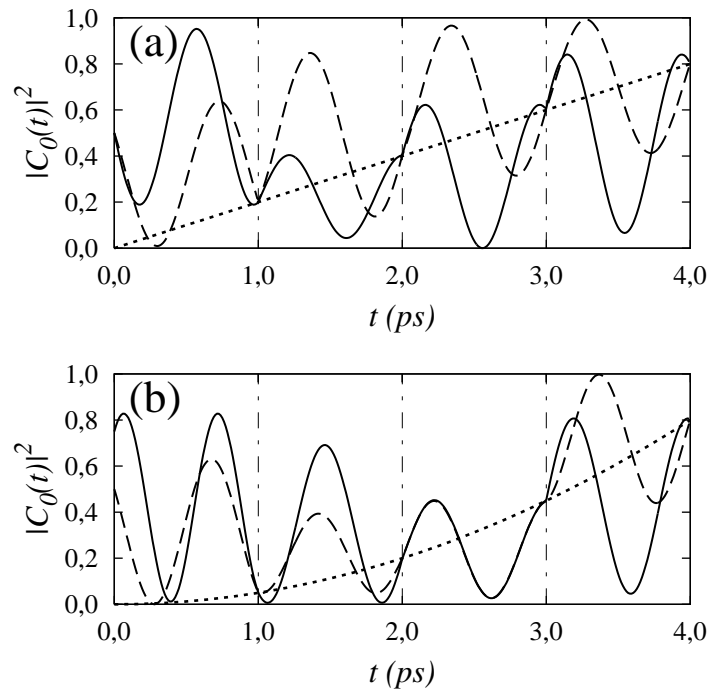


Fig. 2.3: O observável $S(t)$ é tomado como sendo a população do nível 0 que assume os valores dados pela trajetória (curva pontilhada) (a) $S_a(t)$ e (b) $S_b(t)$, para t exatamente igual a 1, 2, 3, e 4 ps. Em (a) o estado inicial é único, mas evolui de acordo com dois diferentes conjunto de parâmetros. Em (b) as duas curvas representam estados iniciais diferentes. Todos os valores de parâmetros estão listados na Tab. 2.1.

No primeiro exemplo, Fig. 2.3(a), admitimos como estado inicial $C_0 = 1/\sqrt{2}$ e $C_1 = \exp[i\pi/4]/\sqrt{2}$, tal que o controle é feito com dois conjuntos diferentes de parâmetros para u 's e φ 's. A existência, em certos casos, dessas múltiplas soluções é uma consequência da característica polinomial da Eq. (2.11), da qual podemos tomar vantagem escolhendo, entre as diferentes possíveis soluções, a de mais fácil implementação.

Como um segundo exemplo, Fig. 2.3(b), temos dois estados iniciais distintos, para a curva sólida ($C_0 = 1/\sqrt{2}$, $C_1 = \exp[i\pi/4]/\sqrt{2}$) e para a tracejada ($C_0 = \sqrt{3}/2$, $C_1 = \exp[i\pi/4]/2$). Obviamente, cada estado demanda diferentes conjuntos de parâmetros, como visto na Tab. 2.1. Podemos observar que o controle quântico sempre pode ser implementado, independentemente do estado inicial (veja a discussão na

intervalo (ps)	Fig. 2.3(a) linha sólida	Fig. 2.3(a) linha tracejada
0-1	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 2,649177$	$\bar{u} = 0,546; \varphi = 1,569089$
1-2	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 4,896750$	$\bar{u} = 0,504; \varphi = 4,143567$
2-3	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 4,048721$	$\bar{u} = 0,504; \varphi = 3,432818$
3-4	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 2,567145$	$\bar{u} = 0,504; \varphi = 3,136860$
intervalo (ps)	Fig. 2.3(b) linha sólida	Fig. 2.3(b) linha tracejada
0-1	$\bar{u} = 0,840; \varphi = 0,870655$	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 1,493502$
1-2	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 0,687220$	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 0,214842$
2-3	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 1,346751$	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 0,070247$
3-4	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 0,082234$	$\bar{u} = 0,630; \varphi = 3,449264$

Tab. 2.1: Valores dos parâmetros de controle usados em intervalos de 1 ps na Fig. 2.3 para $\bar{u} = u/(E_1 - E_0)$ e φ está em radianos.

Seção 2.4). No entanto, o estado inicial $C_0 = \sqrt{3}/2$ e $C_1 = \exp[i\pi/4]/2$, que resultou em $S_b(t)$, poderia também ser utilizado para conduzir ao alvo $S_a(t)$ para específicos valores de t , desde que os parâmetros u e φ fossem adequadamente ajustados.

2.3.2 CONTROLE DE $S(t)$ COMO UMA TRAJETÓRIA

No exemplo anterior, o controle ocorre somente para certos instantes de tempo. Porém, fazendo os Δt_j 's pequenos, o número de pontos onde $S(t)$ concorda com uma dada trajetória aumenta. No entanto, pode parecer que $S(t)$ segue um caminho completo somente no limite de $\Delta t_j \rightarrow 0$, ou seja, para um controle dependente do tempo. Felizmente este não é o caso. Podemos obter um controle para $S(t)$ razoavelmente perto da trajetória alvo fazendo os Δt_j 's pequenos, porém finitos, como ilustraremos a seguir. Deixaremos para a Seção 2.4 uma discussão mais detalhada sobre como escolher apropriadamente tais intervalos de tempo Δt_j .

A menos que seja mencionado o contrário, a partir daqui usaremos $\Delta t_j = \Delta t = 100$ fs [77]. Para V admitiremos (em unidades arbitrárias) $v_0 = 1$, $v_1 = 3$,

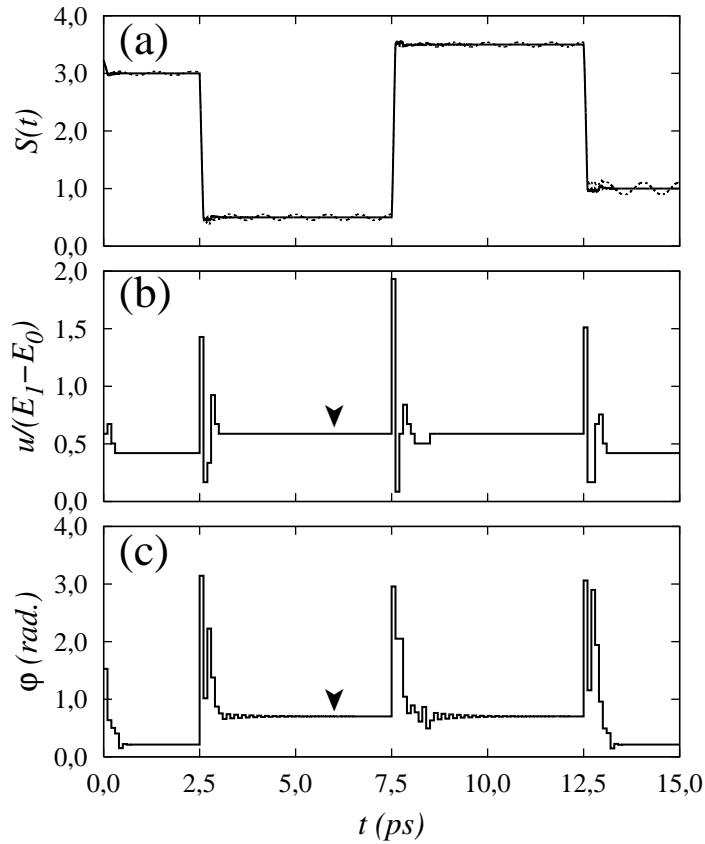


Fig. 2.4: (a) $S(t)$ foi configurado como uma função escada para o controle dos parâmetros (b) u e (c) φ . A curva pontilhada representa $S(t)$ para pequenos desvios aleatórios para o conjunto de parâmetros $\{t_j\}$.

$v = \sqrt{3}$ e $\alpha = \pi/2$, desta forma $v_- = 0$ e $v_+ = 4$. Uma vez que $\tau_0/\Delta t = 12,8$, podemos considerar os intervalos de tempos relativamente curtos comparados ao período natural de oscilação do sistema τ_0 quando o sistema não é perturbado ($u = 0$). Deste modo, obtemos $S(t)$ com boa aproximação para a trajetória contínua na escala de tempo de τ_0 . Como estado inicial usamos o mesmo valor numérico que o da Fig. 2.3(a).

Iniciaremos então, com uma forma crítica para $S(t)$, uma função tipo escada, como mostra a Fig. 2.4(a). Da Eq. (2.11) temos que $dS(t)/dt = \{V_1 \cos[\omega(t - t_0)] - V_2 \text{sen}[\omega(t - t_0)]\} \omega$. Como o termo entre chaves é limitado, concluímos que mudanças abruptas de S estão associadas com $\omega = \sqrt{4u^2 + (E_1 - E_0)^2}/\hbar$. Logo, sempre

que desejamos atingir variações abruptas de S , como por exemplo, nos cantos da trajetória do tipo escada, precisamos de grandes variações Δu .

Para $S(t < 2,5 \text{ ps}) = 3$, $S(2,5 \leq t < 7,5 \text{ ps}) = 0,5$, $S(7,5 \leq t < 12,5 \text{ ps}) = 3,5$, e $S(t \geq 12,5 \text{ ps}) = 1$, fizemos o controle de duas maneiras diferentes: (i) mudamos ambos u e φ ; e (ii) mantivemos u constante e configuramos φ . Para (i) mostramos na Fig. 2.4 os valores de u e φ e o resultado $S(t)$. Observe que, para cada instante de tempo em que S apresenta um salto na Fig. 2.4(a), existe uma variação correspondente mais pronunciada de u (veja a Fig. 2.4(b)), e de φ (Fig. 2.4(c)).

Essas fortes mudanças de u em um curto intervalo de tempo (eventualmente necessárias, por exemplo, para o controle de processos moleculares na presença de colisões [16]) podem, na prática, impor algumas dificuldades técnicas. Como u tem unidade de energia, é conveniente compará-lo a um campo externo clássico, de tal forma que u passa a ser diretamente relacionado com a intensidade desse campo. Deste modo, em nosso exemplo, o método demandaria rápidas variações na amplitude do campo. Uma outra possibilidade consiste em fixar u em um valor nunca inferior a um mínimo necessário para promover a maior transição ($\Delta S/\Delta t$) e então controlar somente a fase φ . Isto é mostrado na Fig. 2.5(a) (curva contínua), para a qual fixamos o parâmetro u tal que $u/(E_1 - E_0) = 2,94$, isto é, um valor 1,52 vezes maior que o máximo u na Fig. 2.4(b). Na Fig. 2.5(c) exibimos $S(t)$ em torno de uma região de salto. Observamos algumas (não tão acentuadas) oscilações para $S(t)$ depois de atingir o valor constante de 0,5, o que não ocorreu na Fig. 2.4(a). Essa perda de qualidade no controle durante os curtos intervalos de tempo é o preço que se paga por usar apenas um, a saber φ , ao invés de dois parâmetros de controle. Devemos mencionar também que uma terceira possibilidade seria fixar φ e configurar u , mas este procedimento não apresenta um bom resultado para o controle. É um fato conhecido na literatura que a maior contribuição no processo de controle pertence ao controle das fases do campo externo.

Por outro lado, para uma curva $S(t)$ mais suave, as condições para o controle são mais favoráveis. Para ilustrar, vamos supor como alvo a seguinte trajetória:

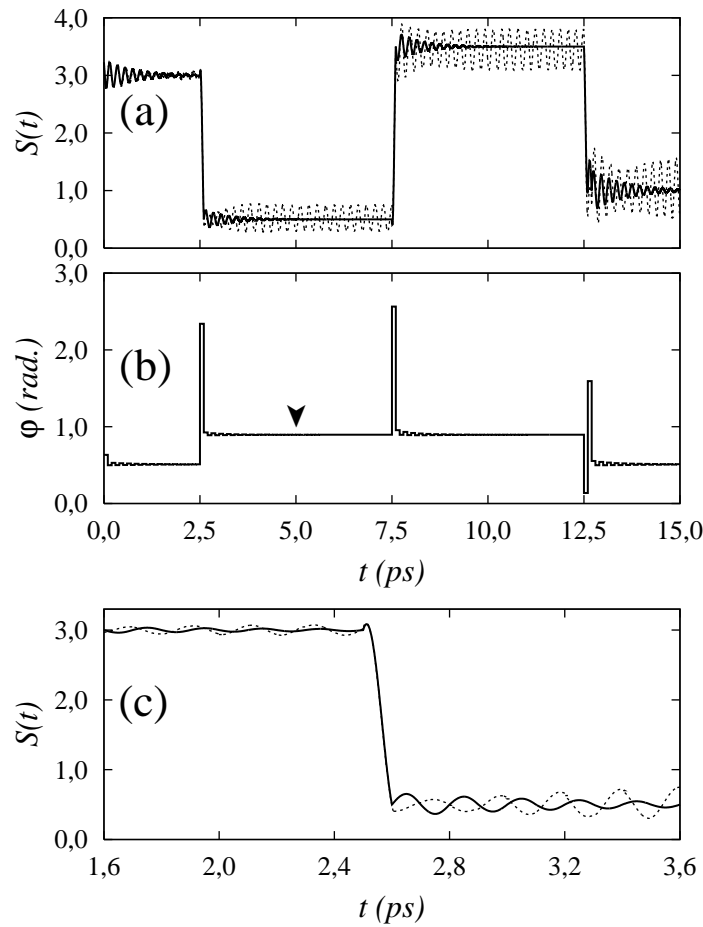


Fig. 2.5: (a) $S(t)$ (curva contínua) configurada como na Fig. 2.4, mas para um valor fixo $u/(E_1 - E_0) = 2,94$ e (b) variação de φ . (c) A curva contínua mostra $S(t)$ em torno de uma região de salto. Em (a) e (c) as curvas pontilhadas representam $S(t)$ para pequenos desvios aleatórios em $\{t_j\}$.

$S(t) = S_0 + S_1 \exp[-\sigma(t - T_1)^2] + S_2 \exp[-\sigma(t - T_2)^2]$. A curva representa basicamente duas curvas Gaussianas centradas em diferentes instantes de tempo. A Fig. 2.6(a) (curva contínua) mostra o resultado para $T_1 = 2,5$ ps, $T_2 = 10$ ps, $S_0 = 3,0$, $S_1 = -2,9$, $S_2 = 0,9$ e $\sigma = 1,54$ ps⁻². Para este caso, mantivemos constante $u/(E_1 - E_0) = 1,1$ e mudamos somente φ , mostrado na Fig. 2.6(b). Observe que podemos colocar u em um valor mais baixo, comparado com o resultado da Fig. 2.5, porem aqui, o máximo e o mínimo de $S(t)$ estão muito próximos dos extremos da janela de controle, isto é, $v_- = 0$ e $v_+ = 4$. Isto é possível porque não existem

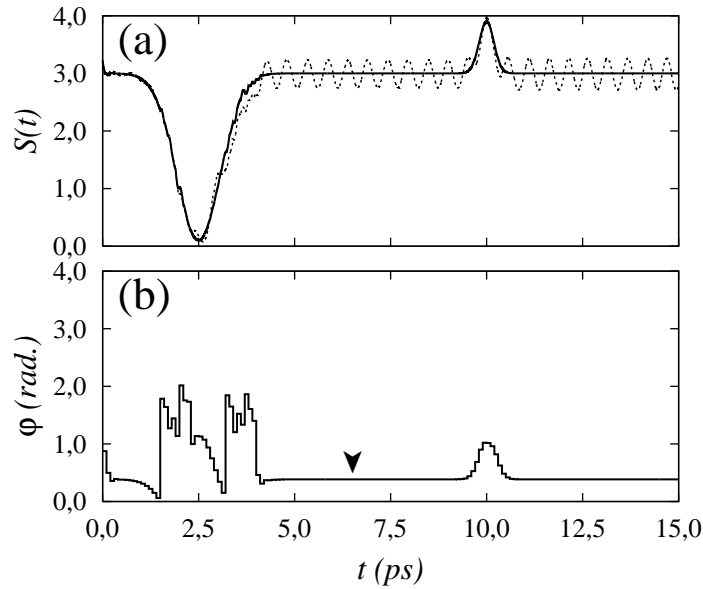


Fig. 2.6: (a) A curva contínua mostra $S(t)$ para um valor fixo $u/(E_1 - E_0) = 1,1$ e (b) variação de φ . A curva pontilhada representa $S(t)$ para pequenos erros aleatórios nos $\{t_j\}$.

variações abruptas em $S(t)$. Além disso, não temos os curtos “ruídos” de oscilações observadas no caso anterior.

Das Figs. 2.4, 2.5 e 2.6 observamos que durante os intervalos de tempo Δt , em que $S(t) = \tilde{S}$ é constante, os parâmetros de controle também tendem a um valor fixo (indicados nas figuras por uma seta). Para entender este fato, note que uma forma de obter $S(t) = \tilde{S}$ é ter $|\Psi(t)\rangle = \exp[-i(E_a/\hbar)t] |\Psi_a\rangle$, com $|\Psi_a\rangle$ um estado próprio de $H(u, \varphi)$ para o qual $\langle \Psi_a | V | \Psi_a \rangle$ é exatamente \tilde{S} . Uma vez nesta situação, o método (em Δt) seleciona progressivamente os parâmetros até que $|\Psi(t)\rangle \rightarrow |\Psi_a\rangle$ onde então mantém o seu valor. Para ilustrar este fato mostramos na Fig. 2.7 a projeção $|\langle \Psi(t) | \Psi_a \rangle|^2$ e $|\langle \Psi(t) | \Psi_b \rangle|^2$ (com $|\Psi_b\rangle$ correspondendo ao segundo estado próprio de H) em torno de $t = 2,5$ ps para o exemplo da Fig. 2.4. $|\Psi_a\rangle$ é o estado para o qual $|\Psi(t)\rangle$ evolui tal que conduza o sistema para $S(t) = 0,5$. Tal processo de transição inicia-se em $t = 2,5$ ps, e termina 0,38 ps depois. Em $t = 2,88$ ps, u e φ também alcançam o valor fixo apropriado (marcado pelas setas nas Figs. 2.4(b) e (c)). Devemos mencionar que o fato de $|\Psi_b\rangle$ estar próximo de um estado estacionário

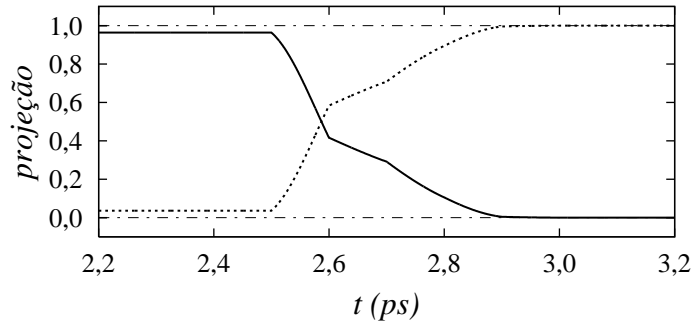


Fig. 2.7: Projeção de probabilidades $|\langle \Psi(t) | \Psi_b \rangle|^2$ (linha cheia) e $|\langle \Psi(t) | \Psi_a \rangle|^2$ (linha pontilhada) para $2,2 < t < 3,2$ ps da Fig. 2.4(a).

que resulta em $S(t < 2,5 \text{ ps}) = 3$ é apenas uma peculiaridade desse exemplo.

2.4 DISCUSSÃO

Após apresentar e exemplificar o método, agora passaremos a discutir alguns aspectos gerais da técnica.

2.4.1 A SENSIBILIDADE DO CONTROLE A ERROS NOS VALORES DOS PARÂMETROS

Um ponto importante é a abordagem de estabilidade para pequenos erros nos valores dos parâmetros de controle. Então, o primeiro passo relevante é estimar o quão apurada deve ser a troca nos valores do campo. Em nossos cálculos supomos a aproximação por trocas rápidas (“repentinas”) (veja a discussão anterior à Eq. (2.8)). Portanto, um pequeno atraso na transição $u_j, \varphi_j \rightarrow u_{j+1}, \varphi_{j+1}$ pode introduzir alguns desvios na trajetória alvo. Desejamos também estudar como uma variação (erro) nos t_j 's afetam a qualidade do controle e também o papel das transições finitas no tempo, nas quais em uma situação real podem ser muito curtas mas não zero.

Testamos esta estabilidade introduzindo erros aleatórios δt_j para os instantes t_j 's. Cada δt_j é aleatoriamente escolhido entre $(-\Delta t/16.66, +\Delta t/16.66)$, tal que o

intervalo de erro correspondente é de 12% do intervalo de tempo $\Delta t = 100$ fs usado no exemplo. As curvas pontilhadas nas Figs. 2.4(a), 2.5(a), 2.5(c) e 2.6(a) mostram $S(t)$ para os parâmetros ajustados no tempo $t_j + \delta t_j$. Comparando as Figs. 2.4(a) — onde o controle foi feito ajustando-se u e φ — e 2.5(a) — onde o controle foi feito apenas em φ —, podemos observar que a qualidade no controle é menos afetada por erros quando ambos os parâmetros são usados. Observamos também um resultado melhor para a Fig. 2.6(a) que para a Fig. 2.5(a), indicando que trajetórias mais suaves para $S(t)$ são mais robustas a erros.

Uma segunda situação que podemos tratar, é a introdução de pequenos erros nos próprios valores dos parâmetros de controle. Simulamos esta situação considerando $u_j + \delta u_j$ e $\varphi_j + \delta \varphi_j$, sendo δu_j e $\delta \varphi_j$ escolhidos aleatoriamente entre $(-u_j/20, u_j/20)$ e $(-\varphi_j/20, \varphi_j/20)$. Portanto, a largura do intervalo de erro corresponde a 10% nos valores dos parâmetros correspondentes a u_j e φ_j . Nas Figs. 2.8(a) e (c) consideramos o controle de ambos u e φ , enquanto nas Figs. 2.8(b) e (d) somente em φ .

Todas as figuras mostram $S(t)$ para o controle feito com: os valores exatos de u e φ ; erros somente em φ ; e erros em ambos os parâmetros u e φ . Vimos que, como anteriormente, no processo de controle com dois parâmetros, os desvios são muito menos pronunciados. De fato, o pior caso, especialmente entre $5 < t < 11$ ps, é aquele mostrado na Fig. 2.8(b) (curvas tracejadas e pontilhadas). No entanto, este é um exemplo crítico: uma curva não suave para $S(t)$, controlado com apenas um único parâmetro, φ , para o qual ainda apresenta erros.

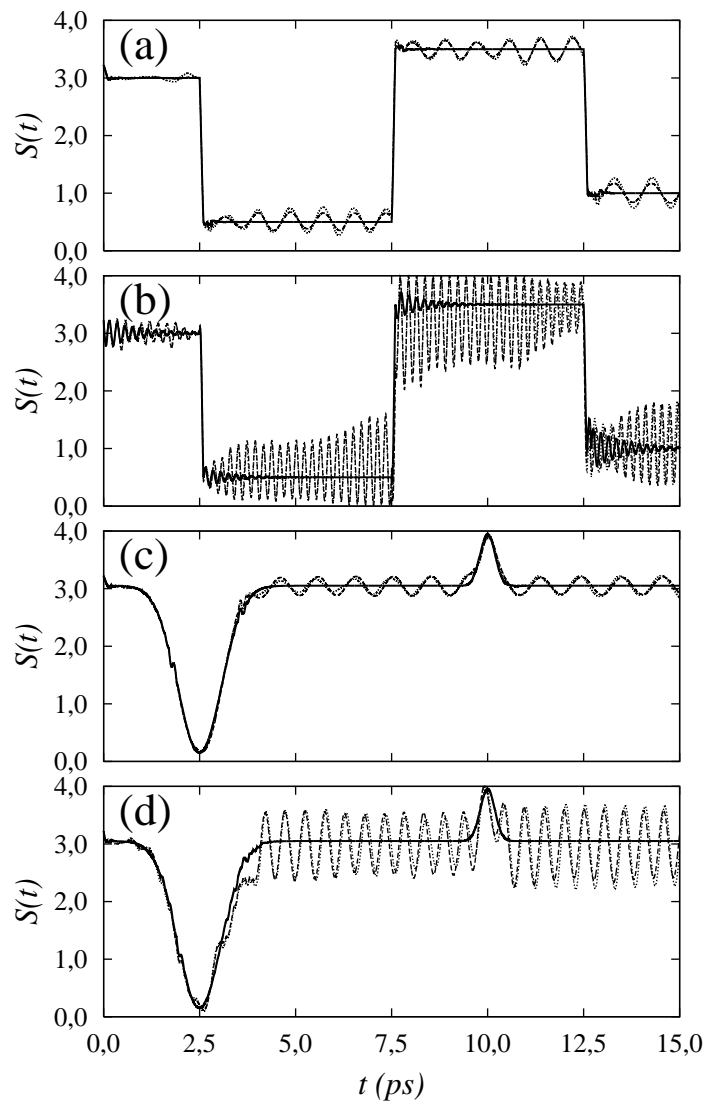


Fig. 2.8: As trajetórias $S(t)$ dos exemplos prévios para os parâmetros selecionados nos tempos correspondentes t_j 's onde: nenhum erro para u e φ (contínua); erro aleatório para ambos φ e u (pontilhado); e erros aleatórios somente para φ (tracejada). Em (a) e (c) u e φ são configurados, enquanto em (b) e (d) apenas φ é configurado.

2.4.2 A GENERALIDADE DO MÉTODO EM RELAÇÃO AO ESTADO INICIAL $|\Psi(t_0)\rangle$ E O OBSERVÁVEL V

Nos exemplos de aplicações tratados até aqui discutimos somente dois observáveis V e poucas formas para $S(t)$. No entanto, testamos o método para o controle de outros diferentes caminhos $S(t)$ e para muitos outros V 's, sempre com boa precisão numérica.

Então uma pergunta natural é se a presente abordagem permite direcionar $S(t)$ para qualquer trajetória alvo (sob a restrição de $v_- \leq S(t) \leq v_+$), respeitando-se o operador V e o problema de estado inicial $|\Psi(t_0)\rangle$. Devido ao nosso tipo específico de protocolo, isto é equivalente a responder se configurando os parâmetros do Hamiltoniano e escolhendo um apropriado instante de tempo $t_0 \leq \tilde{t} \leq t_0 + \Delta t$, podemos fazer $S(t = \tilde{t})$ assumir qualquer valor \tilde{S} . Na demonstração a seguir (2.4.3), mostramos que o método pode ser usado para controlar um sistema de dois níveis em um contexto arbitrário.

Para demonstrar a generalidade do método construímos um bloco de procedimento, isto é, fizemos o controle paramétrico local em cada intervalo de tempo Δt_j , considerando a situação mais desfavorável (veja a demonstração na Seção 2.4.3). Encontramos que para se fazer o controle em um caso geral, devemos assumir $\Delta t \geq \tau$. Em muitos exemplos ao longo deste capítulo utilizamos $\Delta t = \tau_0/12,8$ (lembrando que $\tau_0 \geq \tau$). Observamos que nas Fig. 2.4, 2.5 e 2.6, a escolha do estado inicial $|\Psi(t_0)\rangle$ já fornece um $S(t_0)$ em torno do valor desejado $S(\tilde{t}) = \tilde{S}$ para $t_0 \leq \tilde{t} \leq t_0 + \Delta t$. Na verdade, as figuras refletem este fato desde que o transiente para $t \approx t_0 = 0$ seja quase imperceptível, como por exemplo, na Fig. 2.4(a), em que aparecem pequenos ruídos para $S(t \approx 0)$. O ponto importante é que quando controlamos a evolução temporal de $S(t)$, se para cada intervalo de tempo Δt_{j+1} já estamos com um estado $|\Psi(t_j)\rangle$ próximo do estado alvo $|\Psi(\tilde{t})\rangle$, então a condição apresentada na demonstração pode ser relaxada.

Naturalmente, a “proximidade” do estado em cada t_j é automaticamente

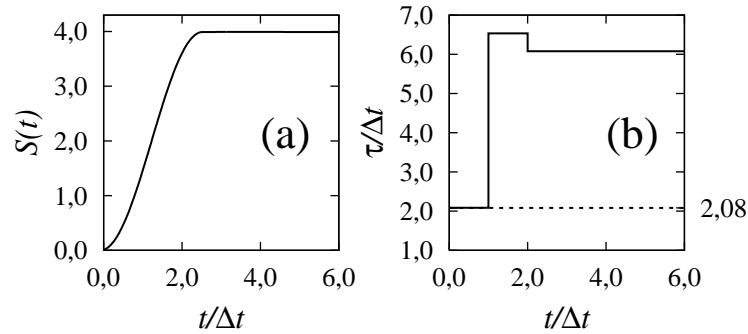


Fig. 2.9: (a) O controle de $S(t)$, objetiva ser constante $\tilde{S} = 3.99$, onde ajustamos ambos u e φ . Aqui $\Delta t = 100$ fs e o estado inicial é tal que $\langle \Psi(t_0 = 0) | V | \Psi(t_0 = 0) \rangle = 0.01$. (b) A razão $\tau/\Delta t$ em função do tempo.

satisfeita quando fazemos o controle para um alvo $S(t)$ suave. Neste caso não existem restrições importantes para os valores de Δt_j , o qual pode ser pequeno, limitado somente por aspectos externos, como o mecanismo de ajuste de controle.

No entanto, se não pudermos selecionar o estado inicial [78] e $S(t)$ tem rápidas variações, ou até mesmo saltos como nas Figs. 2.4 e 2.5, podemos ainda utilizar intervalos de tempo curtos, desde que u possa assumir valores grandes. O método então seleciona u para que a razão $\tau/\Delta t$ seja apropriada para o controle. Ilustramos este fato com um simples exemplo, admitindo que $S(t)$ seja um alvo com valor numérico constante de 3,99, isto é, quase o valor máximo permitido de $v_+ = 4$. Escolhemos $\Delta t = 100$ fs e fizemos o controle — mostrado na Fig. 2.9 (a) —, usando ambos u e φ . Como estado inicial admitimos $C_0 = 0,840745$ e $C_1 = 0,541431 \exp[-i\pi/2]$, e deste modo temos $\langle \Psi(t_0) | V | \Psi(t_0) \rangle = 0,01$, isto é, muito próximo do menor valor permitido de $v_- = 0$. Na demonstração mostramos analiticamente que para se obter $\tilde{S} = v_+$ com Δt , em um dado estado inicial cujo valor esperado fornece $S(t_0) = v_-$, precisamos que $\tau/\Delta t = 2$. A Fig. 2.9(b), mostra que $\tau/\Delta t$ em função do tempo está em concordância com tais resultados. De fato, durante os primeiros passos de controle $t/\Delta t < 1$, temos $u/\Delta E = 3,02$, um valor alto para u , fazendo com que τ seja curto o suficiente para encontrar a condição temporal, aqui de $\tau/\Delta t = 2,08$. Note além disso que para $t/\Delta t > 2$, u já decresceu

para $u \approx \Delta E$.

Finalmente, se não pudermos mudar livremente u ou até mesmo ajustá-lo para um valor constante muito alto como na Fig. 2.5, então podemos ainda fazer Δt_j pequeno na região suave de $S(t)$. No entanto, precisamos assumir valores grandes no intervalo de tempo no início do processo de controle e também em torno da região que apresenta fortes variações na trajetória alvo.

2.4.3 GENERALIDADE DO MÉTODO: DEMONSTRAÇÃO

Nesta Seção demonstraremos que, para um V arbitrário, se fixarmos corretamente os parâmetros u e φ no Hamiltoniano H na Eq. (2.1) em um $t = \tilde{t}$ apropriado no intervalo de tempo $(t_0, t_0 + \Delta t)$, podemos obter qualquer valor específico $v_- \leq \tilde{S} \leq v_+$ para $S(t = \tilde{t})$, independentemente do estado inicial $|\Psi(t_0)\rangle$.

Iniciamos observando que sob a ação de H e para $t_0 < t < t_0 + \Delta t$, a evolução temporal do estado inicial $|\Psi(t_0)\rangle = |\Psi_0\rangle$ é dada por

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t - t_0)\right] |\Psi_0\rangle \quad . \quad (2.17)$$

Em Δt os estados próprios de H , $\{|\pm\rangle\}$, são um boa base do problema. Não obstante, sempre podemos expandir $|\Psi(t)\rangle$ na base dos estados próprios de V , $\{|v_{\pm}\rangle\}$. Em particular, para $t = \tilde{t}$ supomos $|\Psi(\tilde{t})\rangle = c_- |v_-\rangle + c_+ |v_+\rangle$. Desde que $|c_-|^2 + |c_+|^2 = 1$, temos $\tilde{S} = \rho(\tilde{t})v_+ + [1 - \rho(\tilde{t})]v_-$, com $0 \leq \rho(\tilde{t}) = |c_+|^2 \leq 1$. Conseqüentemente, se de algum modo conseguirmos fazer $\rho(\tilde{t})$ assumir qualquer valor entre 0 e 1, então poderemos escolher qualquer valor desejado para \tilde{S} . Vamos definir

$$\rho(t) = |\langle v_+ | \Psi(t) \rangle|^2 \quad , \quad (2.18)$$

tal que $\rho(\tilde{t}) = |c_+|^2$. A seguir, desprezando-se uma fase global podemos escrever ($0 \leq (a, b) \leq 1$, $0 \leq (\alpha, \beta) < 2\pi$)

$$\begin{aligned} |v_+\rangle &= \sqrt{a} \exp[i\alpha] |+\rangle + \sqrt{1-a} |-\rangle \quad , \\ |\Psi_0\rangle &= \sqrt{b} \exp[i\beta] |+\rangle + \sqrt{1-b} |-\rangle \quad . \end{aligned} \quad (2.19)$$

Desta maneira, definindo $\phi = (t - t_0)\omega - (\beta - \alpha)$, das Eqs. (2.17) e (2.19) teremos para a Eq. (2.18)

$$\rho(t) = 2ab + 1 - (a + b) + 2\sqrt{ab(1-a)(1-b)} \cos[\phi]. \quad (2.20)$$

Com isso, podemos fazer o controle quântico para quaisquer observável V e estado inicial. Isto é equivalente a dizer que podemos controlar ρ admitindo $|v_+\rangle$ e $|\Psi_0\rangle$ completamente arbitrários. Agora, analisando a Eq. (2.2), notamos que, se tivermos total liberdade de escolher u e φ , poderemos obter quaisquer valores para os estados próprios de H e portanto, (a menos de uma fase global) qualquer vetor no espaço de Hilbert de dois níveis. Portanto, uma das duas projeções dos parâmetros na (2.20), a saber $a = |\langle +|v_+\rangle|^2$, pode assumir qualquer valor. Segundo, se escolhermos apropriadamente $t = \tilde{t}$, tal que $\phi(\tilde{t})$ assumira qualquer valor entre $[0, \pi]$, então a função cosseno na Eq. (2.20) pode ser expandida sobre todo intervalo numérico $[-1, 1]$. Isto é possível sempre que $\Delta t \omega \geq \pi + \gamma$, para γ dado por $(\beta - \alpha) \bmod \pi$. Então, uma condição suficiente para o controle total de ϕ , independente de $\beta - \alpha$, é ter $\Delta t \geq \tau$. No entanto, uma diferença de fase mais favorável pode conduzir a intervalos de tempo mais curtos.

Finalmente, podemos mostrar via Eq. (2.20), para um b arbitrário, que podemos conseguir qualquer valor entre 0 e 1, nos deixando livre para variar $\cos[\phi]$ e a , o que é sempre possível do resultado acima. Deste modo, a generalidade do procedimento de controle é estabelecida.

Como uma aplicação, particularizaremos a Eq. (2.20) para uma situação na qual o controle é um extremo. Suponha o alvo $\tilde{S} = v_+$, tal que $\rho(\tilde{t}) = 1$. Para o estado inicial mais “difícil”, neste caso é $|\Psi(t_0)\rangle = |v_-\rangle$, temos $b = 1 - a$ e $\beta = \alpha + \pi$. Deste modo, Eq. (2.20) reduz-se a

$$\rho(t) = 4a(1-a)\text{sen}^2[(t - t_0)\omega/2] \quad .$$

Impondo $\rho(\tilde{t}) = 1$ na equação acima, encontramos $a = 1/2$, $\tilde{t} = t_0 + \Delta t$ sendo um valor mínimo para o intervalo de tempo $\Delta t = \tau/2$.

2.4.4 CONEXÃO COM OS PARÂMETROS DO CAMPO DE UM LASER

O esquema proposto é baseado em um controle de busca de parâmetros. Então, é de fundamental importância saber como esses parâmetros são relacionados com os parâmetros de um dado potencial externo, como por exemplo, o campo elétrico de um laser, produzido em condições de laboratório. Abaixo discutiremos dois tópicos relacionados com este assunto.

O primeiro ponto é que o método admite um tempo de transiente rápido τ_{sw} para a troca dos parâmetros. Recentemente foi reportado um experimento de controle quântico [77] com um campo pulsado de $\tau_{\text{sw}} = 100$ fs. De fato, o presente “estado da arte” em configuração de pulsos em escalas de tempo de femtosegundo — veja por exemplo a Ref. [79] — implica que mudanças repentinas devem acontecer tipicamente nessas escalas de tempo. Para os nossos exemplos prévios e um campo de laser de $\tau_{\text{sw}} = 100$ fs, encontramos que $\tau_{\text{sw}}/\tau_0 \approx 0.08$ que é relativamente pequeno, no entanto, satisfaz o principal argumento do método — veja a discussão anterior à Eq. (2.8) na Seção. 2.1.1.

Não obstante, uma possível dificuldade para a realização concreta dos exemplos discutidos até então está na escolha do passo de tempo de $\Delta t = 100$ fs, para qual a condição desejada de $\tau_{\text{sw}} < \Delta t$ não é assegurada. Neste caso, a variação dos parâmetros do potencial em τ_{sw} tem um efeito similar à introdução de erros nos valores de t_j 's, exemplificado na Seção. 2.4.1. Provavelmente os controles com menor precisão seriam aqueles mostrados nas Figs. 2.4(a) e 2.5(a) em linhas contínuas.

Uma maneira de contornar o problema é usar intervalos de tempo de controle (Δt 's) mais longos. Na Fig. 2.10 mostramos a mesma situação que a Fig. 2.4, mas para $\Delta t = 200$ fs. O controle ainda é muito bom, tal que erros introduzidos nos valores de t_j (curva pontilhada na Fig. 2.10(a)) não introduzem fortes perturbações. Note que, desde que o intervalo de erro (12% de $\Delta t = 200$ fs) seja em torno de $\tau_{\text{sw}}/4 = 25$ fs, podemos esperar obter experimentalmente um controle razoavelmente bom. Inevitavelmente, aumentando Δt , a acuracidade do protocolo torna-se mais

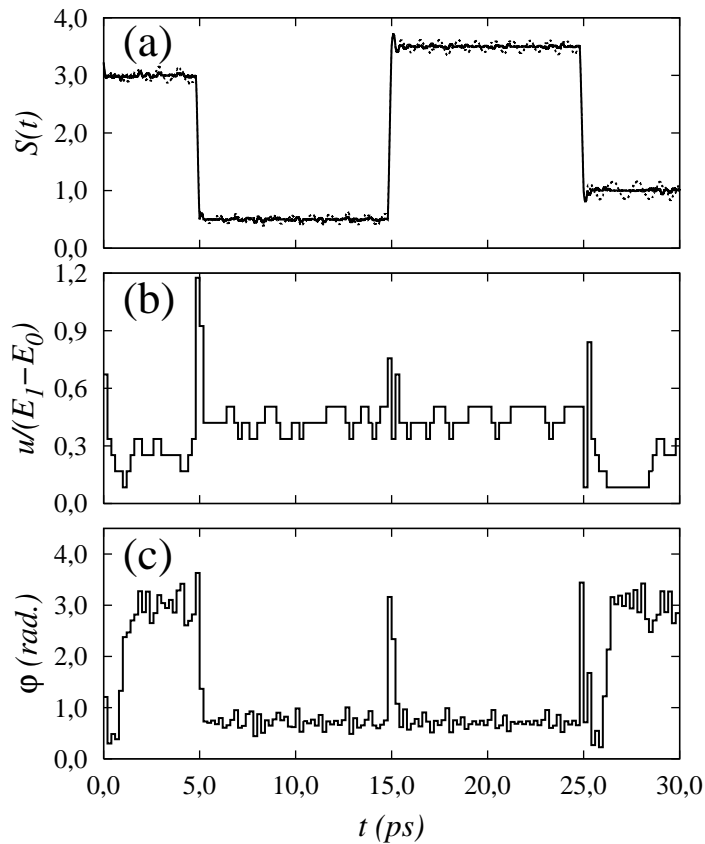


Fig. 2.10: O mesmo que a Fig. 2.4, mas para $\Delta t = 200$ fs.

sensível a variações em u_j e φ_j . Observamos na Fig. 2.10 que durante o processo de controle as mudanças nos valores dos parâmetros ocorrem mais frequentemente, se comparado com a Fig. 2.4. De fato, na Fig. 2.10 não aparecem grandes platôs como na Fig. 2.4. Portanto, os erros acumulados (devido aos eventuais desvios em δu_j e $\delta \varphi_j$) serão mais pronunciados. Deste modo, em uma situação real existe um compromisso entre o quão rápidos são as transições e o quão precisos os valores dos parâmetros podem ser ajustados.

O segundo ponto está relacionado com a amplitude do laser necessária em aplicações concretas. Para um sistema constituído por N níveis ainda temos a liberdade de superpor apenas dois níveis [69, 75, 80, 81]. Neste caso, para que a descrição de dois níveis seja aplicada, os campos utilizados para o controle não poderão ser

tão intensos à ponto de superpor mais estados do sistema. Desse modo, os picos nos campos determinam a validade do controle de um sistema de dois níveis, mesmo para sistemas constituídos por N níveis. Naturalmente, não estamos levando em conta o fato de existirem sistemas efetivos com apenas dois níveis, como por exemplo, nos casos em que os outros níveis não são acessíveis em condições experimentais [40, 63, 66].

Para estimar a magnitude do campo, podemos rever a discussão no início da Seção 2.3 e como usual, na aproximação dipolar, negligenciamos possíveis variações espaciais de ϵ , com isso podemos escrever

$$u = |\langle 1|U|0\rangle| = |\langle 1|\mu\epsilon|0\rangle| \approx |\epsilon|\mu_{10} \quad , \quad (2.21)$$

sendo μ_{10} o módulo do elemento do momento de dipolo. Conseqüentemente, em relação ao tempo, a amplitude do campo terá exatamente o mesmo perfil que u — como por exemplo, aqueles mostrados nas Figs. 2.4(b) e 2.5(b). Além disso, observamos que em muitos exemplos [58, 81–83] a quantidade μ_{10} é tipicamente da ordem de 1 a.u.. Então, em unidade atômica ϵ_{\max} está numericamente próximo de u_{\max} — veja por exemplo a Fig. 2.5(b). Neste caso temos que $u_{\max}/\Delta E = 2$, então $\epsilon_{\max} = 2.3 \times 10^{-4}$ a.u. $\approx 118 \times 10^6$ V/m. Comparando com o artigo original de controle da molécula de DH_2 [15], o pico máximo do campo de controle é de 1.9×10^{-4} a.u., portanto, o nosso método demanda amplitude com a mesma ordem de grandeza.

Finalmente, em certas aplicações podemos desejar intensidades menores do laser. Em nosso modelo podemos fazê-lo permitindo passos de controle no tempo maiores, como diretamente observado na Fig. 2.10, em que usamos $\Delta t = 200$ fs. Note que $u_{\max}/\Delta E = 1.2$, em contraste com $u_{\max}/\Delta E = 2$ da Fig. 2.4, ou seja, uma diminuição de cerca de 40%. Desse modo, o método permite uma certa flexibilidade no conjunto de picos máximos do campo, desde que possamos aceitar uma perda na acuracidade no processo de controle.

2.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Neste capítulo propusemos um método simples de controle da evolução temporal de um estado quântico e conseqüentemente, o valor esperado de um operador relevante. A idéia principal é mudar somente em instantes de tempo apropriados, os valores dos parâmetros de um potencial de interação externo. Com isso, trabalhamos com sucessivos conjuntos de sistemas independentes do tempo. A idéia de usar soluções analíticas por partes para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo [84] ou dependente do tempo [85,86], no contexto de física atômica e molecular não é novo. No entanto, só recentemente esta técnica começou a ser empregada em controle quântico, como por exemplo, em processos de tomografia quântica [63] e na construção de pacotes de onda [55]. O trabalho publicado recentemente em *Physical Review A* [51] foi discutido em detalhes neste capítulo, sendo este o primeiro trabalho aplicando tal abordagem para o controle total de trajetórias.

A solução do problema inverso, isto é, a obtenção do potencial externo — como por exemplo, um campo elétrico — que conduz o sistema a uma desejada evolução temporal, é relativamente simples, tendo em vista que precisamos resolver algebricamente uma equação independente do tempo, ao invés de equações diferenciais ou integrais. Além dessas observações, são necessários alguns poucos comentários comparando nosso método com um esquema mais convencional de controle. Para tal, resumiremos brevemente a seguir o método de controle ótimo e o controle inverso (ou trajetórias). Para uma revisão dos diferentes métodos veja por exemplo o Capítulo 1 e também a Ref. [61].

O método ótimo é baseado em um funcional J_1 envolvendo a função de onda e a evolução temporal do alvo, como por exemplo $S(t)$. A minimização deste funcional resulta no campo de controle que maximiza o valor esperado de um determinado operador (em um certo intervalo de tempo), e faz a função de onda do sistema seguir uma evolução pré-definida [26]. Usualmente, um segundo funcional J_2 (um termo que penaliza o campo) também é introduzido. Seu papel é evitar soluções para o campo

que apresentam características indesejadas, tais como divergências. A minimização de $J_1 + J_2$ representa então o balanço entre encontrar um campo de controle para o alvo exato e manter o campo de controle baixo. No entanto, o método descrito, demanda um procedimento de otimização iterativo computacionalmente intenso [33] (apesar de algoritmos eficientes terem sido descritos na literatura [80, 87]).

O método de trajetórias segue o ponto de vista padrão de problemas inversos. A saída (*output*) $S(t)$ é especificada e a entrada (*input*), é o potencial externo que precisa ser encontrado. Uma equação diferencial para $S(t)$, cuja ordem depende das características do operador observável V e o potencial de interação U [33], é obtida. Com isso conseguimos escrever o potencial U desejado em termos das derivadas temporais de $S(t) = \langle \Psi(t) | V | \Psi(t) \rangle$. Mas U aparece explicitamente na equação de Schrödinger, a qual determina a evolução de $|\Psi(t)\rangle$. Deste modo, terminamos com um conjunto de equações diferenciais não lineares acopladas para o qual métodos numéricos de busca de soluções fazem-se necessários. Um importante aspecto deste método é que somente a evolução temporal do alvo $S(t)$ é imposta. Não há restrições ao potencial externo (campo elétrico). Desse modo, em alguns casos o método fornece soluções singulares. Em tais situações, aliado ao procedimento inverso, um tratamento especial que lida com as divergências no campo precisa ser considerado [34].

Da curta descrição feita acima, torna-se evidente a simplicidade matemática do controle paramétrico por partes. O método trabalha com equações algébricas lineares e não necessita de um procedimento de recursividade no tempo, mesmo quando estendido para um sistema de N níveis. Além disso, o método sempre conduz a uma solução regular. Uma simples e intuitiva forma de entender este fato é notar que, impor uma trajetória $S(t)$ ao longo da curva totalmente contínua no intervalo de tempo pode ser muito restritivo, demandando singularidades no campo. No presente esquema relaxamos esta imposição. Fizemos o controle somente em um único instante \tilde{t} em cada intervalo de tempo Δt_j . Como já discutido anteriormente, para apropriadas escalas de tempo o $S(t)$ obtido pode se aproximar formidavelmente bem

de um caminho contínuo. Desde que se tenha uma certa flexibilidade na escolha do valor do parâmetro tempo, sempre será possível encontrar uma solução finita para a Eq. (2.11).

Como uma última comparação, também podemos citar a teoria de controle local (TCL), desenvolvida por Tannor, Kosloff entre outros [75, 76, 88]. Em tal método, revisado na Ref. [89], a perturbação externa sobre o sistema é determinada após cada instante de tempo, de tal forma a influenciar o observável alvo. Portanto, nosso método e a TCL possuem as mesmas características de não demandar informações sobre dinâmicas temporais prévias — apesar do processo ser iterativo — típicas de uma abordagem de otimização global. No entanto, tecnicamente os dois métodos são diferentes. Na teoria do controle local podemos considerar o pulso externo dependente do tempo para a qual faz-se necessário solucionar a equação de Schrödinger dependente do tempo. Com isso derivam-se relações de razão que fornecem a informação de como os níveis de energia ou suas populações variam com o tempo. Escolhendo apropriadamente o campo externo em cada t — a equação de onda dependente do tempo no mesmo t — é possível: mudar as energias dos estados monotonicamente, aprisionar a população de um determinado conjunto de níveis, congelar os graus de liberdades internos de um sistema, como por exemplo, os modos vibracionais de uma molécula etc. Nosso método caminha em uma direção diferente. Primeiro, focamos o controle diretamente sobre um valor esperado relevante, ao invés de sua variação temporal. Então, nosso método pode ser facilmente aplicado se conhecermos a forma específica de $S(t)$, enquanto a TCL pode ser mais apropriada se há somente variações monotônicas — ou nenhuma variação — do observável alvo. Segundo, o método requer uma característica diferente para o campo externo, enquanto na TCL é basicamente uma sequência de pulsos. Portanto, a configuração experimental necessária para a implementação de ambos pode ser diferente.

Discutimos o método no contexto de um sistema de dois níveis, no entanto, a abordagem pode ser estendida para uma situação mais geral contendo N níveis. Neste caso a principal equação de controle é uma generalização direta (mas é claro,

uma versão muito mais complicada) da Eq. (2.11). Além disso, o caso do controle total requer um potencial multi-paramétrico $U(\lambda_1, \dots, \lambda_M)$, a análise do quão geral o método pode ser aplicado e quais as condições para o controle, envolve o mesmo tipo de discussão feito na demonstração 2.4.3 mas agora para um sistema multi-dimensional no espaço dos parâmetros. É viável no entanto, desde que existam diferentes técnicas eficientes, classificar a possível dinâmica resultante de um sistema em termos de seus parâmetros, usados, por exemplo, para sistemas complexos tais como sistemas biológicos [90]. Técnicas similares já são empregadas em experimentos envolvendo a técnica de *closed loop learning quantum control* para mais de 130 parâmetros independentes — veja, por exemplo [91] e suas referências.

Finalmente, observe que usamos o fato do Hamiltoniano de um sistema de dois níveis ser exatamente diagonalizável (conforme as Eqs. (2.2) e (2.3)) para obter uma solução analítica explícita dependente de $S(t)$ em relação aos parâmetros externos. Então, todo trabalho numérico é reduzido a resolver $S(t) = \tilde{S}$. Este não é o caso para um sistema de N -níveis (na verdade, para três níveis ainda é possível obter-se uma solução fechada [92]). Para uma matriz Hermiteana de $N \times N$, análogo à Eq. (2.1), precisamos resolver numericamente a diagonalização. Neste caso, o método de controle paramétrico independente do tempo por partes é implementado através de dois passos. Para cada intervalo de tempo Δt_j , fixamos os valores dos parâmetros, em seguida diagonalizamos o Hamiltoniano, então encontramos numericamente os N coeficientes $C_n(t)$ para serem inseridos na extensão apropriada da Eq. (2.11). Depois, determinamos se em Δt_j o termo $|S(t) - \tilde{S}|$ está perto o suficiente de zero, e deste modo, decidindo se um novo conjunto de valores de parâmetros deve ser testado para Δt_j . Desde que utilizemos, digamos, uns 100 estados para o cálculo numérico de H , este procedimento é ainda rápido em qualquer computador pessoal. Deste modo, o nosso método é ainda funcional, demandando um tempo computacional relativamente baixo para dezenas de níveis.

3

CONTROLE QUÂNTICO EM UM SISTEMA DE TRÊS NÍVEIS

Neste capítulo mostraremos como estabelecer o controle paramétrico sobre um observável geral de interesse para um sistema de três níveis. Na Seção 3.1 apresentamos as características físicas do sistema e do campo externo paramétrico de controle, e na Seção 3.2 calculamos o vetor de estado associado com o campo externo de controle. Os resultados e exemplos são apresentados na Seção 3.3 e as conclusões sobre este capítulo são endereçadas à Seção 3.4.

O controle da dinâmica de sistemas quânticos através do campo externo de um laser tem recebido recentemente considerável atenção teórica [26]. Nesse contexto, o problema de um sistema constituído por três níveis tem-se tornado fundamental na investigação de novos fenômenos em espectroscopia e ótica quântica [38]. O uso dessas fontes de luz coerentes e configuráveis nesses tipos de sistemas tem permitido atingir novas fronteiras em espectroscopia de alta precisão, e com o desenvolvimento de pulsos de luz altamente controlados tem sido possível obter efeitos de transições coerentes e fenômenos de controle de transferência de população [93–95].

Entre os fenômenos observados nos problemas relacionados com o sistema

de três níveis, destacamos os efeitos de transferência adiabática [96] (STIRAP)¹ e não adiabática [97] de população, a criação de estados aprisionados [98, 99] e a transparência quântica induzida eletromagneticamente (EIT) [100, 101]. As primeiras investigações sobre os fenômenos adiabáticos em um sistema de três níveis foram realizadas por F. T. Hioe e colaboradores [102]; recebendo também atenção de outros pesquisadores [103–105]. No entanto, de um ponto de vista mais realístico esses efeitos tornaram-se importantes com os trabalhos de K. Bergmann *et al.* [106–110]. A partir daí, muitos estudos experimentais foram desenvolvidos para este tipo de sistema [95, 111–113].

Uma aplicação interessante para o processo de STIRAP em moléculas, consiste na seleção e controle de um estado excitado específico para uma molécula em níveis vibracionais elevados — veja uma discussão sobre este tema na Ref. [114]. Para alguns sistemas moleculares, tais como nas moléculas de NO e SO₂, a condição de transferência adiabática é conseguida através da aplicação de lasers pulsados [113, 115].

Neste capítulo estudamos o processo de controle paramétrico de um observável qualquer para um sistema de três níveis. Para o sistema, escolhemos energias típicas de estados vibracionais moleculares [15] em que todas as transições são permitidas. Isto é uma generalização, já que estamos aptos a proibir algumas transições específicas se assim desejarmos. Utilizamos para o controle o mesmo protocolo já desenvolvido no Capítulo 2, isto é, um procedimento de controle independente do tempo por partes [51]. Não obstante, conseguimos testar a sensibilidade do método a pequenos erros aleatórios introduzidos no campo externo.

¹*STImulated RAman Adiabatic Passage.*

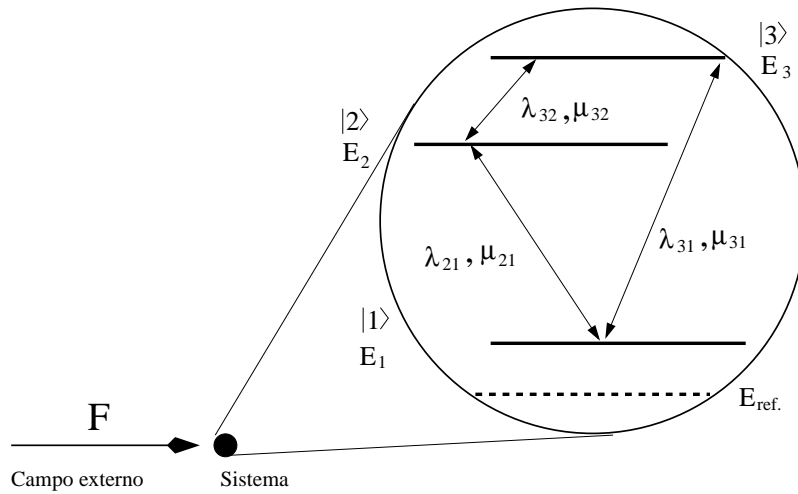


Fig. 3.1: Representação esquemática de um sistema de três níveis na presença de um campo externo paramétrico F . O estado inicial do sistema é caracterizado pela superposição dos estados de base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ com energias E_1 , E_2 e E_3 . Os parâmetros λ_{21} , λ_{31} e λ_{32} são definidos pelas diferenças de energia entre os níveis, e os momentos de dipolo da transição são caracterizados por μ_{21} , μ_{31} e μ_{32} . Os valores dos parâmetros estão definidos no próprio texto.

3.1 O SISTEMA

Considere um sistema Hamiltoniano H_0 constituído por três estados, com bases representadas por

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

e com energias próprias correspondentes E_1 , E_2 e E_3 , com estados mutuamente acoplados. Veja a Fig. 3.1. Vamos admitir também um campo externo clássico \vec{F} interagindo com o sistema de tal forma que o potencial de interação seja representado pela relação $U = \vec{\mu}(\vec{r}) \cdot \vec{F}$, sendo $\vec{\mu}(\vec{r})$ o operador momento de dipolo elétrico².

²Por simplicidade vamos admitir um campo externo linearmente polarizado ao longo de um eixo específico $\vec{F} = F\hat{e}$.

Portanto, o Hamiltoniano total é dado por

$$H = H_0 + U \quad .$$

Este operador pode ser representado pela seguinte matriz:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & u_{12}e^{-i\varphi_{12}} & u_{13}e^{-i\varphi_{13}} \\ u_{12}e^{i\varphi_{12}} & E_2 & u_{23}e^{-i\varphi_{23}} \\ u_{13}e^{i\varphi_{13}} & u_{23}e^{i\varphi_{23}} & E_3 \end{pmatrix} , \quad (3.2)$$

para $u_{mn} = \mu_{mn}f$ e $\varphi_{mn} = \xi_{mn} + \phi$, sendo f e ϕ respectivamente a amplitude e a fase do campo externo. Os elementos que compõem a matriz (3.2) foram obtidos admitindo-se uma interação campo-sistema da forma dipolar, isto é, $\hat{\mu} = \hat{x}$, tal que $\langle n|U|n \rangle = 0$ ($n = 1, 2, 3$), caso típico de moléculas sem momento de dipolo permanente. A seguir apresentamos a demonstração de como chegar na Eq. (3.2) partindo da interação de dipolo.

Demonstração

Admitindo um operador Hamiltoniano dado por $H = H_0 + qx F$, sendo q a carga da partícula, então os elementos da matriz que compõem o operador são dados por³

$$\langle m|H|n \rangle = E_n \delta_{mn} + q \langle m|x|n \rangle F \quad \text{para} \quad (m, n = 1, 2, 3) \quad . \quad (3.3)$$

Na expressão acima δ_{mn} representa a função delta de Kronecker, e o termo $q \langle m|x|n \rangle$, após realizada as integrações nas bases do Hamiltoniano H_0 , pode ser representado por um número complexo D_{mn} de modo que

$$q \langle m|x|n \rangle = D_{mn} = \mu_{mn} e^{-i\xi_{mn}} \quad \text{e} \quad F = f e^{-i\phi} \quad . \quad (3.4)$$

Das Eqs. (3.3) e (3.4) podemos escrever

$$H_{mn} = \langle m|H|n \rangle = E_n \delta_{mn} + \mu_{mn} f e^{-i(\xi_{mn} + \phi)} ,$$

³Em princípio, podemos admitir um campo externo F dependente do tempo, de modo que $F = F(t)$ e com isso, $H = H(t)$.

sendo conveniente definir as seguintes relações

$$u_{mn} = \mu_{mn}f \quad \text{e} \quad \varphi_{mn} = \xi_{mn} + \phi \quad .$$

Com isso, finalmente obtemos uma relação para os elementos que compõem o operador Hamiltoniano:

$$H_{mn} = E_n \delta_{mn} + u_{mn} e^{-i\varphi_{mn}} \quad .$$

Para chegar à Eq. (3.2) admitimos $D_{mm} = 0$, ou seja, $u_{mm} = 0$, relação válida para sistemas com paridade definida.

3.2 A EVOLUÇÃO TEMPORAL DO SISTEMA

Para descrever a dinâmica quântica de uma partícula representada por um sistema de três níveis, interagindo com um potencial dependente do tempo precisamos, em princípio, resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t) |\psi(t)\rangle \quad ,$$

sendo $|\psi(t)\rangle$ o estado do sistema e $H(t)$ o Hamiltoniano dependente do tempo. No entanto, a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo demanda consideráveis esforços (veja por exemplo o Capítulo 5), sendo necessárias análises teóricas mais avançadas.

Essas complicações técnicas podem ser evitadas se considerarmos um campo externo independente do tempo por partes. Esta abordagem foi elaborada e aplicada com sucesso para um sistema de dois níveis (veja o Capítulo 2 e a Ref. [51]).

Para isso, vamos considerar um campo externo caracterizado por f e ϕ independente do tempo no intervalo $\Delta t_{j+1} = t_{j+1} - t_j$ ($j = 0, 1, 2, \dots$) cujos valores podem ser configurados neste intervalo para f_j e ϕ_j . Nessas condições, podemos simplificar o problema calculando o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ por meio da equação de Schrödinger

independente do tempo, e neste caso, para cada intervalo, a solução torna-se um problema de valor próprio, isto é,

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad ,$$

sendo H descrito pela Eq. (3.2).

Para encontrar os estados próprios devemos diagonalizar a matriz H resolvendo-se a equação secular $\det(H - E\mathbb{1}) = 0$, de tal forma que os valores próprios do sistema podem ser encontrados analiticamente por meio do método de Cardano [92], o qual relaciona o problema de valores próprios com a solução de uma equação polinomial cúbica. Portanto, os três valores próprios são as raízes da seguinte polinômio:

$$E^3 + p_1E^2 + p_2E + p_3 = 0$$

tal que p_1 , p_2 e p_3 estão relacionados com os elementos da matriz (3.2) pelas seguintes relações:

$$\begin{aligned} -p_1 &= \text{tr}H = \sum_i E_i \quad , \\ p_2 &= \frac{1}{2}[(\text{tr}H)^2 - \text{tr}(H^2)] = \sum_{i \neq j} E_i E_j \quad \text{e} \\ -p_3 &= \det H = \prod_i E_i \quad , \end{aligned}$$

para $i, j = a, b, c$ sendo os E_i 's as três energias próprias quando o sistema interage com o campo externo. Essas energias podem ser encontradas pela seguinte expressão

$$E_i = r_i - \frac{p_1}{3} \quad ,$$

para r_a , r_b e r_c dados por:

$$r_a = x_0 + y_0 \quad , \quad r_b = -\frac{1}{2}(x_0 + y_0) + \frac{\sqrt{3}}{2}(x_0 - y_0)i \quad , \quad r_c = -\frac{1}{2}(x_0 + y_0) - \frac{\sqrt{3}}{2}(x_0 - y_0)i \quad .$$

$$x_0 = (-v + \sqrt{v^2 + u^3})^{1/3} \quad \text{e} \quad y_0 = (-v - \sqrt{v^2 + u^3})^{1/3} \quad .$$

$$3u = -\frac{1}{3}(p_1^2 - 3p_2) \quad \text{e} \quad 2v = \frac{1}{27}(2p_1^3 - 9p_1p_2 + 27p_3) \quad .$$

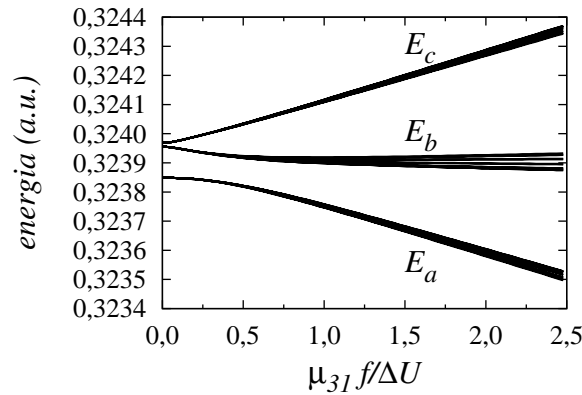


Fig. 3.2: Níveis de energia E_a , E_b e E_c (em unidades atômicas) em função do campo externo F para $\Delta U = E_3 - E_1$. Na ausência do campo externo os níveis convergem para $E_1 = 0,323849$ a.u., $E_2 = 0,323956$ a.u. e $E_3 = 0,323968$ a.u.. Para campos externos intensos as energias tendem a um comportamento linear. Os valores dos parâmetros estão definidos no texto.

Na Fig. 3.2 mostramos o gráfico das energias em função do campo externo aplicado. Em um regime de campos intensos as energias apresentam um comportamento linear. Na figura podemos observar a influência da intensidade do campo f e da fase ϕ na separação dos níveis. Para $f = 0$ os níveis naturalmente devem coincidir com os níveis E_1 , E_2 e E_3 .

No entanto, precisamos ainda encontrar os estados próprios de H , que podemos representar na base de H_0 por

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix}, \quad |b\rangle = \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |c\rangle = \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

sendo as componentes desses vetores, em geral, números complexos. Embora tenhamos uma solução analítica para as componentes desses vetores, optamos por realizar esta tarefa numericamente⁴, através da diagonalização da matriz (3.2).

⁴Com as soluções analíticas para os valores próprios podemos encontrar uma solução analítica para os vetores próprios de H . No entanto, as expressões obtidas não são práticas para os cálculos computacionais exigidos para o controle. Por esta razão, optamos pela diagonalização numérica da

3.2.1 O VETOR DE ESTADO

Sob a ação de H a evolução temporal do estado inicial $|\psi(t_0)\rangle = C_1(t_0)|1\rangle + C_2(t_0)|2\rangle + C_3(t_0)|3\rangle$ é dada por

$$|\psi(t)\rangle = C_1(t)|1\rangle + C_2(t)|2\rangle + C_3(t)|3\rangle \quad , \quad (3.7)$$

para

$$C_1(t) = \mathcal{N}^{-1}[a_x \exp(-iE_a \Delta t/\hbar)R_a + b_x \exp(-iE_b \Delta t/\hbar)R_b + c_x \exp(-iE_c \Delta t/\hbar)R_c] \quad ,$$

$$C_2(t) = \mathcal{N}^{-1}[a_y \exp(-iE_a \Delta t/\hbar)R_a + b_y \exp(-iE_b \Delta t/\hbar)R_b + c_y \exp(-iE_c \Delta t/\hbar)R_c] \quad ,$$

$$C_3(t) = \mathcal{N}^{-1}[a_z \exp(-iE_a \Delta t/\hbar)R_a + b_z \exp(-iE_b \Delta t/\hbar)R_b + c_z \exp(-iE_c \Delta t/\hbar)R_c] \quad ,$$

$$\mathcal{N} = a_x b_y c_z + a_y b_z c_x + a_z b_x c_y - (a_x b_z c_y + a_y b_x c_z + a_z b_y c_x) \quad ,$$

$$R_a = (b_y c_z - b_z c_y)C_1(t_0) + (b_z c_x - b_x c_z)C_2(t_0) + (b_x c_y - b_y c_x)C_3(t_0) \quad ,$$

$$R_b = (a_z c_y - a_y c_z)C_1(t_0) + (a_x c_z - a_z c_x)C_2(t_0) + (a_y c_x - a_x c_y)C_3(t_0) \quad ,$$

$$R_c = (a_y b_z - a_z b_y)C_1(t_0) + (a_z b_x - a_x b_z)C_2(t_0) + (a_x b_y - a_y b_x)C_3(t_0) \quad .$$

Com isso, conseguimos determinar completamente o estado do sistema em um instante de tempo t quando o estado inicial está sob a influência de um campo externo independente do tempo. Para isso basta conhecer as componentes do vetor de estado e as energias próprias do sistema. A seguir apresentaremos uma demonstração da Eq. (3.7).

Demonstração

A seguir vamos demonstrar como encontrar uma expressão para o estado do sistema escrito com as bases de H_0 . Esta tarefa consiste em realizar uma mudança de base no sistema.

O vetor de estado é escrito na base $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle\}$ como

$$|\psi(t)\rangle = C_a \exp(-iE_a t/\hbar)|a\rangle + C_b \exp(-iE_b t/\hbar)|b\rangle + C_c \exp(-iE_c t/\hbar)|c\rangle \quad , \quad (3.10)$$

Eq. (3.2).

e o estado inicial é dado por

$$|\psi(t_0)\rangle = C_1(t_0)|1\rangle + C_2(t_0)|2\rangle + C_3(t_0)|3\rangle \quad . \quad (3.11)$$

A relação de bases é dada por ($B_{int} = TB_0$)

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \\ c_x & c_y & c_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad . \quad (3.12)$$

A mudança de base é realizada através da matriz inversa $B_0 = T^{-1}B_{int}$, tal que

$$T^{-1} = \frac{1}{\mathcal{N}} \begin{pmatrix} b_y c_z - b_z c_y & a_z c_y - a_y c_z & a_y b_z - a_z b_y \\ b_z c_x - b_x c_z & a_x c_z - a_z c_x & a_z b_x - a_x b_z \\ b_x c_y - b_y c_x & a_y c_x - a_x c_y & a_x b_y - a_y b_x \end{pmatrix} \quad , \quad (3.13)$$

$$\mathcal{N} = a_x b_y c_z + a_y b_z c_x + a_z b_x c_y - (a_x b_z c_y + a_y b_x c_z + a_z b_y c_x) \quad . \quad (3.14)$$

Com isso podemos escrever os estados $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ em termos dos estados $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle\}$.

Aplicando esta nova base na Eq. (3.11) e comparando-se com a Eq. (3.10) para $t = t_0$, obtemos a seguinte relação:

$$R_a = (b_y c_z - b_z c_y)C_1(t_0) + (b_z c_x - b_x c_z)C_2(t_0) + (b_x c_y - b_y c_x)C_3(t_0) \quad ,$$

$$R_b = (a_z c_y - a_y c_z)C_1(t_0) + (a_x c_z - a_z c_x)C_2(t_0) + (a_y c_x - a_x c_y)C_3(t_0) \quad ,$$

$$R_c = (a_y b_z - a_z b_y)C_1(t_0) + (a_z b_x - a_x b_z)C_2(t_0) + (a_x b_y - a_y b_x)C_3(t_0) \quad ,$$

e

$$\begin{aligned} C_a &= \frac{1}{\mathcal{N}} \exp(iE_a t_0/\hbar) R_a \quad , \\ C_b &= \frac{1}{\mathcal{N}} \exp(iE_b t_0/\hbar) R_b \quad , \\ C_c &= \frac{1}{\mathcal{N}} \exp(iE_c t_0/\hbar) R_c \quad . \end{aligned}$$

Conduzindo ao estado descrito pela Eq. (3.7)

$$|\psi(t)\rangle = C_1(t)|1\rangle + C_2(t)|2\rangle + C_3(t)|3\rangle \quad ,$$

$$\begin{aligned}
C_1(t) &= \mathcal{N}^{-1} [a_x \exp(-iE_a \Delta t / \hbar) R_a + b_x \exp(-iE_b \Delta t / \hbar) R_b + c_x \exp(-iE_c \Delta t / \hbar) R_c] \quad , \\
C_2(t) &= \mathcal{N}^{-1} [a_y \exp(-iE_a \Delta t / \hbar) R_a + b_y \exp(-iE_b \Delta t / \hbar) R_b + c_y \exp(-iE_c \Delta t / \hbar) R_c] \quad , \\
C_3(t) &= \mathcal{N}^{-1} [a_z \exp(-iE_a \Delta t / \hbar) R_a + b_z \exp(-iE_b \Delta t / \hbar) R_b + c_z \exp(-iE_c \Delta t / \hbar) R_c] \quad .
\end{aligned}$$

3.2.2 O VALOR ESPERADO

Usualmente o objetivo da aplicação de qualquer técnica de controle em mecânica quântica, é manipular apropriadamente alguma grandeza física mensurável do sistema. Isto se faz, estabelecendo o controle sobre o valor esperado de um determinado observável de interesse, que podemos representar por um operador V . Este operador pode representar por exemplo, o operador posição, e neste caso temos a possibilidade de manipular a posição do sistema em estudo. Se pensarmos no operador V como um operador momento linear, então podemos controlar a velocidade do sistema. Este operador pode ser interessante para aplicações, por exemplo, em átomos frios. Podemos pensar ainda em outros operadores importantes, como a população de um determinado nível de energia ou o operador momento angular. Portanto, como estamos interessados em um controle geral, representaremos o observável de interesse simplesmente pelo operador V . Em outras palavras, buscamos por um campo externo paramétrico que conduza $S(t)$ para um determinado valor \tilde{S} em $t = \tilde{t}$. Matematicamente, o campo externo, o sistema e o operador observável estão relacionados por

$$S(t) = \langle \psi(t) | V | \psi(t) \rangle \quad \text{para} \quad V = \begin{pmatrix} V_1 & v_{12} e^{-i\alpha_{12}} & v_{13} e^{-i\alpha_{13}} \\ v_{12} e^{i\alpha_{12}} & V_2 & v_{23} e^{-i\alpha_{23}} \\ v_{13} e^{i\alpha_{13}} & v_{23} e^{i\alpha_{23}} & V_3 \end{pmatrix} \quad , \quad (3.18)$$

sendo V escrito na base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ (com V_m, v_{mn} reais e $0 \leq \alpha_{mn} \leq 2\pi$ para $m, n = 1, 2, 3$) e $|\psi(t)\rangle$ dado pela Eq. (3.7). Partindo da Eq. (3.18) chegamos facilmente a

seguinte relação

$$\begin{aligned}
 S(t) &= V_1|C_1(t)|^2 + V_2|C_2(t)|^2 + V_3|C_3(t)|^2 + 2v_{12}Re[C_1(t)C_2^*(t)e^{i\alpha_{12}}] \\
 &+ 2v_{13}Re[C_1(t)C_3^*(t)e^{i\alpha_{13}}] + 2v_{23}Re[C_2(t)C_3^*(t)e^{i\alpha_{23}}] \quad . \quad (3.19)
 \end{aligned}$$

O controle quântico é estabelecido a partir de uma imposição para o valor esperado do observável, isto é, fazendo-se $S(\tilde{t}) = \tilde{S}$ na Eq. (3.19) para então buscarmos por um campo específico f e ϕ que conduza o sistema a esse valor esperado específico. Este procedimento consiste em buscar uma solução inversa, para a qual a relação entre o campo externo e valor esperado do observável não é direta. Na verdade, diferentemente do caso para os dois níveis [51], agora não dispomos de uma relação explícita entre os parâmetros de controle e o valor esperado do observável. Porém, esta relação pode ser implementada facilmente em qualquer algoritmo numérico. O procedimento de controle por uma “trajetória” específica segue o mesmo protocolo descrito na Ref. [51], e na Seção 2.2, mas que vamos resumir à seguir.

1. Definimos um conjunto de intervalos de tempo $\{\Delta t_j\}$. Na prática as escolhas desses intervalos dependem de características de quão rápido os parâmetros do Hamiltoniano podem ser modificados, e o quão próximo do alvo queremos atingir.
2. Para cada Δt_j escolhemos um \tilde{t} para o qual $S(\tilde{t})$ assume um valor desejado \tilde{S} . O valor exato de \tilde{t} não é muito importante para Δt_j pequeno. Nas simulações utilizamos $\tilde{t} = t_{j+1}^-$.
3. Finalmente, em $t = \tilde{t}$, resolvemos apropriadamente a Eq. (3.19) para os corretos valores de f e ϕ no intervalo.

Para os cálculos da diagonalização da matriz utilizamos a rotina numérica `gsl_eigen_hermv` disponível na biblioteca *GNU Scientific Library - GSL* [116]. Para os cálculos da solução inversa utilizamos uma rotina numérica denominada `zbrent`, obtida na Ref. [117], que combina dois métodos distintos: o método seguro de busca

de raízes (método da bisseção) com um método rápido de busca (método de Newton-Raphson).

3.3 RESULTADOS E EXEMPLOS

Nesta seção discutiremos alguns resultados e exemplos mostrando a potencialidade do método. Discutiremos alguns aspectos importantes sobre a controlabilidade de um sistema quântico. Admitiremos em todas as aplicações as seguintes energias (no sistema atômico de unidades no qual $\hbar = m = e = 1$) $E_1 = 0,323849$ a.u., $E_2 = 0,323956$ a.u. e $E_3 = 0,323968$ a.u., tal que $\Delta U = E_3 - E_1 = 0,119 \times 10^{-3}$ a.u.. As transições correspondentes são: $\lambda_{21} = 426,2\mu\text{m}$, $\lambda_{32} = 3800,2\mu\text{m}$ e $\lambda_{31} = 383,2\mu\text{m}$, calculados a partir da relação $\lambda_{ji} = hc/(E_j - E_i)$. Esse espectro de energia corresponde a valores típicos do espectro vibracional molecular da molécula de DH_2 [15]. Para os momentos de dipolo utilizamos, $\mu_{12} = 1/10$ a.u. e $\mu_{13} = \mu_{23} = 1$ a.u.. Para o operador observável na Eq. (3.18) utilizamos $V_1 = 1$, $V_2 = 3$, $V_3 = 4$, $v_{12} = \sqrt{3}$, $v_{13} = 1/2$, $v_{23} = \sqrt{2}$, $\alpha_{12} = \pi/2$, $\alpha_{13} = 0$ e $\alpha_{23} = \pi/4$ em unidades arbitrárias.

Como primeira análise vamos considerar o sistema inicialmente preparado ($t_0 = 0$) em um estado caracterizado por $\mathcal{C}_A = \{C_1 = \exp[i\pi/4]/\sqrt{2}, C_2 = \exp[i\pi/6]/2, C_3 = 1/2\}$. Na ausência do campo externo o valor esperado do observável V evolui de acordo com a Fig. 3.3(a). Na Fig. 3.3(b) mostramos $S(t)$ evoluindo livremente para um estado inicial caracterizado por $\mathcal{C}_B = \{C_1 = 0,162003 \exp[i3,141593], C_2 = 0,983033 \exp[i0,5041081], C_3 = 0,071858 \exp[i0,988639]\}$. A comparação entre as Figs. 3.3(a) e 3.3(b) nos mostra uma forte dependência da evolução temporal do valor esperado com relação ao estado inicial. No primeiro caso as oscilações em $S(t)$ ocorrem em uma janela que varia entre 0 e 4, enquanto no segundo caso, a janela de oscilação em $S(t)$ é bem menor, variando aproximadamente entre 2,1 e 3,6. Com isso observamos que a preparação do estado quântico é determinante no comportamento de um sistema quântico. Como veremos adiante, o estado inicial é fundamental também quando queremos re-

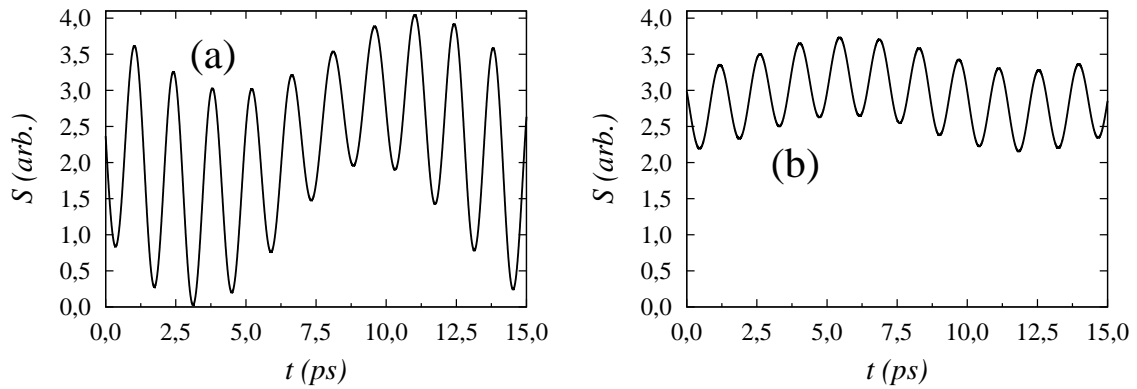


Fig. 3.3: Valor esperado do observável $S(t)$ para um sistema de três níveis na ausência de campo externo. (a) Para o estado inicial definido pelo conjunto \mathcal{C}_A (ver detalhes no texto) e (b) para o estado inicial \mathcal{C}_B .

alizer um “bom” controle sobre um observável de interesse. Agora vamos aplicar um campo externo, e com isso passaremos a interferir na dinâmica quântica do sistema. Suponha então que queiramos, de algum modo, “eliminar” as oscilações em $S(t)$. Então, a pergunta que devemos responder é: como deve ser o campo externo aplicado para que se elimine essas oscilações? Para responder esta pergunta vamos escolher como trajetória alvo uma constante, que podemos definir *a priori* como sendo $\tilde{S}(t) = 2,0$. Com a trajetória alvo definida, resolvemos a Eq. (3.19) para os parâmetros f e ϕ . Com isso obtemos o conjunto de parâmetros f_i e ϕ_i que conduz o sistema à trajetória alvo previamente escolhida. Nas Figs. 3.4(b) e (c) mostramos a configuração desses parâmetros respectivamente, e na Fig. 3.4(a) mostramos $S(t)$ quando o campo interage com o sistema para um estado inicial caracterizado pelo conjunto \mathcal{C}_A . Comparando as Fig. 3.3(a) e 3.4(a), podemos observar como a dinâmica de $S(t)$ foi significativamente alterada com a presença do campo, ou seja, aplicando um campo paramétrico conseguimos de fato eliminar as oscilações de $S(t)$. Esta comparação aponta para uma boa eficiência do controle através de campos externos configuráveis. No entanto, assim como no caso para dois níveis [51], podemos propor outros alvos para o controle. Vejamos agora como podemos fazer o controle para uma trajetória alvo mais elaborada, que podemos descrever pela seguinte equação:

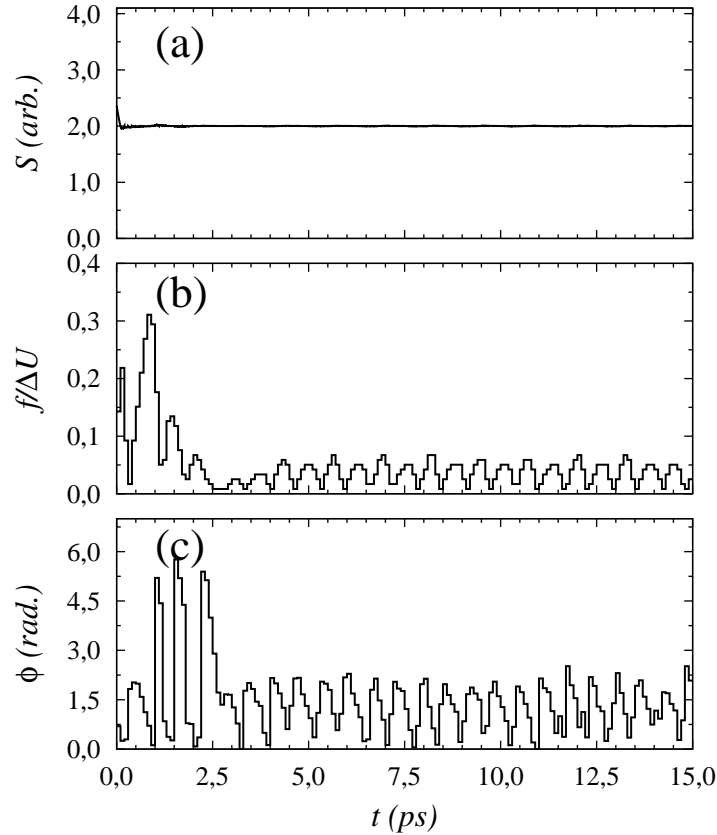


Fig. 3.4: (a) $S(t)$ configurado como um valor constante no tempo para um estado inicial caracterizado por \mathcal{C}_A . Em (b) e (c) mostramos respectivamente os ajustes dos parâmetros f e ϕ que conduzem o sistema à trajetória alvo $S(t)$.

$S(t) = S_0 + S_1 \exp[-\sigma_1(t - t_1)^2] + S_2 \exp[-\sigma_2(t - t_2)^2]$, a qual descreve basicamente duas Gaussianas centradas em diferentes instantes de tempo. Considerando o estado inicial dado pelo conjunto \mathcal{C}_A , apresentamos na Fig. 3.5(a) (curva contínua) o valor esperado resultante do campo de controle mostrado nas Figs. 3.5(b) e (c). Neste caso utilizamos os seguintes parâmetros em $S(t)$: $S_0 = 2,1$, $S_1 = -1,1$, $S_2 = 1,5$, $\sigma_1 = \sigma_2 = 1,54\text{ps}^{-2}$, $t_1 = 3,0\text{ps}$ e $t_2 = 10,0\text{ps}$, tal que $S_{min} = 1,0$, $S_{max} = 3,6$ e $\Delta S_A = S_{max} - S_{min} = 2,6$.

Na Fig. 3.5(d) (curva contínua) mostramos $S(t)$ resultante do campo de controle mostrado nas Figs. 3.5(e) e (f) para o estado inicial caracterizado pelo conjunto \mathcal{C}_B . Nestes casos utilizamos $S_0 = 2,9$, $S_1 = -0,9$, $S_2 = 0,7$, $\sigma_1 = \sigma_2 = 1,54\text{ps}^{-2}$,

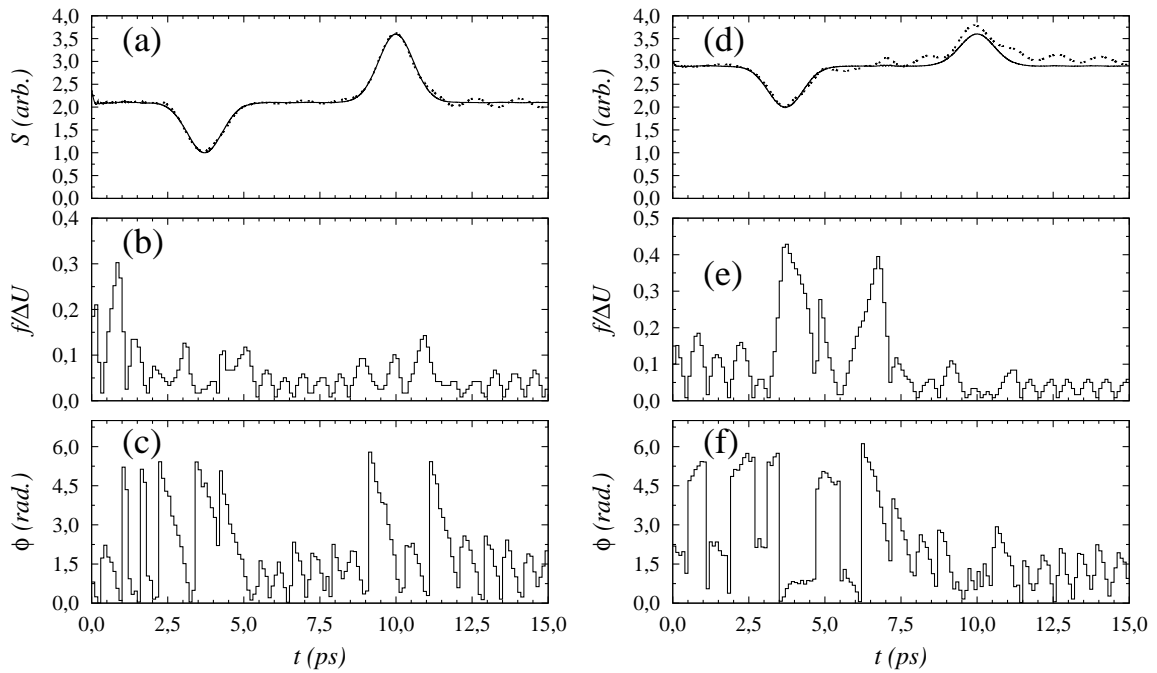


Fig. 3.5: (a) $S(t)$ quando controlamos os parâmetros (b) f e (c) ϕ (curva contínua) para um estado inicial caracterizado pelo conjunto \mathcal{C}_A . Em (d), (e) e (f) mostramos o controle para o estado inicial \mathcal{C}_B . As curvas tracejadas representam $S(t)$ para pequenos erros aleatórios nos conjuntos dos parâmetros $\{f_j\}$ e $\{\phi_j\}$.

$t_1 = 3,0\text{ps}$ e $t_2 = 10,0\text{ps}$, tal que $S_{min} = 2,0$, $S_{max} = 3,6$ e $\Delta S_B = S_{max} - S_{min} = 1,6$.

O esquema de controle proposto é baseado na busca de parâmetros. Então é de fundamental importância saber como estes parâmetros estão relacionados com os parâmetros de um potencial externo, como por exemplo, o campo de um laser, produzido em condições de laboratório. De maneira usual, para a aproximação dipolar negligenciamos as variações espaciais do campo, porém, dispomos ainda de um perfil temporal. Este perfil pode ser encontrado diretamente da expressão para F de tal forma que $\epsilon = f \exp(-i\phi)/2 + c. c.$, como mostrado na Fig. 3.6(a) para a condição inicial \mathcal{C}_A e na Fig. 3.6(b) para a condição inicial \mathcal{C}_B para os casos descritos na Fig. 3.5.

Testamos também a sensibilidade do método a erros no campo paramétrico. Nas Figs. 3.5(a) e (d) (curva pontilhada) traçamos o gráfico de $S(t)$ quando intro-

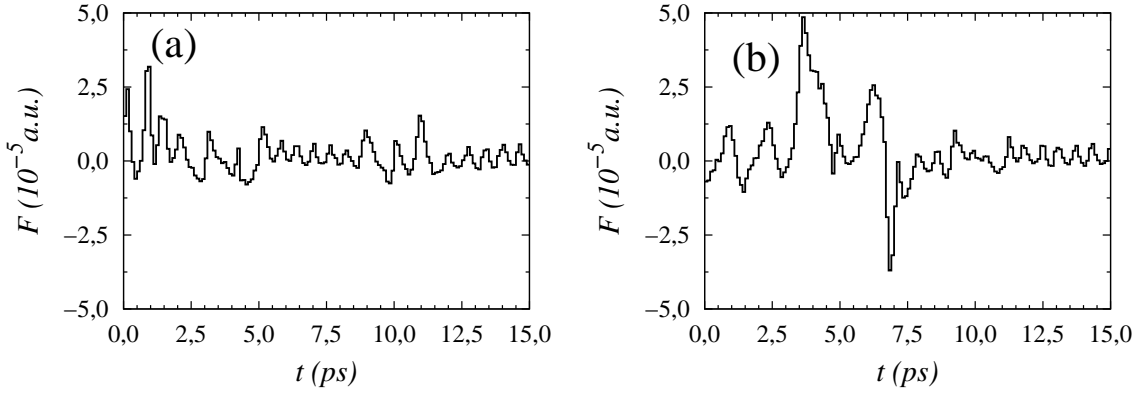


Fig. 3.6: Perfil do campo de controle para a situação descrita na Fig. 3.5. Em (a) mostramos o perfil do campo para a condição inicial \mathcal{C}_A e em (b) para o estado inicial \mathcal{C}_B .

duzimos pequenos erros aleatórios em f e ϕ simultaneamente. Para o estado inicial \mathcal{C}_A , consideramos como campo de controle os parâmetros $f_j + \delta f_j$ e $\phi_j + \delta \phi_j$ sendo δf_j e $\delta \phi_j$ valores aleatórios entre $(-f_j/20, f_j/20)$ e $(-\phi_j/20, \phi_j/20)$; tal que a largura do intervalo de erros corresponde a 10% dos valores corretos para f_j e ϕ_j . Neste caso, o controle se mostrou bastante robusto à introdução de erros nos parâmetros do campo. Para a condição inicial \mathcal{C}_B introduzimos erros aleatórios entre $(-f_j/20, f_j/20)$ e $(-\phi_j/6, \phi_j/6)$; tal que a largura do intervalo de erros corresponde a 10% dos valores corretos para f_j e 3% para ϕ_j . Neste caso o controle foi mais sensível a introdução de erros, especialmente no parâmetro ϕ_j que está relacionado com a fase do campo externo.

Na Fig. 3.7(a) mostramos o controle para uma trajetória alvo variando entre dois valores, a saber, $S_{min} = 1,2$ e $S_{max} = 3,6$. A trajetória alvo utilizada foi definida pela seguinte equação: $S(t) = \Delta S \chi(t) + S_{min}$, para $\Delta S = S_{max} - S_{min}$ e $\chi(t) = 1/2 + \arctan[\alpha(t - t_0)]/\pi$. Como parâmetros utilizamos $\alpha = 2,0\text{ps}^{-1}$ e $t_0 = 7,5\text{ps}$. No limite de $\alpha \rightarrow \infty$ a trajetória alvo tende a função degrau $\Theta(t - t_0)$. Na Fig. 3.7(b) e (c) podemos notar que o campo externo paramétrico apresenta uma variação mais acentuada em torno de $t = 7,5\text{ps}$, isto ocorre porque nesse intervalo de tempo uma transição mais rápida é requerida, exigindo campos mais elevados para que seja realizada a transição.

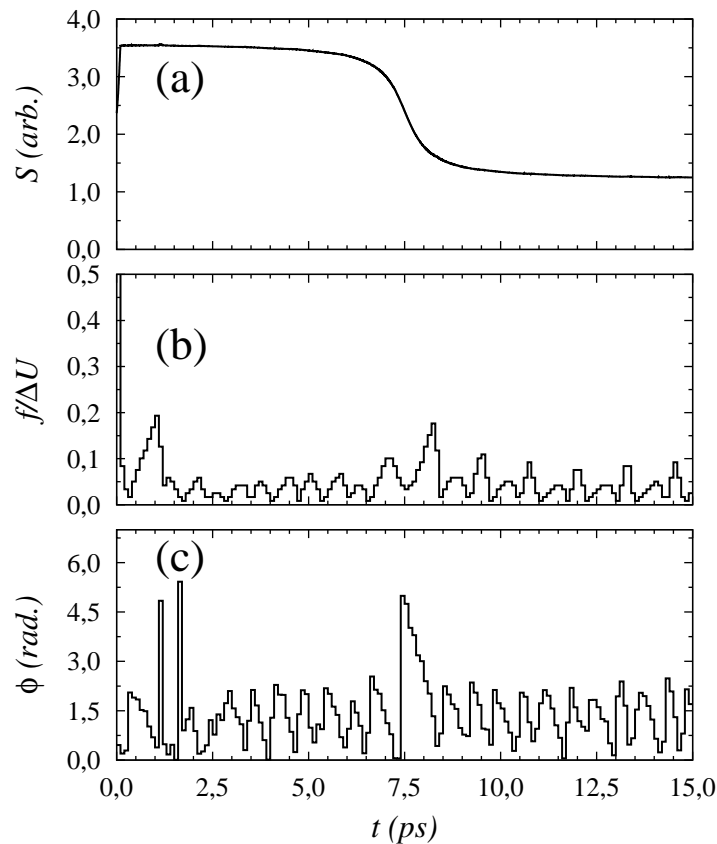


Fig. 3.7: $S(t)$ quando controlamos os parâmetros (b) f e (c) ϕ para um estado inicial caracterizado pelo conjunto \mathcal{C}_A .

A partir dos resultados apresentados nas Figs. 3.5 para as larguras das janelas, isto é, ΔS_A e ΔS_B , observamos que o controle é significativamente afetado pelas condições iniciais impostas ao sistema. Este é um fato totalmente novo já que no trabalho [51] — e apresentado nesta tese no Capítulo 2 — as condições iniciais do sistema não era significativas. Matematicamente, a janela de controle é determinada pelos valores próprios máximo e mínimo do operador observável, calculados através da diagonalização de V na Eq. (3.18) cujos valores correspondentes são: $V_{min} \approx -0,27$ e $V_{max} \approx 5,17$. Isto significa que podemos realizar o controle do observável para qualquer trajetória alvo dentro dessa janela de controle. No entanto, existem regiões onde o controle só é possível sob condições de campo bastante intensos (condições extremas) ocorrendo perdas significativas na qualidade do controle. As condições de

controle tornam-se mais favoráveis quando aproveitamos o comportamento natural do valor esperado do observável, respeitando as características do próprio sistema, que por sua vez depende das condições iniciais, como mostramos nas Figs. 3.3(a) e (b). Em outras palavras, quando o sistema evolui livremente, as próprias amplitudes de oscilação “definem” uma janela de controle favorável para o controle quântico, que denominamos ΔS_A e ΔS_B de acordo com as condições iniciais correspondentes. No entanto, a natureza dessas janelas não está completamente esclarecida, uma vez que não dispomos de uma equação matemática que relacione a qualidade do controle com a posição e a largura da janela.

3.4 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Neste capítulo utilizamos o procedimento de controle inverso independente do tempo por partes para controlar a evolução temporal de um estado quântico e conseqüentemente do valor esperado de um operador relevante em um sistema de três níveis. A solução do problema inverso, isto é, a busca pelo campo paramétrico (como por exemplo o campo externo de um laser) que conduz o sistema a uma correta evolução, mostrou-se relativamente simples, uma vez que ainda precisamos resolver uma equação algébrica, ao invés de um conjunto de equações diferenciais ou integrais. Naturalmente o problema mostrou-se mais complicado que o seu análogo com dois níveis, pois agora, faz-se necessária a diagonalização numérica do Hamiltoniano do sistema, que contém as relações explícitas do processo de interação entre o campo e o sistema. No entanto, alguns testes numéricos mostraram que este procedimento é computacionalmente mais simples que a busca de soluções através da solução de um conjunto de equações diferenciais.

Na Seção 3.3 apresentamos alguns resultados e aplicações da técnica de controle. Mostramos a possibilidade de eliminar as oscilações naturais do valor esperado do observável através da aplicação de um campo externo paramétrico. Mostramos também o controle para trajetórias alvos mais elaboradas como curvas Gaussianas e

com transição suaves entre dois estados alvos.

Para cada caso observamos a existência de uma janela em $S(t)$, onde a qualidade do controle é suficientemente boa para o controle quântico. Resultados qualitativos apontam que esta janela de controle depende fundamentalmente das características físicas e do estado inicial do sistema em estudo (este último está relacionado com a preparação do estado quântico [78]). De um ponto de vista prático precisamos observar a dinâmica natural do sistema e, a partir deste ponto, realizar o controle em torno da “janela” natural de oscilação. Os resultados revelaram também a sensibilidade do controle a pequenos erros aleatórios introduzidos no campo paramétrico de controle para trajetórias alvo suaves, mostrando-se significativamente robusto comparado ao caso já apresentado para o sistema de dois níveis (veja a Seção 2.4.1).

Finalmente, chamamos a atenção do leitor para o fato de que o método foi discutido em um contexto de um sistema de três níveis, interessante por apresentar diversas aplicações. No entanto, esta abordagem pode facilmente ser estendida para uma situação mais geral de N níveis. Nesta situação a principal equação continuará sendo uma expressão similar à Eq. (3.19), mas agora, é claro, em uma versão bem mais complicada. Estas dificuldades surgem devido ao fato de não dispormos mais de uma solução analítica fechada para a diagonalização da matriz Hermiteana $N \times N$. No entanto, podemos ainda diagonalizá-la numericamente e com isso obter os coeficientes $C_n(t)$ que deverão ser aplicados na expressão similar a Eq. (3.19). Com isso calculamos $S(t)$ e determinamos se em $t = t_j$ o valor esperado encontra-se próximo o suficiente do alvo \tilde{S} , onde então decidimos se os novos valores dos parâmetros precisam ser configurados.

CONTROLE DE RECONSTRUÇÕES DE UM PACOTE DE ONDAS EM UM BILHAR CIRCULAR

Neste capítulo mostraremos como melhorar a estrutura de reconstrução de um pacote de ondas Gaussiano com momento linear médio inicial não nulo em um bilhar circular. Para isso, aplicaremos um campo magnético constante, com uma intensidade escolhida de forma apropriada. Investigaremos também como a introdução de pequenas variações nas energias interferem no processo de reconstrução. Os resultados são comparados com os casos sem campo externo B .

Nos últimos anos tivemos a oportunidade de observar grandes avanços na fabricação de dispositivos semicondutores capazes de confinar elétrons em uma pequena região do espaço. Estes dispositivos são conhecidos como pontos quânticos (*quantum dots*) [118]. Com tais sistemas, pode-se controlar o número de partículas aprisionadas [40] — em alguns casos consegue-se aprisionar até mesmo uma única partícula. Outro aspecto interessante é a possibilidade de fabricarmos essas estruturas ajustando-se adequadamente seus parâmetros. Com isso, somos capazes de

definir previamente como será o espectro dos níveis de energia, e por esta razão, os pontos quânticos são frequentemente denominados de átomos artificiais [119].

Atualmente busca-se por resultados ainda mais efetivos nos processos de controle dessas partículas no interior de dispositivos de confinamento (*quantum dot*). Em outras palavras, precisamos entender como manipular campos externos adequadamente para gerar efeitos de interferência capazes de modificar substancialmente a dinâmica quântica de uma partícula sujeita ao potencial confinador. Com isso, produzir novos dispositivos não somente para a pesquisa básica mas também para o desenvolvimento de diferentes aplicações tecnológicas. Um passo importante nesse sentido consiste na obtenção do controle da dinâmica de pacotes de ondas. A nossa contribuição no presente estudo consiste em descrever um método de controle capaz de melhorar o processo de reconstrução desses pacotes de ondas em bilhares, mais especificamente, em um bilhar circular [120]. Basicamente, bilhares são sistemas em que uma partícula “livre” encontra-se contida em uma certa região finita do espaço de configuração. Por exemplo, uma partícula confinada em um círculo com $\psi(R_0) = 0$ nas paredes do círculo. Tais problemas são bastantes usados como modelos simplificados de poços quânticos, guia de ondas, etc.

O processo de reconstrução tem sido observado experimentalmente em uma variedade de sistemas físicos [121], tais como, em sistemas atômicos, moleculares, mesoscópicos, óticos, e até mesmo em condensados de Bose-Einstein (veja uma breve discussão sobre essas aplicações na seção 5 da Ref. [122]). O melhoramento de tais reconstruções podem ser importantes para, por exemplo, em física de laser, espectroscopia de raio-X [123, 124], entre outras. Podemos destacar também o interesse da reconstrução quântica em computação quântica [39, 43, 125, 126]. Investigações teóricas recentes [127] mostraram que pulsos de laser ultra curtos podem interferir na estrutura de reconstrução de pacotes de ondas rotacional de um sistema com poucos estados. Esses resultados puderam ser confirmados experimentalmente para a molécula de oxigênio [50], e poderia ser uma maneira de se implementar os qubits.

Em um estudo recente [128] foi mostrado que a estrutura de reconstrução

em um bilhar circular — normalmente usado para modelar poços quânticos [129,130] — tende a desaparecer quando o momento linear médio p_0 do pacote de ondas inicial (Gaussiano) aumenta. Porém, foi demonstrado também na Ref. [131] — por um método perturbativo — que essas reconstruções podem ser parcialmente recuperadas aplicando-se um campo magnético apropriado. Porém, tal método é válido apenas em um regime de campos fracos. Assim, a medida que o momento linear médio inicial do pacote de ondas aumenta, este método não consegue mais efetuar o controle desejado.

Neste capítulo, mostraremos como restabelecer a perda das reconstruções para um método não perturbativo através da aplicação de um campo magnético intenso. Portanto, complementando e generalizando os resultados conhecidos na literatura [131].

4.1 O SISTEMA

Vamos considerar uma única partícula, com massa efetiva μ , restrita ao plano xy e sujeita a um campo magnético constante \vec{B} perpendicular a esse plano. Vamos considerar também a partícula sujeita a um potencial de confinamento dado por:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & (r < R_0) \\ \infty & (r \geq R_0) \end{cases} . \quad (4.1)$$

Assim $V(r)$ representa o potencial do bilhar circular em 2D, sendo $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ e R_0 é o raio do bilhar. Para este problema o Hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = \frac{1}{2\mu} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r), \quad \text{sendo} \quad \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} . \quad (4.2)$$

Nesta expressão, $\vec{A} = \frac{1}{2} Br \hat{e}_\phi$ representa o potencial vetor, q é a carga efetiva da partícula e c é a velocidade da luz no vácuo. Escrevendo-se esta equação em coordenadas

cilíndricas¹ obtemos ($\omega_c = qB/\mu c$)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + \frac{1}{8} \mu \omega_c^2 r^2 - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \phi} + V(r). \quad (4.3)$$

Este é finalmente o operador Hamiltoniano que descreve as interações entre o campo magnético e a partícula dentro de um bilhar circular com paredes infinitas.

Demonstração

A forma de chegar à Eq. (4.3) a partir da Eq. (4.2) é direta, no entanto, alguns passos intermediários podem auxiliar o leitor nesta tarefa. A Eq. (4.2) pode ser escrita como

$$H = \frac{\vec{p} \cdot \vec{p}}{2\mu} - \frac{q}{2\mu c} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{q^2}{2\mu c^2} \vec{A} \cdot \vec{A}$$

sendo²

$$\vec{p} \cdot \vec{p} = -\hbar^2 \nabla^2, \quad \vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p} = \frac{i\hbar B}{2} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad \text{e} \quad \vec{A} \cdot \vec{A} = \frac{1}{4} B^2 r^2.$$

Daí, temos que

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{iq\hbar B}{2\mu c} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{q^2 B^2 r^2}{8\mu c^2} + V(\vec{r}).$$

E finalmente, usando a frequência de ciclotron ω_c e o operador ∇^2 em coordenadas cilíndricas na equação acima, obtemos a Eq. (4.3), que é a mesma apresentada na Eq. (3) da Ref. [129].

4.1.1 FUNÇÕES E ENERGIAS PRÓPRIAS DO SISTEMA

As energias próprias e as funções de onda próprias para este sistema são fornecidas mediante a solução da equação de Schrödinger independente do tempo

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (4.4)$$

¹Operado: $\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ para $z = 0$.

²Aqui usamos $\vec{p} = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$ e $\vec{A} = (0, \frac{1}{2} Br, 0)$.

sendo H o operador Hamiltoniano dado pela Eq. (4.3), E_n as energias próprias e $|\psi_n\rangle$ os estados próprios do sistema.

Aplicando-se a condição de contorno, podemos separar a solução do problema em duas regiões. Para a região externa ao bilhar, isto é, ($r \geq R_0$), as soluções para as função de onda são simplesmente $\psi_n(r, \phi) = 0$. Para a região interna, isto é, em que ($r < R_0$), a energia potencial sentida pela partícula é $V(r) = 0$, e com isso, a equação de Schrödinger torna-se simplesmente³

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + \frac{1}{8} \mu \omega_c^2 r^2 \psi - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial \psi}{\partial \phi} = E \psi . \quad (4.5)$$

Fazendo-se uso da simetria do problema, podemos aplicar o método de separação de variáveis — sendo a solução da parte angular a mesma do caso sem campo magnético⁴. Com isso, podemos escrever

$$\psi(r, \phi) = R(r)\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\phi} R(r) \quad \text{para} \quad l = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (4.6)$$

Substituindo a Eq. (4.6) em (4.5) obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l^2}{r^2} R \right] + \frac{1}{8} \mu \omega_c^2 r^2 R + \frac{l}{2} \hbar \omega_c R = ER . \quad (4.7)$$

Definindo $l_B \equiv \sqrt{\hbar c / qB}$ e $x \equiv r^2 / 2l_B^2$ a equação diferencial (4.7) torna-se⁵ para $R = R(x)$

$$x \frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{dR}{dx} + \left(-\frac{x}{4} + \frac{E}{\hbar \omega_c} - \frac{l}{2} - \frac{l^2}{4x} \right) R = 0 .$$

Esta é a equação diferencial para a parte radial da Eq. (4.5). Uma vez resolvida esta equação, teremos encontrado a solução geral para o problema através da Eq. (4.6).

A solução desta equação diferencial foi obtida em um artigo publicado em *Journal of Applied Physics* por F. Geerinckx, F. M. Peeters e J. T. Devreese [129], cuja solução é dada pela seguinte equação

$$R(x) = e^{-x/2} x^{|l|/2} X(x) , \quad (4.8)$$

³Usamos: $\psi = \psi(r, \phi) = \langle r, \phi | \psi \rangle$.

⁴Veja o Cap. 5, Sec. 3.1 de Eugen Butkov [132].

⁵Lembrando que: $\frac{dR}{dr} = \frac{dR}{dx} \frac{dx}{dr}$ e $\frac{d^2 R}{dr^2} = \frac{d^2 R}{dx^2} \left(\frac{dx}{dr} \right)^2 + \frac{dR}{dx} \frac{d^2 x}{dr^2}$.

em que $X(x)$ satisfaz a função hipergeométrica confluyente⁶ (Veja a Eq. (13.1.2) da Ref. [134]), sendo

$$X(x) = {}_1F_1(-\alpha; 1 + |l|; x) \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{E}{\hbar\omega_c} - \frac{(l + |l| + 1)}{2} .$$

As energias próprias do sistema são obtidas com auxílio da condição de contorno $\psi(r = R_0, \phi) = 0$, que na variável x corresponde à $x_0 = R_0^2/2l_B^2$. Da Eq. (4.6) vimos que, $\Phi(\phi) \neq 0 \forall \phi$, logo, para que a condição de contorno seja satisfeita é necessário que $R(r = R_0) = 0$, que nos conduz a

$$R(x_0) = \underbrace{e^{-x_0/2} x_0^{|l|/2}}_{\neq 0} \underbrace{X(x_0)}_{=0} = 0 .$$

Desta equação concluímos que

$$X(x_0) = {}_1F_1(-\alpha; 1 + |l|; x_0) = 0 . \quad (4.9)$$

Esta equação transcendental deve ser resolvida em termos do parâmetro α . Para cada l existe um conjunto de soluções $\{\alpha_n\}$ que satisfaz a Eq. (4.9); cada raiz encontrada é caracterizada pelo número quântico n . Portanto, todas as possíveis soluções do problema serão caracterizadas por esses dois números quânticos, a saber, n e l , cujos valores denotaremos por $\{\alpha_{nl}, n = 0, 1, 2, \dots$ e $|l| = 0, 1, 2, \dots\}$. Para obter as energias próprias fazemos

$$E_{nl} = \hbar\omega_c \left[\alpha_{nl} + \frac{1}{2}(l + |l| + 1) \right] . \quad (4.10)$$

No limite de campos magnéticos intensos, ou equivalentemente, $(R_0/l_B \rightarrow \infty)$ os zeros da função passam a ser números inteiros ($\alpha_{nl} \rightarrow n$) e o espectro de energia torna-se o mesmo que o de uma partícula em duas dimensões em um campo magnético na ausência do potencial $V(r, \phi)$. Porém, em um caso geral, α_{nl} deverá ser calculado numericamente. Para o campo magnético nulo, os α_{nl} podem ser relacionados com

⁶As propriedades das funções hipergeométricas podem ser vistas, por exemplo, na Ref. [133] (Gradshteyn et al.).

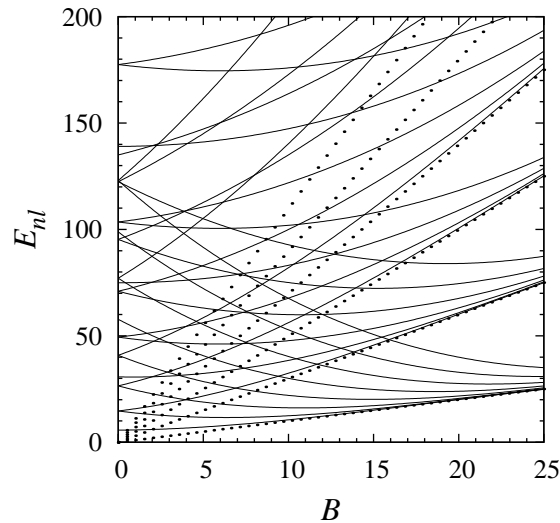


Fig. 4.1: Níveis de energia em função do campo magnético aplicado para o potencial do bilhar circular. A figura mostra alguns níveis de energia para $n \leq 3$. Para $B \approx 25$ o sistema tende a um oscilador harmônico bidimensional e os níveis de energia tendem aos níveis de Landau (linha pontilhada).

os zeros da função de Bessel $J_{|l|}(x)$, e os níveis de energia passam a ser duplamente degenerados, exceto para $l = 0$.

Ao longo deste capítulo adotaremos um sistema arbitrário de unidades tais que $2\mu = \hbar = c = q = R_0 = 1$. A Fig. 4.1 mostra os níveis de energia E_{nl} de uma partícula de massa μ em um bilhar circular de raio R_0 . Para campos magnéticos intensos, as energias degeneram-se para o caso de um oscilador harmônico em que $E_{n'} = \hbar\omega_c(n' + \frac{1}{2})$ (curvas pontilhadas na Fig. 4.1), e os níveis de energia degeneram-se para os denominados níveis de Landau. Para campos magnéticos mais baixos o espectro de energia é mais complicado. Da Eq. (4.10) vemos que as energias para valores negativos de l ($E_{nl} = \hbar\omega_c(\alpha_{nl} + \frac{1}{2})$) são sempre menores que para os valores positivos l ($E_{nl} = \hbar\omega_c(\alpha_{nl} + l + \frac{1}{2})$), tal que a diferença de energia é de $\hbar\omega_c|l|$.

Devemos salientar que para obtermos α_{nl} é necessário encontrar as raízes de uma função hipergeométrica confluyente, e a partir daí, obter as energias próprias. No entanto, o custo computacional deste procedimento é bastante alto. Por razões que ficarão mais claras na seção 4.4, é interessante encontrar uma maneira de se obter

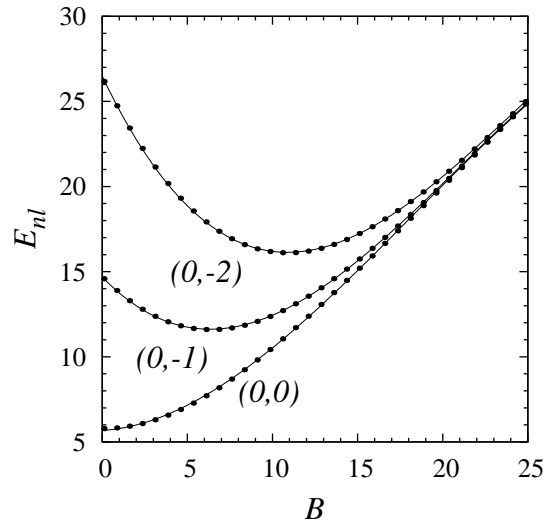


Fig. 4.2: Comparação entre os níveis de energia em função do campo magnético para o cálculo exato (pontilhado) e a curva ajustada (linha cheia). A notação (n, l) está relacionada com os números quânticos correspondentes.

α_{nl} com um custo computacional menor. Isto é possível através do ajuste de uma curva (*fitting*) para cada energia obtida via Eq. (4.10) (veja a Fig. 4.1). Desta forma, para cada n e l calculamos a energia E_{nl} em função do campo magnético B , onde em seguida, ajustamos uma curva definida pelo seguinte polinômio

$$E_{nl} = a_{nl}^{(0)} + a_{nl}^{(1)} B + a_{nl}^{(2)} B^2 + a_{nl}^{(3)} B^3 \quad , \quad (4.11)$$

sendo $a_{nl}^{(i)}$ os parâmetros de ajuste da curva. Na prática, calculamos as energias para $n = 0 \dots 29$ e $l = -10 \dots 10$, portanto, para cada parâmetro listado na Eq. (4.11) temos uma matriz de dimensão $(n + 1) \times (2|l| + 1) = 30 \times 21$. A Fig. 4.2 mostra a comparação entre as curvas ajustadas (curva cheia) gerada pela Eq. (4.11) e as exatas (pontilhada) gerada pela solução das Eqs. (4.9) e (4.10). A figura mostra uma excelente concordância entre os resultados. Os ajustes para os números quânticos mais elevados também foram verificados e mostraram boa concordância com as energias calculadas.

A função de onda normalizada correspondente à energia própria E_{nl} é dada

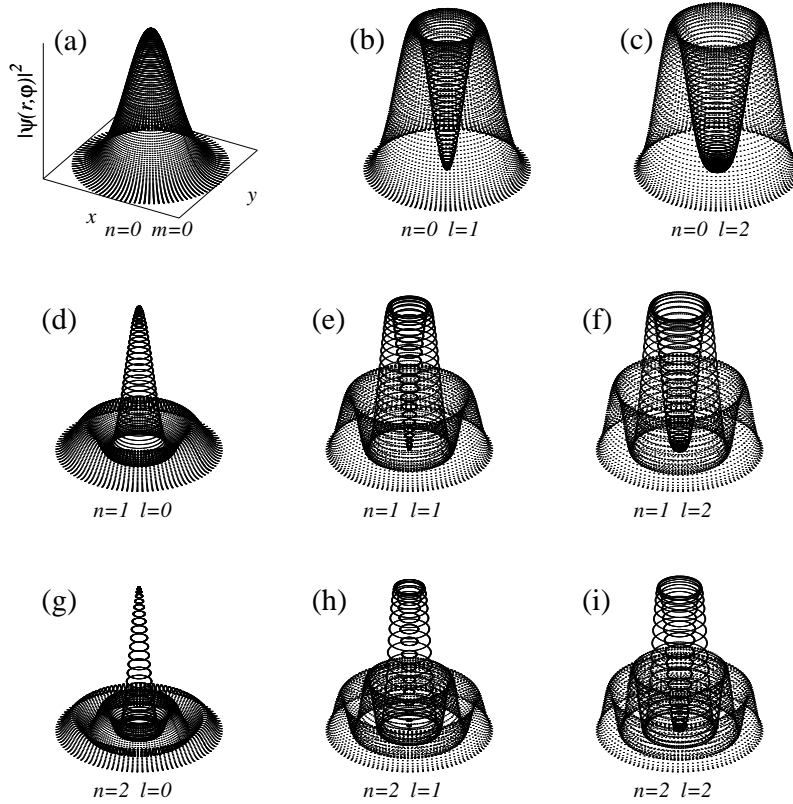


Fig. 4.3: As figuras (a)-(i) mostram o gráfico de $|\psi_{nl}(r, \phi)|^2$ para o bilhar circular para um campo magnético aplicado $B = 10, 0$. Os números quânticos estão indicados na própria figura.

por

$$\psi_{nl}(r, \phi) = \frac{C_{nl}^{-1/2}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\mu\omega_c}{\hbar} \right)^{1/2} e^{il\phi} \left(\frac{r^2}{2l_B^2} \right)^{|l|/2} e^{-r^2/4l_B^2} {}_1F_1(-\alpha_{nl}; 1 + |l|; \frac{r^2}{2l_B^2}), \quad (4.12)$$

em que a constante de normalização C_{nl} deve ser calculada numericamente de

$$C_{nl} = \int_0^{x_0} dx e^{-x} x^{|l|} [{}_1F_1(-\alpha_{nl}; 1 + |l|; x)]^2 .$$

Nas Figs. 4.3 (a)-(i) mostramos os gráficos de $|\psi_{nl}(r, \phi)|^2$, isto é, da densidade de probabilidade; estas figuras foram geradas diretamente da Eq. (4.12) para os primeiros valores de n e l . Os gráficos para l negativo não foram mostrados, pois apresentam exatamente a mesma estrutura do seu correspondente positivo. Isto acontece em decorrência de $\alpha_{nl} = \alpha_{n|l|}$ e da parte angular, que carrega a informação sobre o sinal de l , desaparecer quando calculamos a densidade de probabilidade. Como o potencial

ao qual a partícula esta sujeita é independente do tempo, a parte temporal da função de onda é introduzida simplesmente como⁷

$$\Psi_{nl}(r, \phi; t) = \psi_{nl}(r, \phi) e^{-iE_{nl}t/\hbar} . \quad (4.13)$$

4.2 O PACOTE DE ONDAS

Na seção anterior calculamos as energias e as funções de onda próprias de uma partícula em um bilhar circular com um campo magnético aplicado, ou seja, para cada n e l encontramos uma solução caracterizada pelas Eqs. (4.13), (4.12) e (4.10). No entanto, essas soluções não representam a solução mais geral possível da equação de Schrödinger. Se $\Psi_{nl}(r, \phi; t)$ é uma solução da equação diferencial — para um dado n e l —, então, devido a linearidade da equação de Schrödinger, a superposição de todas as possíveis soluções também será uma solução. Isto pode ser expresso matematicamente como

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_{n,l} b_{nl} |\psi_{nl}\rangle e^{-iE_{nl}t/\hbar} , \quad (4.14)$$

sendo b_{nl} coeficientes complexos e $|\Phi(t)\rangle$ o estado quântico mais geral possível para a partícula, que denominaremos de pacote de ondas.

Dependendo do número de estados utilizados na construção do pacote de ondas, podemos criar um estado quântico que inicialmente é bem localizado no espaço, mas para isso, precisamos determinar corretamente os coeficientes b_{nl} presentes na Eq. (4.14). Supondo que em $t = 0$ a partícula seja representada por um pacote de ondas Gaussiano, centrado em \vec{r}_0 , então a expressão para este estado pode ser dada pela seguinte equação⁸

$$\Phi(r, \phi; 0) = \Phi(0) = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} \exp \left[-i \frac{\vec{p}_0 \cdot (\vec{r} - \vec{r}_0)}{\hbar} - \frac{|\vec{r} - \vec{r}_0|^2}{2\alpha^2} \right] . \quad (4.15)$$

⁷Veja a Seção 5 do Capítulo 3 de Eugen Merzbacher [73].

⁸A Eq. (4.15) representa um pacote de ondas normalizado, isto é, $\int_0^{R_0} \int_0^{2\pi} r dr d\phi |\Phi(0)|^2 \approx 1$.

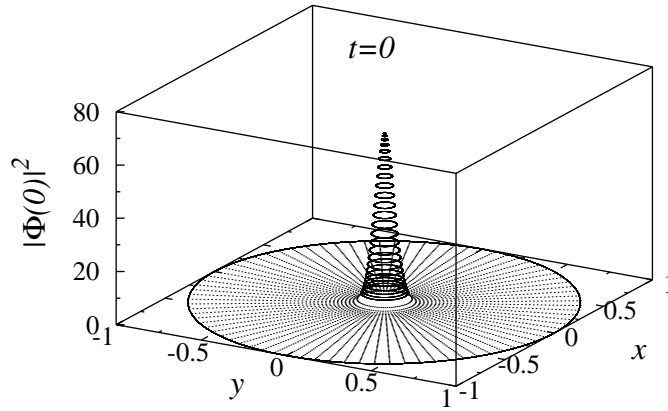


Fig. 4.4: A figura mostra o pacote de ondas Gaussiano inicial centrado em $\vec{r}_0 = 0$. A borda circular que aparece na figura representa a fronteira do bilhar circular de raio $R_0 = 1$. Nesta escala podemos observar claramente um pacote de ondas bem localizado no espaço, onde usamos $\alpha = \sqrt{2}/20$.

Na Fig. 4.4 traçamos o gráfico de $|\Phi(0)|^2$ em função de r e ϕ . Nele podemos observar um pacote de ondas Gaussiano bem localizado centrado em $\vec{r}_0 = 0$. No entanto, para que em $t = 0$ o pacote de ondas tenha a forma descrita pela Eq. (4.15), os coeficientes b_{nl} devem ser calculados da seguinte expressão

$$b_{nl} = \langle \psi_{nl} | \Phi(0) \rangle = \int_0^{R_0} \int_0^{2\pi} r dr d\phi \psi_{nl}^*(r, \phi) \Phi(0). \quad (4.16)$$

Substituindo-se as expressões (4.12) e (4.15) em (4.16) e resolvendo as integrais, encontramos uma expressão matemática para os coeficientes b_{nl} .

Porém, resolver a Eq. (4.16) não é uma tarefa tecnicamente simples. Para isso, vamos fazer duas considerações: a primeira consiste em fazer, sem perda de generalidade, $\vec{p}_0 = p_0 \hat{j}$, e a segunda, em admitir que o pacote de ondas esteja localizado inicialmente no centro do bilhar, isto é, em $\vec{r}_0 = 0$. A integral angular na Eq. (4.16) pode ser calculada exatamente como na Eq. (8.411) da Ref. [133]. Com isso chegamos a seguinte expressão

$$b_{nl} = \frac{2C_{nl}^{-1/2} i^l}{\sqrt{2}\alpha} e^{-i\pi l/2} \left(\frac{\mu\omega_c}{\hbar} \right)^{1/2} \times \int_0^{R_0} dr r e^{-r^2/2\alpha^2} \left(\frac{r^2}{2l_B^2} \right)^{|l|/2} e^{-r^2/4l_B^2} J_l(p_0 r/\hbar) {}_1F_1(-\alpha_{nl}; 1 + |l|; \frac{r^2}{2l_B^2}). \quad (4.17)$$

Para obter os coeficientes b_{nl} precisamos ainda resolver a parte radial da Eq. (4.17). Esse cálculo foi realizado numericamente uma vez que não dispomos de uma solução analítica para a integral. Para a construção do pacote de ondas Gaussiano mostrado na Fig. 4.4 utilizamos $30 \times 21 = 630$ níveis de energia.

Como o pacote de ondas está normalizado, devemos ter necessariamente

$$\sum_{n,l} |b_{nl}|^2 \approx 1 .$$

Demonstração

A seguir vamos indicar alguns passos na obtenção da expressão para b_{nl} , isto é, vamos demonstrar como chegar na Eq. (4.17) partindo da Eq. (4.16). Sabendo que $\vec{r}_0 = 0$ e $\vec{p}_0 = p_0 \hat{j}$, e também, escrevendo $\vec{r} = r \cos \phi \hat{i} + r \sin \phi \hat{j}$ temos

$$\vec{p}_0 \cdot \vec{r} = (0, p_0) \cdot (r \cos \phi, r \sin \phi) = p_0 \sin \phi r .$$

Substituindo as expressões (4.12) e (4.15) em (4.16) e usando a relação acima ficamos

$$b_{nl} = \frac{C_{nl}^{-1/2}}{\sqrt{2\pi\alpha}} \left(\frac{\mu\omega_c}{\hbar} \right)^{1/2} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-ip_0 \sin \phi r/\hbar} e^{il\phi} \times \int_0^{R_0} dr r e^{-r^2/2\alpha^2} \left(\frac{r^2}{2l_B^2} \right)^{|l|/2} e^{-r^2/4l_B^2} {}_1F_1(-\alpha_{nl}; 1 + |l|; \frac{r^2}{2l_B^2}) . \quad (4.18)$$

Para o cálculo da parte angular, podemos usar a relação

$$\int_0^{2\pi} d\phi e^{-ip_0 \sin \phi r/\hbar} e^{il\phi} = 2\pi i^l J_l(p_0 r/\hbar) e^{-i\pi l/2}$$

obtida da Eq. (8.411) da Ref. [133]. Finalmente substituindo esta relação em (4.18) obtemos a expressão (4.17), como queríamos demonstrar. A parte radial deve ser calculada numericamente, uma vez que não dispomos de uma solução analítica.

4.3 AS PROPRIEDADES DO PACOTE DE ONDAS

Sabemos que qualquer pacote de ondas pode ser expandido na base normalizada dos estados próprios do bilhar circular com campo magnético, e a evolução temporal deste pacote é obtido através da Eq. (4.14), representada aqui por

$$\Phi(r, \phi; t) = \sum_{n,l} b_{nl} \psi_{nl}(r, \phi) e^{-iE_{nl}t/\hbar}. \quad (4.19)$$

Portanto, uma vez conhecido o estado do sistema em um instante de tempo⁹ t_0 , por meio da Eq. (4.19) podemos determinar o estado do sistema em qualquer instante de tempo t futuro. É bem conhecido da literatura que para alguns potenciais específicos — e aqui podemos incluir o bilhar circular na ausência de campo magnético [128] — o estado do sistema “retorna” à sua forma inicial, isto é, $|\Phi(t_0)\rangle = |\Phi(t_r)\rangle$ em algum instante de tempo específico t_r [135–138]. Nesta condição dizemos que houve uma reconstrução total do pacote de ondas (*revival*), e o instante de tempo em que esta reconstrução ocorre é denominado de tempo de reconstrução.

Uma quantidade muito usada para se estudar essas reconstruções é a função de autocorrelação. Esta função é simplesmente a projeção do estado do sistema em um instante de tempo t sobre o estado inicial, isto é,

$$\begin{aligned} A(t) &= \langle \Phi(t) | \Phi(0) \rangle \\ &= \left(\sum_{n,l} b_{nl}^* e^{iE_{nl}t/\hbar} \langle \psi_{nl} | \right) \left(\sum_{n',l'} b_{n'l'} |\psi_{n'l'}\rangle \right) \\ &= \sum_{n,l} |b_{nl}|^2 e^{iE_{nl}t/\hbar}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Quando $|A(t)|^2 = 1$ temos uma reconstrução total do estado inicial em um instante de tempo t . Isto é, o pacote de ondas em $t = t_r$ retorna exatamente a mesma forma inicial em t_0 . Observe também que o termo $\exp(iE_{nl}t/\hbar)$ determina completamente a estrutura de reconstrução, uma vez que o mesmo é responsável pelas interferências entre os diferentes estados próprios do sistema.

⁹Na prática fizemos $t_0 = 0$.

Além dos fenômenos de reconstrução é interessante observar também que o pacote inicial Gaussiano $\Phi(0)$, considerado em nossas análises, apresenta a relação de incerteza mínima, isto é, $\Delta x \Delta p_x = \Delta y \Delta p_y = \hbar/2$.

Demonstração

Vamos demonstrar aqui a relação de incerteza mínima para o estado inicial ($t = 0$), para isso, vamos separar a Eq. (4.15) em suas componentes x e y .

$$\Phi(0) = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{\alpha\sqrt{\pi}}} e^{-ip_{0x}(x-x_0)/\hbar} e^{-(x-x_0)^2/2\alpha^2}}_{\Phi_x(0)} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{\alpha\sqrt{\pi}}} e^{-ip_{0y}(y-y_0)/\hbar} e^{-(y-y_0)^2/2\alpha^2}}_{\Phi_y(0)},$$

onde o valor esperado inicial com relação a variável x são dadas por:

$$\langle x \rangle = x_0 \quad , \quad \langle x^2 \rangle = x_0^2 + \frac{\alpha^2}{2} \quad , \quad \Delta x = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \quad ,$$

$$\langle p_x \rangle = p_{0x} \quad , \quad \langle p_x^2 \rangle = p_{0x}^2 + \frac{\hbar^2}{2\alpha^2} \quad , \quad \Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\alpha} \quad ,$$

de tal forma que $\Delta x \Delta p_x = \hbar/2$. Esses cálculos podem ser encontrados em livros de mecânica quântica, veja por exemplo a página 57 de J. J. Sakurai [139]. Uma dedução similar pode ser feita para a variável y .

A energia média do pacote de ondas pode ser calculada através da equação do valor esperado da energia, isto é

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \Phi(t) | H | \Phi(t) \rangle \\ &= \sum_{n,l} |b_{nl}|^2 E_{nl} . \end{aligned} \tag{4.21}$$

Observe que a energia média do pacote de ondas depende do campo magnético aplicado através de $E_{nl} = E_{nl}(B)$.

4.4 A PROPAGAÇÃO DO PACOTE DE ONDAS

Usando a expansão (4.19), descrita na seção anterior para a construção do pacote de ondas, vamos considerar diferentes condições iniciais para o momento médio inicial p_0 da partícula. Com o cálculo preciso das energias¹⁰ E_{nl} , apresentamos na Fig. 4.5(a) os gráficos de $|A(t)|^2$ em função de t/T_0 para $B = 0$ e para diferentes valores de p_0 , sendo

$$T_0 = \frac{2\mu R_0^2}{\hbar\pi} .$$

Observamos que T_0 é um tempo característico do sistema, útil para escalonar nossa análise (para uma discussão veja a Ref. [128]). Para $p_0 = 0$, os termos de momento angular $l = 0$ são os que contribuem para a construção do pacote de ondas, sendo os tempos de reconstrução dados por

$$\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{4\mu R_0^2} \right) \frac{T_{rev}^{(l=0)}}{\hbar} = 2\pi \quad \text{ou} \quad T_{rev}^{(l=0)} = 4 \left(\frac{2\mu R_0^2}{\hbar\pi} \right) \equiv 4T_0 .$$

Os tempos de reconstrução mostrados acima também foram calculados na Ref. [128] e os gráficos mostrados na Fig. 4.5(a) estão em acordo com os resultados descritos naquela referência. Uma análise direta dos gráficos apresentados na Fig. 4.5(a) mostram que quando p_0 aumenta, as reconstruções rapidamente desaparecem. No entanto, em $t = 20T_0$ percebemos que a autocorrelação diminui, porém, mais lentamente que para os tempos anteriores. Porém, vemos que, com a introdução do momento médio inicial a reconstrução do pacote de ondas tende a ser destruída.

Um aspecto relevante sobre as reconstruções do pacote de ondas, é que o tempo de reconstrução T_{rev} não é alterado com relação ao estado inicial do sistema. Portanto, o tempo T_{rev} não depende do momento médio inicial p_0 e da posição do centro do pacote Gaussiano x_0 . Logo, poderíamos utilizar esta propriedade para estabelecer um contador de tempo. No entanto, o processo de detecção da partícula no interior do bilhar é prejudicado quando p_0 aumenta. A detecção da partícula seria menos prejudicada com o melhoramento das reconstruções do pacote de ondas no

¹⁰Obtido através da solução numérica das Eqs. (4.10) e (4.17).

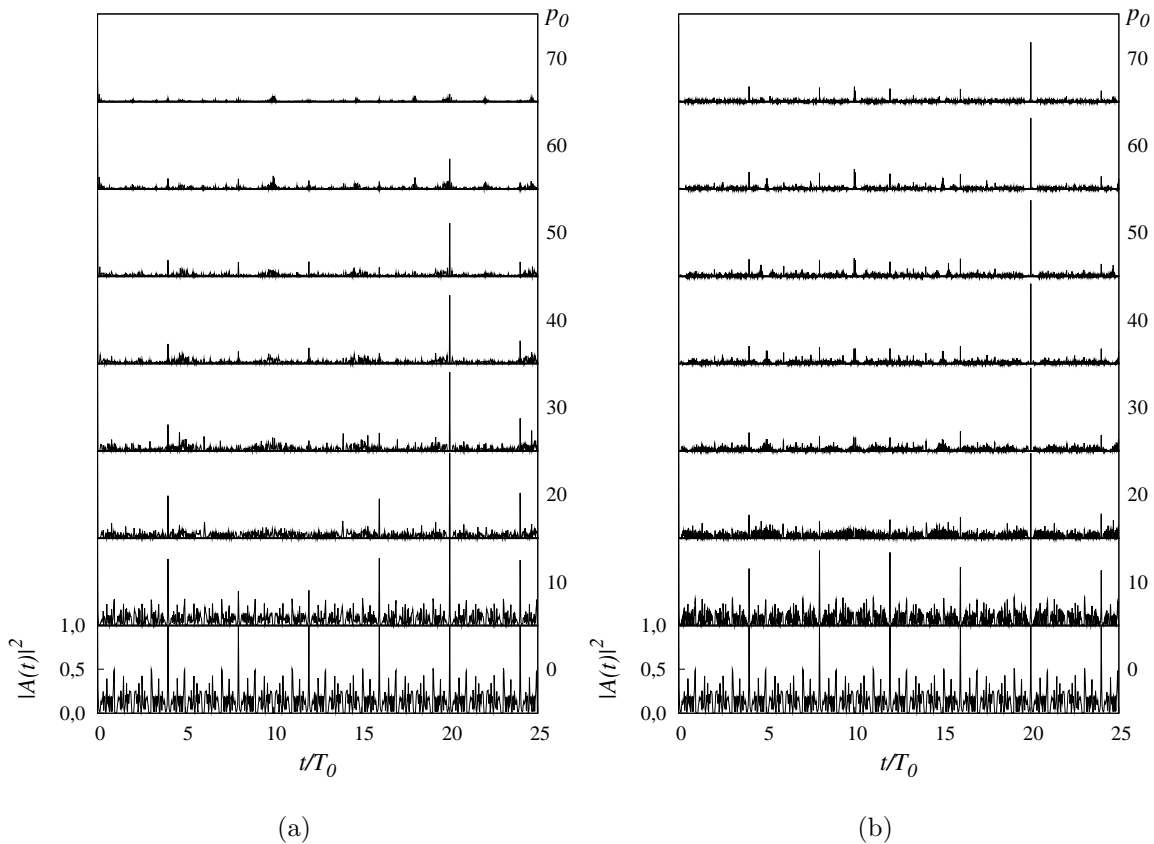


Fig. 4.5: Nas figuras (a) e (b) mostramos os gráficos de $|A(t)|^2$ em função de t/T_0 . (a) para $B = 0$ e (b) para os B 's que maximizam a reconstrução. Os momento médios iniciais p_0 estão indicados ao lado de cada gráfico e os valores de B ótimos são mostrados na Tab. 4.1.

interior do bilhar. Assim, a questão interessante aqui (e investigada na Ref. [131]) é a possibilidade de usar campos magnéticos para recuperar e/ou melhorar estes processos de reconstrução. Na Ref. [131], os autores demonstraram o melhoramento do processo de reconstrução através da aplicação de campos magnéticos fracos¹¹, isto é, para $|B\Gamma|/4 \ll 1$ com $\Gamma = qR_0^2/(\hbar c)$. Neste capítulo vamos mostrar como melhorar — ao menos parcialmente — as reconstruções por meio da aplicação de campos magnéticos intensos.

Como primeiro resultado podemos comparar a função de autocorrelação cal-

¹¹Para os parâmetros adotados neste capítulo ($2\mu = \hbar = c = q = R_0 = 1$), o regime de campos fracos corresponde a $|B| \ll 4$.

culada com $B = 0$ para diferentes momentos médios iniciais (veja a Fig. 4.5(a)) com a função de autocorrelação calculada com a aplicação de um campo magnético ótimo (Fig. 4.5(b)). Os valores ótimos de B utilizados para o cálculo de $|A(t)|^2$ são mostrados na Tab. 4.1. Os resultados apresentados na Fig. 4.5(a) mostram que quando o momento médio inicial aumenta a reconstrução do pacote de ondas no centro do bilhar tende a desaparecer. Este fato é observado com a diminuição do pico em $t = 20T_0$. No entanto, na Fig. 4.5(b) mostramos a recuperação parcial das reconstruções por meio da aplicação de um campo magnético constante. Esse resultado é observado com o aumento do pico em $t = 20T_0$ para diferentes valores de p_0 . Devemos enfatizar que, para que o processo de reconstrução seja melhorado, é necessário a aplicação de um campo magnético com uma intensidade apropriada, tal que a busca por esses campos ótimos é atribuída às técnicas de controle. No decorrer da seção mostraremos como encontrar esses campos ótimos.

Observe também que os melhores resultados para o melhoramento das reconstruções ocorreram para os momentos médios mais altos. De fato, para os momentos médios mais baixos não precisamos aplicar campos intensos para recuperar as reconstruções, e nessa condição o método perturbativo desenvolvido na Ref. [131] mostra-se apropriado.

Para realizar o processo de busca por um campo de controle ótimo, é conveniente, especialmente sob o aspecto computacional, dispor de soluções analíticas para as energias próprias do problema. Para um regime de campos magnéticos intensos, conseguimos uma solução analítica para as energias e para as funções próprias — veja as Eqs. (4.10) e (4.12). No entanto, essas soluções são dadas pelas raízes de uma função hipergeométrica confluyente. Para reduzir custos computacionais no processo de controle, ajustamos curvas para as energias próprias — veja a Eq. (4.11) e a Fig. 4.2. Inerente ao próprio processo de ajuste, temos a introdução de pequenos erros, que dependem do campo magnético B e dos números quânticos n e l cujos valores estão em torno de 1%. Um aspecto importante é que esses erros dependem dos números quânticos, e portanto não podem ser considerados um fator de fase global

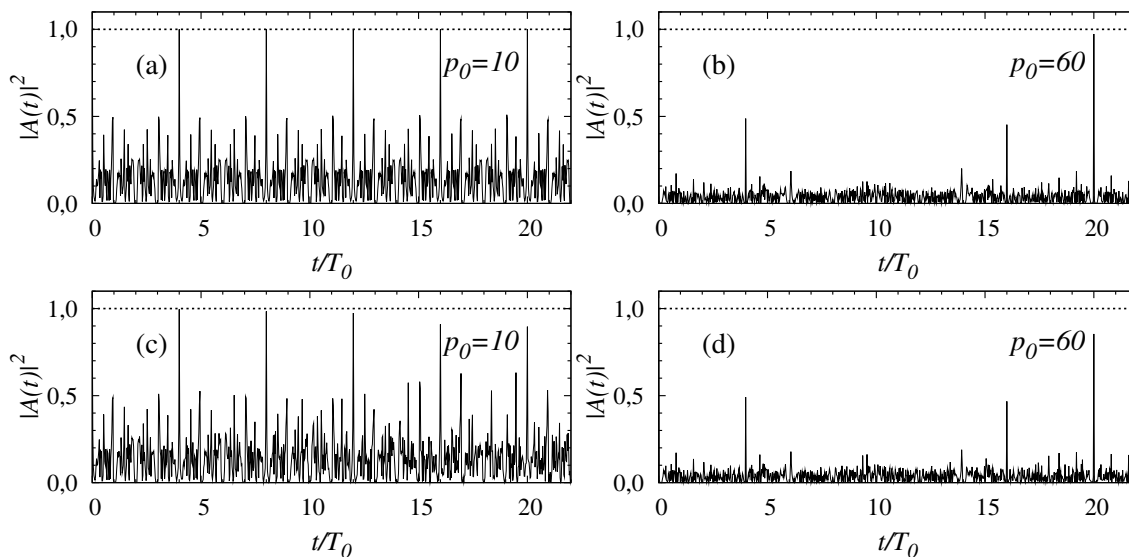


Fig. 4.6: Comparação entre as funções de autocorrelação sem (a) e (b) e com (c) e (d) erros em torno de 10% nos valores das energias próprias.

na função de autocorrelação definida pela Eq. (4.20). Desta forma usamos as curvas ajustadas para as energias E_{nl} para achar o campo B ótimo, mas no cálculo de $A(t)$ usamos as energias próprias corretas, isto é, calculadas com boa precisão numérica¹².

A discussão acima levanta uma questão interessante. Suponha que tivéssemos um método não muito preciso para calcular os níveis de energia. Por exemplo, suponha que no cálculo de E_{nl} , errássemos em média em 10% nos valores corretos. O quanto esses erros dificultariam nossa previsão de reconstrução dos pacotes? Para ilustrarmos este problema, na Fig. 4.6 mostramos $|A(t)|^2$ para o caso do cálculo correto dos E_{nl} 's e para o caso em que introduzimos erros aleatórios nos valores dos E_{nl} 's. Observamos que a introdução destas “incoerências” (erros nos valores das energias próprias), diminuem a reconstrução do pacote de ondas.

O campo ótimo de controle B foi obtido usando-se as curvas ajustadas para as energias próprias (Eq. (4.11)). Como os ajustes para as energias apresentaram resultados satisfatórios, o efeito dos erros sobre o processo de reconstrução não

¹²A precisão numérica considerada foi de 10^{-6} para o cálculo de α_{nl} .

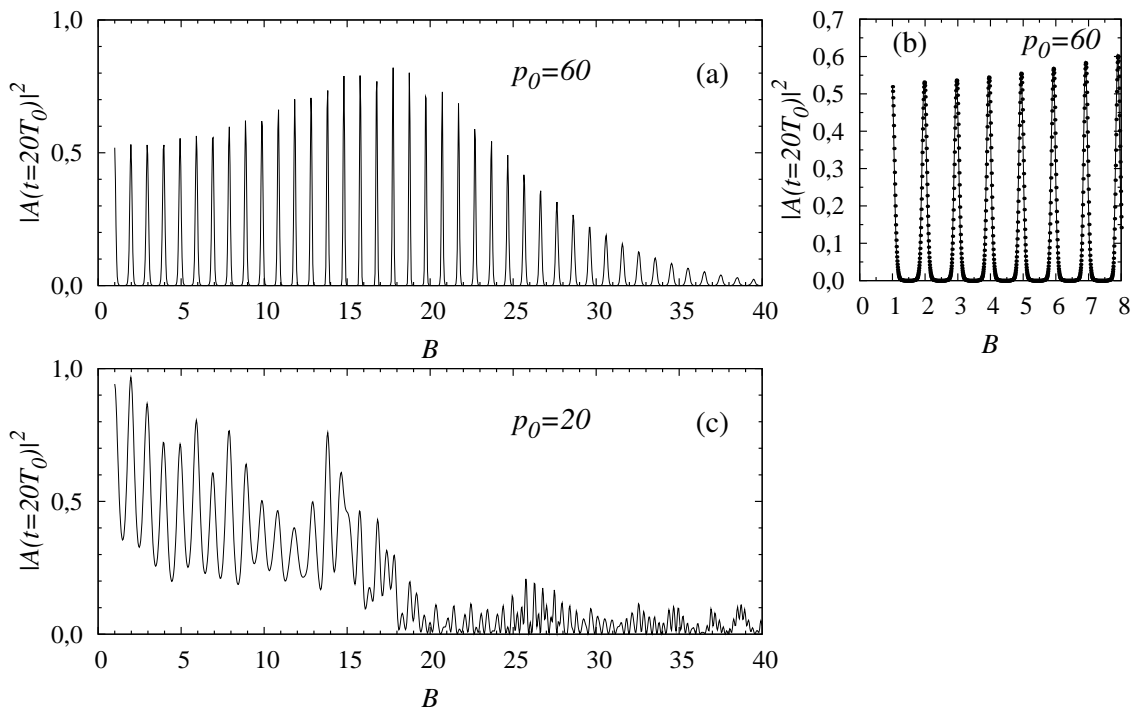


Fig. 4.7: Em (a) para $p_0 = 60$ observamos a influência do campo magnético na função de autocorrelação calculado em $t = 20T_0$. (b) Uma ampliação da figura para valores de B entre 1,0 e 8,0. Em (c) utilizamos $p_0 = 20$.

foi muito significativo. Após encontrar o campo B que maximiza a reconstrução, aplicamos este campo no cálculo da função de autocorrelação (4.20). Para este cálculo consideramos as energias exatas fornecidas pela solução numérica da Eq. (4.10), e como resultado, obtemos um campo de controle que fornece $|A(t = 20T_0)|^2$ muito próximo do valor ótimo. Para momentos médios iniciais baixos ($p_0 = 0, 10, 20$ e 30), foi conveniente fazermos ainda alguns ajustes precisos no campo de controle, enquanto para momentos médios mais elevados, as incoerências nas energias mostraram-se pouco relevantes e nenhum ajuste adicional foi realizado.

Na Fig. 4.7 mostramos a influência do campo magnético na reconstrução. Nas Figs. 4.7(a) e (b) traçamos a função de autocorrelação em $t = 20T_0$ em função do campo magnético B para um momento médio inicial alto ($p_0 = 60$). Na Fig. 4.7(c) fizemos um gráfico semelhante, mas para $p_0 = 20$. Nessas figuras calculamos a

autocorrelação com uma precisão de passo em B suficientemente boa¹³, isto é, com passo $\delta B = 10^{-3}$, e a Fig. 4.7(b) apresenta uma ampliação da Fig. 4.7(a) mostrando em detalhes os pontos da curva.

Uma análise do gráfico mostra que para $p_0 = 60$ a autocorrelação, e conseqüentemente a reconstrução do pacote de ondas, atinge um máximo em torno de $B \approx 18$ — um regime de campos intensos —, tal que $|A(t = 20T_0)|^2 \approx 0,82$. No entanto, para momentos médios baixos — veja a Fig. 4.7(c) —, observamos que a reconstrução atinge um estado ótimo para um campo baixo ($B \approx 2$), e além disso, podemos observar nessas circunstâncias que a aplicação de campos intensos acaba prejudicando o processo de reconstrução — veja a Fig. 4.7(c) para $B > 20$. Podemos fazer uma síntese do melhoramento do processo de reconstrução através do gráfico de $|A(t = 20T_0)|^2$ em função de p_0 . Isto é ilustrado na Fig. 4.8, com os valores numéricos listados na Tab. 4.1. Nesta figura, a curva com quadrados mostra o que ocorre com as reconstruções quando não interferimos na dinâmica do pacote de ondas, isto é, para $B = 0$. Já a curva com pontos mostra o processo de reconstrução quando interferimos na dinâmica através da aplicação do campo magnético ótimo. O resultado apresentado neste gráfico é bastante conclusivo em relação a eficiência no processo de reconstrução através de campos magnéticos externos, especialmente para momentos médios altos, região na qual foi possível observar a maior eficiência do controle.

Portanto, o procedimento numérico para encontrar o campo ótimo é o seguinte:

1. Com as curvas ajustadas para as energias calculamos o valor aproximado de B que otimiza as reconstruções em $t = 20T_0$. Com isso, obtemos um gráfico de $|A(t = 20T_0)|^2 \times B$.
2. Uma análise direta do gráfico de $|A(t = 20T_0)|^2 \times B$ fornece um valor aproximado do campo magnético que otimizam as reconstruções. Em outras palavras,

¹³O processo de reconstrução não é substancialmente melhorado aumentando-se a precisão.

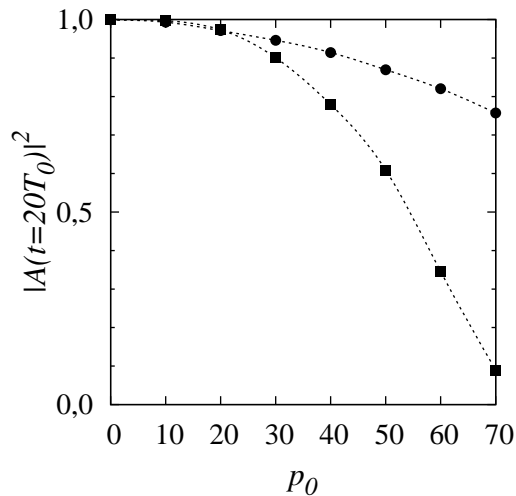


Fig. 4.8: $|A(t = 20T_0)|^2$ em função de p_0 . Na figura são mostrados dois casos: (quadrados) representam o caso em que $B = 0$; e (círculos) o caso em que $B \neq 0$. Os valores dos campos magnéticos B que otimizam a reconstrução são mostrados na Tab. 4.1.

o gráfico mostra o valor de B_{approx} que fornece o maior valor para $|A(t = 20T_0)|^2$.

3. O valor de B_{approx} encontrado pelo passo anterior é utilizado como referência para uma busca mais precisa do campo. Em seguida calculamos o valor de B que otimiza as reconstruções para valores exatos das energias. A busca do campo é feita varrendo-se o campo em torno de $B = B_{approx}$ calculado anteriormente e analisando o valor de B que fornece o maior valor para a função de autocorrelação. Esses resultados para o campo ótimo em função do momento médio inicial do pacote de ondas é mostrado na Tab. 4.1.
4. Finalmente, com o valor do campo ótimo, calculamos a função de autocorrelação através da Eq. (4.20), para verificar a otimização. Esses gráficos são mostrados na Fig. 4.5(b).

Além da função de autocorrelação, é recomendável e muito instrutivo observar a distribuição espacial do pacote de ondas no interior do bilhar através da

p_0	B	$ A(t = 20T_0) ^2$	B	$ A(t = 20T_0) ^2$	Δ
0	0,0	0,999147	0,000	0,999147	0,0
10	0,0	0,996901	0,998	0,997076	0,000175
20	0,0	0,973142	1,975	0,974117	0,000975
30	0,0	0,900721	7,9303	0,946018	0,045297
40	0,0	0,779432	11,842	0,914278	0,134846
50	0,0	0,609005	14,806	0,869604	0,260599
60	0,0	0,345510	17,770	0,820201	0,474691
70	0,0	0,089367	20,734	0,757244	0,667877

Tab. 4.1: A tabela mostra os valores do campo magnético e das autocorrelações para cada momento p_0 . A última coluna mostra a diferença das autocorrelações entre o caso sem campo magnético e com campo aplicado.

função densidade de probabilidade¹⁴ [73]. Esta função é matematicamente definida por $\rho = |\Phi(r, \phi; t)|^2$ e pode ser facilmente calculada através da Eq. (4.19). Entre outras coisas, esta grandeza fornece informações relevantes sobre a “concentração” da partícula no interior do bilhar, a qual já tivemos a oportunidade de discutir na Sec. 4.2 e representar especificamente na Fig. 4.4. Do ponto de vista prático, significa que podemos observar diretamente do gráfico as regiões mais prováveis de se encontrar a partícula. Quando uma partícula encontra-se em um estado próprio do bilhar, isto é, $|\Phi(t)\rangle = |\psi_{nl}\rangle e^{-iE_{nl}t/\hbar}$, a grandeza ρ passa a não apresentar dependência temporal e o estado é dito estacionário; para este caso específico, a grandeza ρ pode ser vista na Fig. 4.3. Apenas para exemplificar o seu significado, podemos a partir de uma leitura direta do gráfico ver que, a partícula terá maior probabilidade de ser encontrada no centro do bilhar se possuir número quântico angular nulo¹⁵.

¹⁴Esta função é definida como $\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2$, tal que, $\int \rho d^3r = 1$.

¹⁵Observe que isso não necessariamente se aplica a um pacote de ondas; pois a partícula pode estar localizada no centro do bilhar com momento médio $p_0 \neq 0$ de modo que as contribuições angulares sejam não nulas.

No entanto, em uma situação mais geral, onde o estado da partícula é descrito por um pacote de ondas, a partícula passa a apresentar dinâmica temporal. Na Fig. 4.9 mostramos o pacote de ondas livre no instante da reconstrução para dois valores diferentes de p_0 , a saber, $p_0 = 0$ na Fig. 4.9 (a) e $p_0 = 70$ em (b). Para um momento médio inicial alto o pacote de ondas se reconstrói parcialmente fora do centro do bilhar, além de apresentar grandes deformações em relação à forma inicial. Quando aplicamos o campo magnético ótimo conseguimos recuperar parcialmente a reconstrução no centro do bilhar, além de obter uma forma menos distorcida para o pacote de ondas. Na Fig. 4.10 apresentamos mais resultados para as reconstruções em $t = 20T_0$. As figuras indicadas com letras minúsculas representam o pacote de ondas livre dentro do bilhar, já as figuras com letras maiúsculas mostram os contornos quando um campo ótimo interage com a partícula — veja a Tab. 4.1. Os momentos médios iniciais são indicados na própria figura. Os resultados obtidos com esta figura mostram que para momentos médios iniciais baixos — $p_0 = 0, 10, 20$ e 30 — o pacote de ondas não é substancialmente afetado e não apresenta grandes distorções da forma Gaussiana e portanto, a aplicação do campo ótimo não altera significativamente as reconstruções; estas conclusões já foram discutidas e comprovadas na Fig. 4.8. No entanto, para momentos médios iniciais grandes, isto é, para p_0 superior a 30, o pacote de ondas fica menos distorcido quando aplicamos o campo magnético ótimo e o resultado é um melhoramento das reconstruções no centro do bilhar.

4.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Em conclusão, estudamos os níveis de energia e os estados quânticos de uma partícula em um bilhar circular com paredes rígidas na presença de um campo magnético externo. Vimos que para campos magnéticos intensos o sistema tende ao caso do oscilador harmônico bidimensional (apresentando os níveis de Landau). A partir disto analisamos como se dá a evolução de um pacote Gaussiano no sistema,

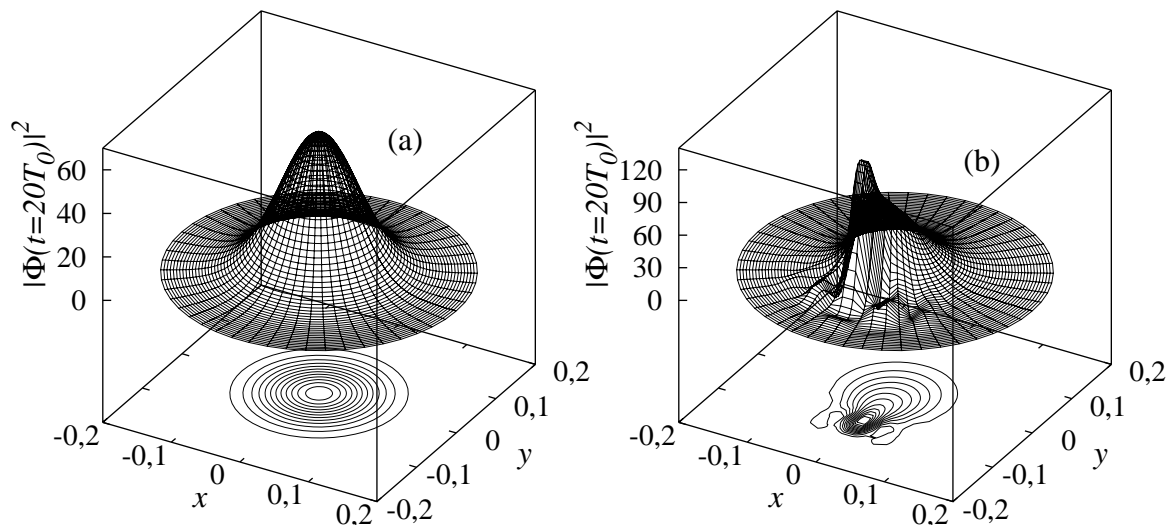


Fig. 4.9: Gráfico de $|\Phi(\vec{r}, t = 20T_0)|^2$ para (a) $p_0 = 0$ e (b) $p_0 = 70$. Em ambas figuras o pacote de ondas representa uma partícula livre dentro do bilhar ($B = 0$). Na parte inferior mostramos também os gráficos de contorno do pacote de ondas.

discutindo sua dinâmica de reconstrução.

Discutimos também uma técnica de controle que utiliza campos magnéticos intensos para promover o melhoramento dos processos de reconstruções do pacote de ondas. O foco de nossas investigações foi a escala de tempo de *revival* T_{rev} . Dos resultados obtidos nos gráficos de $|A(t)|^2$ podemos observar que, para valores baixos de p_0 as escalas de tempo curtas são pouco alteradas pela presença do campo. Em outras palavras, a trajetória clássica da partícula é pouco alterada pela presença do campo externo. Uma outra situação particularmente importante é que as reconstruções ocorrem usualmente em sistemas integráveis [140]. Portanto, a presente abordagem não pode ser aplicada para qualquer tipo de bilhar. De fato, esta abordagem provavelmente não funcionaria, por exemplo, em um bilhar retangular porque a presença do campo tornaria o sistema não integrável [141, 142].

Observamos também que o processo de reconstrução é mais sensível aos erros nos cálculos das energias próprias para momentos médios iniciais baixos. Vimos que o termo de energia é o maior responsável pelos efeitos de interferência e conseqüentemente pela estrutura de reconstrução. Quando usamos os ajustes de curvas para as

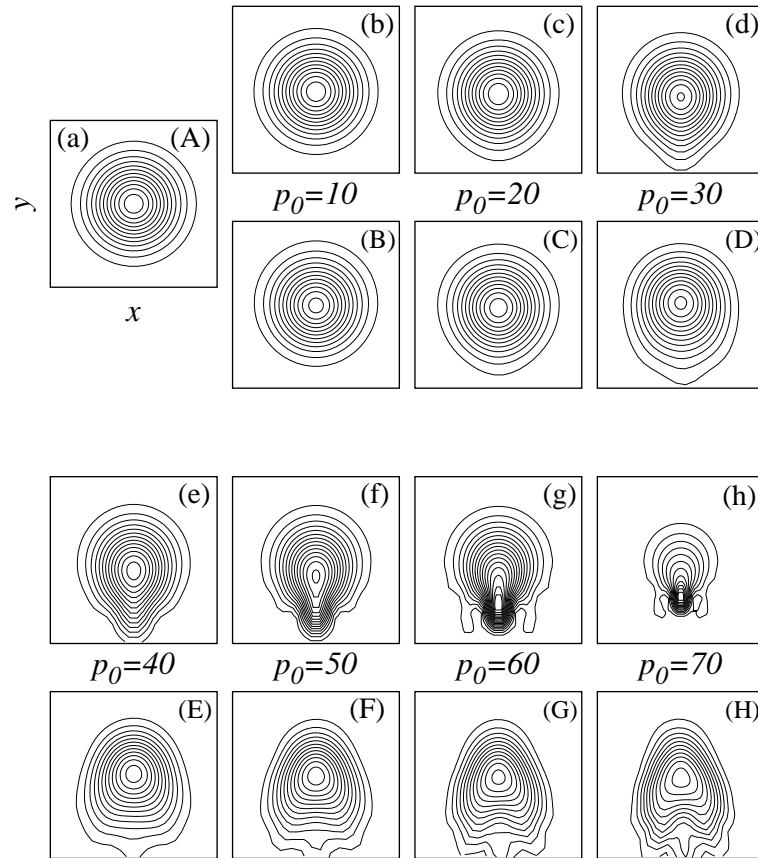


Fig. 4.10: Esta figura mostra os gráficos de contorno de $|\Phi(\vec{r}, t = 20T_0)|^2$. Em (a) até (h) mostramos os contornos quando $B = 0$, e em (A) até (H) mostramos os contornos quando B assume seu valor ótimo. Os valores de B estão listados na Tab. 4.1.

energias (Eq. (4.11)) para obter os B^* , nos casos de momentos baixos, pequenos ajustes foram feitos para finalmente se chegar no B ótimo de controle. Vimos também que o melhoramento do processo de reconstrução está relacionada com o momento médio inicial do pacote de ondas. Para valores grandes de p_0 conseguimos obter um campo B ótimo que melhorou significativamente o processo de reconstrução; já para momentos baixos a aplicação de campos intensos não se mostrou muito eficiente, ao contrário, em alguns casos a aplicação de campo intenso se mostrou até mesmo prejudicial para o processo de reconstrução.

CONTROLE DE TRANSMISSÃO DE PACOTES DE ONDAS ATRAVÉS DE POTENCIAIS DE CONTATO DEPENDENTES DO TEMPO

Neste capítulo consideramos uma aplicação direta da técnica de extensão auto-adjunta de operadores para resolver o problema de interação de contato pontual dependente do tempo. Trataremos dos casos de uma parede infinita com diferentes condições de contorno e interações pontuais movendo-se com velocidade constante. Desses cálculos obteremos uma expressão geral que descreve o espalhamento de um pacote de ondas por tais potenciais. Ao longo deste capítulo apontaremos algumas aplicações físicas simples ligadas ao uso dos potenciais para “manipular” pacotes de ondas.

Muitos fenômenos quânticos interessantes são modelados por potenciais extremamente localizados no espaço [143]. Como exemplos representativos citamos:

1. Paredes rígidas, comumente empregadas na descrição de confinamento ou re-

flexão perfeita em pontos extremos — veja por exemplo a Ref. [144];

2. Interações pontuais (com a função delta de Dirac sendo a mais usual), que são idealizações de potenciais de curto alcance e bastante úteis no estudo de diferentes problemas, como por exemplo, em grafos quânticos [145–147].

Apesar de potenciais pontuais¹, como por exemplo, a função delta de Dirac, serem idealizações, alguns trabalhos já propõem sua implementação em laboratório, através de potenciais de curto alcance [143]. O interesse está justamente na riqueza de como essas interações de contato espalham o pacote de ondas [148]. Além disso, se estes potenciais se movessem (com velocidade constante) poderíamos controlar diferentes aspectos, tais como, o momento médio do pacote transmitido.

Assim, seguindo nossa linha, desenvolvemos um método paramétrico para o controle de sistemas quânticos. Aqui vamos estudar interações pontuais que se movem, como uma proposta de se fazer uma “engenharia” de pacotes de ondas. A idéia principal não é desenvolvermos um método realista para ser implementado diretamente. Mas sim, criar um modelo útil no teste de novos métodos de controle de evolução de estados quânticos [12, 45]. Notamos ainda que existem poucos trabalhos nesta linha. Para interações pontuais podemos mencionar alguns cálculos para o caso relativístico [149] e alguns resultados para difusão em 3D [150]. Nossas análises serão restritas ao caso unidimensional.

Por último, mencionamos que os cálculos desenvolvidos aqui apresentam um interesse formal matemático. De fato, devido às singularidades das interações de contato, em geral, não podemos tratar o potencial $V(x, t)$ como um potencial concreto, diretamente escrito na equação de Schrödinger. Ao invés disso, são incorporados na formulação matemática do problema através da técnica de extensão auto-adjunta² [152], por meio de imposições nas condições de contorno da função de

¹Também denominado potenciais de contato.

²Suponha A um operador definido no espaço de Hilbert \mathcal{H} . A é simétrico ou hermiteano se $\langle \varphi | A^* | \psi \rangle = \langle \psi | A | \varphi \rangle$. Note que isto não implica necessariamente que $A = A^\dagger$. Porém se $A = A^\dagger$

onda (veja a Sec. 5.1).

5.1 POTENCIAIS EM MOVIMENTO

5.1.1 BARREIRA DE POTENCIAL INFINITA

Vamos iniciar nossa discussão com um exemplo bastante instrutivo e pedagógico: uma partícula livre (quântica) interagindo com uma barreira de potencial infinita. Se a barreira está localizada em $x = 0$ e a partícula está localizada no lado direito da barreira, então a função de onda para o sistema independente do tempo é obtida de

$$H_0(x)\varphi(x) = \frac{1}{2}k^2\varphi(x) \quad \text{para } (x > 0) \quad \text{com} \quad H_0(x) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad .$$

Neste capítulo admitiremos um sistema arbitrário de unidades nas quais utilizaremos $\hbar = \mu = 1$. Este Hamiltoniano, definido sobre funções infinitamente diferenciáveis, as quais são nulas fora do intervalo $(0, \infty)$, não é *a priori*, auto-adjunto em $L^2[0, \infty)$. Em geral, em livros textos assume-se que a função de onda se anula no potencial, ou seja, $\psi(x = 0) = 0$. Logo, a solução é: $\psi(x) = \mathcal{N}^{-1/2} \text{sen}(kx)$. Porém, esta não é a solução mais geral possível. Na verdade, o problema admite classes de soluções obtidas impondo-se à φ a condição de contorno [153]

$$\left. \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \right|_{x=0} = \lambda \varphi(x)|_{x=0} \quad \text{com} \quad (-\infty < \lambda \leq +\infty) \quad .$$

Na linguagem de física matemática, o novo parâmetro λ introduzido no sistema, caracteriza o procedimento conhecido como extensão auto-adjunta do operador H_0 . Em outras palavras, significa definir condições de contorno para o problema que garantam as condições normalmente exigidas em mecânica quântica, ou seja, conservação do fluxo de probabilidades. A solução para a equação diferencial é

$$\varphi_k(x) = \mathcal{N}^{-1/2} \{ e^{-ikx} + f(k)e^{+ikx} \} \quad ,$$

então dizemos que A é auto-adjunto [151].

tal que a condição de contorno conduz a

$$f(k) = \frac{\lambda + ik}{-\lambda + ik} \quad . \quad (5.1)$$

Observe que $|f(k)|^2 = 1$, como deve ser pela condição de conservação de probabilidades. A constante de normalização vem de

$$\int_0^\infty dx \varphi_{k''}^*(x) \varphi_{k'}(x) = \delta(k'' - k') \quad \text{ou} \quad \mathcal{N} = (1 + |f(k)|^2)\pi = 2\pi \quad .$$

A barreira de potencial rígida usual, para a qual a função de onda é nula sobre a barreira, corresponde na formulação acima a fazer $\lambda = +\infty$.

Uma barreira com a condição de contorno de Dirichlet movendo-se com velocidade constante u foi resolvida na Ref. [154]. Então, a pergunta natural é como construir apropriadamente uma extensão auto-adjunta, para um valor arbitrário de λ , para o caso em movimento. A primeira tentativa é apenas estender o procedimento prévio para a função de onda dependente do tempo e escrever

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H_0 \psi(x, t) \quad \text{para} \quad (x > ut) \quad ,$$

impondo que

$$\left. \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right|_{x=ut} = \lambda \psi(x, t)|_{x=ut} \quad .$$

O que resulta em

$$\psi_k(x, t) = e^{i\gamma(x, t)} e^{-i(k^2/2)t} \varphi_k(x - ut) \quad , \quad (5.2)$$

$$\gamma(x, t) = ux - u^2 t/2 \quad ,$$

$$\varphi_k(x - ut) = \mathcal{N}_u^{-1/2} \{ e^{-ik(x-ut)} + f_u(k) e^{+ik(x-ut)} \} \quad , \quad (5.3)$$

para

$$f_u(k) = \frac{\lambda + i(k - u)}{-\lambda + i(k + u)} \quad \text{e} \quad \mathcal{N}_u = (1 + |f_u(k)|^2) \quad . \quad (5.4)$$

O termo $\gamma(x, t)$ e o argumento $x - ut$ de φ , estão diretamente associados com as transformações de Galileu usadas para resolver problemas de potencial da forma $V(x - ut)$, veja por exemplo, a Ref. [155]. Da expressão (5.4) para a amplitude

de espalhamento podemos observar que $|f_u(k)|^2$ é igual a 1 somente para $u = 0$ ou $\lambda = +\infty$. Isso não é aceitável se quisermos conservar o fluxo para qualquer u e λ .

A forma de se corrigir isto é através da equação da continuidade em mecânica quântica, isto é,

$$\frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad ,$$

com $\rho = \psi^*(x, t)\psi(x, t)$ e $J = 1/(2i)[\psi^*(x, t)\partial\psi(x, t)/\partial x - \psi(x, t)\partial\psi^*(x, t)/\partial x]$. Admitindo $\varphi_k(x - ut)$ uma função arbitrária, a substituição da Eq. (5.2) na equação da continuidade resulta em

$$\partial J_\varphi / \partial x = 0 \quad ,$$

para $J_\varphi = 1/(2i)[\varphi^*\partial\varphi/\partial x - \varphi\partial\varphi^*/\partial x]$ para qualquer x . Em outras palavras, a conservação da densidade de corrente é completamente determinada por φ . Quando aplicamos a técnica de extensão auto-adjunta para o operador Hamiltoniano [152], estamos de fato assegurando a conservação da densidade de corrente [156] (para explicações mais detalhadas sobre esse ponto veja por exemplo a Ref. [157, 158]). Deste modo, uma possível maneira — mas não a única, como exemplificaremos mais tarde — para considerar uma condição de contorno mais geral, consistente com a conservação de probabilidade para uma barreira em movimento, é seguir o mesmo procedimento da Ref. [153], em que precisamos tomar a condição de contorno para φ ao invés da função de onda total ψ , isto é, impomos que $\partial\varphi(x - ut)/\partial x|_{x=ut} = \lambda\varphi(x - ut)|_{x=ut}$. Fazendo isso, veremos que a Eq. (5.2) ainda será a solução correta para ψ , onde φ é dado pela Eq. (5.3), mas agora com $f_u(k)$ substituído por $f(k)$. Desta forma temos a solução correta do problema, com uma amplitude de espalhamento $f(k)$ que tem as propriedades corretas para o problema.

5.1.2 INTERAÇÃO PONTUAL GERAL

Uma das interações de contato mais conhecidas em mecânica quântica é a função δ . Se esta barreira está localizada na origem, o Hamiltoniano correspondente pode ser escrito como $H(x) = H_0(x) + \lambda\delta(x)$, com $(-\infty < x < +\infty)$. Obter a solução

de Schrödinger para H é equivalente a obter $\varphi(x)$ que satisfaz a relação $H_0(x)\varphi(x) = \frac{1}{2}k^2\varphi(x)$ em uma dimensão, restrito às condições de contorno $\varphi(0^+) = \varphi(0^-) = \varphi(0)$ e $\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = 2\lambda\varphi(0)$ [$\varphi'(x) \equiv d\varphi(x)/dx$].

Similarmente, diferentes tipos de interação de contato — que são generalizações do potencial δ — podem ser pensados como formalmente definidos por $H(x) = H_0(x) + \Xi(x)$. A dificuldade é que, em geral, não existe uma forma funcional para $\Xi(x)$ (veja por exemplo a discussão detalhada em [159]). Uma maneira de contornar o problema é pensar que o potencial geral $\Xi(x)$ pode ser descrito como uma condição de contorno apropriada, que deve ser imposta à função de onda no ponto de atuação de $\Xi(x)$. Desta forma, similarmente ao caso da δ , consideramos

$$\begin{pmatrix} \varphi(0^+) \\ \varphi'(0^+) \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi(0^-) \\ \varphi'(0^-) \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

sendo a , b , c , e d números reais tais que $ad - bc = 1$ e $|\omega| = 1$. Esta é a situação mais geral consistente com a conservação do fluxo [160]. Particularizando os valores dos parâmetros, temos diferentes tipos de interação. Por exemplo, se $a = d = \omega = 1$ então os potenciais³ δ e δ' são obtidos, respectivamente de $b = 0$, $c = 2\lambda$ e de $c = 0$, $b = 2\lambda$.

A solução de espalhamento para a condição geral descrita pela Eq. (5.5), representada por uma onda plana de número de onda k e incidência da esquerda (+) ou da direita (-), é escrita como [159].

$$\varphi^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{\pm ikx} + R^{(\pm)}e^{\mp ikx} & (x \leq 0) \\ T^{(\pm)}e^{\pm ikx} & (x \geq 0) \end{cases}, \quad (5.6)$$

onde as amplitudes quânticas são dadas por

$$R^{(\pm)} = \frac{c \pm ik(d - a) + bk^2}{-c + ik(d + a) + bk^2}, \quad T^{(\pm)} = \frac{2ik\omega^{\pm 1}}{-c + ik(d + a) + bk^2}. \quad (5.7)$$

³Devemos enfatizar que a função δ' é apenas uma notação para um tipo de potencial de contato, e não, a derivada da função delta de Dirac.

Agora, para resolver a interação de contato mais geral movendo-se com velocidade constante u , precisamos simplesmente seguir nossa descrição prévia feita para a parede infinita. Deste modo, a função de onda exata dependente do tempo $\psi_k^{(\pm)}(x, t)$ para o problema é escrita como na Eq. (5.2), onde $\varphi_k^{(\pm)}$ é dado pela Eq. (5.6) com x substituído por $x - ut$.

5.2 ESPALHAMENTO DO PACOTE DE ONDAS

A evolução temporal de um estado inicial $\Psi(x, t_0)$ é dada por

$$\Psi(x, t) = \int dx_0 K_u(x, t; x_0, t_0) \Psi(x_0, t_0) \quad ,$$

sendo K_u o propagador quântico. Para o caso de potenciais escritos como $V(x - ut)$, ou seja, movendo-se com velocidade constante, uma espécie de transformação de Galileu conduz a uma solução exata para o propagador; caso seja conhecido o propagador exato para $V(x)$. Então os K_u 's correspondentes são [155] (para $y \equiv x - ut$)

$$K_u(x, t; x_0, t_0) = e^{i[\gamma(x, t) - \gamma(x_0, t_0)]} K(y, t; y_0, t_0) \quad , \quad (5.8)$$

onde $K(y, t; y_0, t_0)$ é o propagador no referencial de movimento y , para o qual o potencial é $V(y)$.

Para uma barreira de potencial infinita fixa com condição de contorno mais geral, o propagador exato foi calculado na Ref. [153], ou ($T = t - t_0$)

$$K^{\text{wall}}(y, t; y_0, t_0) = K_0(y - y_0) + K_0(y + y_0) + 2K_{\text{int}}(y + y_0, \lambda) \quad . \quad (5.9)$$

O propagador exato para a interação pontual mais geral possível (5.5) foi obtido na Ref. [161]. Existem muitas expressões diferentes, dependendo dos valores dos parâmetros na Eq. (5.5). Por exemplo, para os casos dos potenciais δ e δ' [161–164] encontramos as seguintes expressões exatas para o propagador ($s = \text{sign}(y)$) e

$$s_0 = \text{sign}(y_0)$$

$$K^\delta(y, t; y_0, t_0) = K_0(y - y_0) + K_{int}(|y| + |y_0|, \lambda) \quad (5.10)$$

$$K^{\delta'}(y, t; y_0, t_0) = K_0(y - y_0) + s s_0 K_0(|y| + |y_0|) + s s_0 K_{int}(|y| + |y_0|, 1/\lambda) \quad .$$

Em todas as expressões citadas anteriormente escrevemos

$$\begin{aligned} K_0(v) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi iT}} \exp\left[\frac{i}{2T}v^2\right] \quad \text{e} \\ K_{int}(v, \nu) &= -\frac{\nu}{2} \exp\left[\frac{iT}{2}\nu^2 + \nu v\right] \text{erfc}\left[\sqrt{\frac{iT}{2}}\nu + \frac{1}{\sqrt{2iT}}v\right] \quad . \end{aligned} \quad (5.11)$$

Para discutir o espalhamento do pacote de ondas, vamos fazer $t_0 = 0$ e escrever $\Psi(x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \exp[ikx_0]$. Note que o momento médio do estado inicial é simplesmente $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk k |g(k)|^2 \equiv k_0$. Para o caso Gaussiano $g(k) = \sqrt{2\Delta/\sqrt{2\pi}} \exp[-\Delta^2(k - k_0)^2 - i(k - k_0)\bar{x}]$ no qual obtemos

$$\Psi(x_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{1/2}\Delta}} \exp\left[ik_0x_0 - \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{4\Delta^2}\right] \quad . \quad (5.12)$$

Considerando agora o pacote de ondas geral, um potencial que se move com velocidade constante u , e a fórmula exata do propagador, a função de onda pode ser escrita como

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\gamma(x,t)} \int dx_0 K(x - ut, t; x_0, 0) \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) e^{i(k-u)x_0} \quad . \quad (5.13)$$

Dessa expressão podemos observar que o termo $\gamma(x, t)$ não contribui para $|\Psi|^2$. É interessante notar também que se considerarmos $u \neq 0$ e $u = 0$, vemos que $|\Psi(x - ut, t)|^2$ para a barreira fixa. Logo temos a associação $g_{\text{mov.}}(k + u) = g_{\text{fix.}}(k)$. Em particular, se $g = g(k - k_0)$ — como por exemplo, para um pacote de ondas Gaussiano —, então a distribuição dos momentos de um estado inicial terá a mesma forma funcional Gaussiana, mas com $k_{0,\text{mov.}} = k_{0,\text{fix.}} + u$. Isto mostra então que controlar a velocidade u do potencial é uma forma de controlar o momento médio de um pacote de ondas transmitido pelo potencial.

O fato acima pode ser relevante para analisar certos fenômenos em física atômica [165] ou até mesmo para a criação de dispositivos em estado sólido [166–168],

para a transmissão de partículas através de barreiras de potencial extremamente estreitas [165, 169–171]. Por exemplo, em condições de laboratório pode-se não ter controle sobre o estado quântico inicial, mas pode-se querer um pacote de ondas com um determinado k_0 após tunelar uma barreira. Então, mudando a velocidade da barreira de potencial poderíamos ajustar o momento médio relativo das componentes transmitidas, e assim, obtermos um “filtro” regulador do momento médio do pacote que posteriormente será usado para algum fim específico. Desta forma, potenciais em movimento podem ser úteis até mesmo para configurar (estabelecer) um estado inicial. Como discutido acima, sob certas condições o pacote de ondas transmitido para $u > 0$ tem a mesma forma espacial que para um caso fixo, no entanto com um aumento do momento médio. Desse modo, se por alguma razão precisarmos de um pacote de onda transmitido de uma dada forma (configuração), mas gostaríamos que o mesmo fosse mais “rápido”, então um potencial de curto alcance em movimento faria este trabalho.

Este efeito pode ser observado, por exemplo, nos espelhos de força atômica — veja, por exemplo, a Ref. [172] —, no qual o efeito do espalhamento do pacote de ondas por uma parede de potencial muda o momento médio do pacote de ondas transmitido. Além disso, diferentes condições de contorno de um potencial de contato podem resultar em uma interação mais forte. Então, o efeito de força atômica mencionado poderia ser aumentado quando o pacote de ondas é espalhado para fora de uma barreira singular em movimento. Tal efeito pode servir como uma aplicação interessante para o presente potencial.

Na próxima seção discutiremos o espalhamento do pacote de ondas considerando alguns exemplos numéricos simples. Para isso, admitiremos um pacote de ondas Gaussiano, Eq. (5.12), e resolveremos a integral numericamente sobre x_0 na Eq. (5.13). Em todos os casos usamos $\Delta = 0,2$ e deste modo os estados iniciais são sempre bem localizados em torno de \bar{x} .

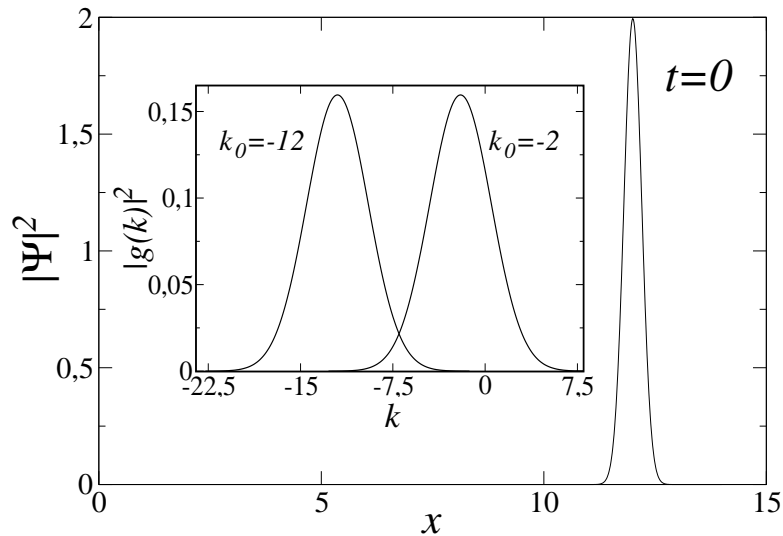


Fig. 5.1: O pacote de ondas Gaussiano considerado no espalhamento por uma barreira infinita. O gráfico inserido mostra a distribuição de momento desse pacote para dois valores de k_0 .

5.2.1 CASO DA BARREIRA DE POTENCIAL INFINITA

Nesta subseção estudaremos somente a influência da condição de contorno sobre o comportamento da partícula, na qual discutiremos apenas o caso de $u = 0$. Na Fig. 5.1 mostramos $|\psi(x_0, 0)|^2$, na qual usamos $\bar{x} = 12$ e dois valores de momento médio: $k_0 = -12$ e $k_0 = -2$. Deste modo, o centro do pacote de ondas inicial será sempre direcionado para a esquerda. Na figura inserida na Fig. 5.1 mostramos $|g(k)|^2$ para os dois valores de k_0 indicados acima. Para $k_0 = -12$ o estado inicial praticamente não tem componentes com $k > -5$, enquanto para $k_0 = -2$ o pacote de ondas inicial tem uma contribuição considerável de ondas planas cujos valores de k são maiores que 0, logo, se deslocam para a direita.

Na Fig. 5.2 mostramos a propagação numérica exata do pacote de ondas para $k_0 = -12$, o parâmetro da condição de contorno $\lambda = 12$, e $t = 1$ — que é o tempo necessário para o centro do estado inicial atingir a barreira. Para esses valores de parâmetros na Eq. (5.1) temos que $f(k_0) = i$. Então, a principal componente do pacote de ondas adquire uma fase $\pi/2$ na colisão com a parede. Na figura inserida na Fig. 5.2 comparamos, para $t = 1$, o caso onde $\lambda = 12$ com a usual condição de

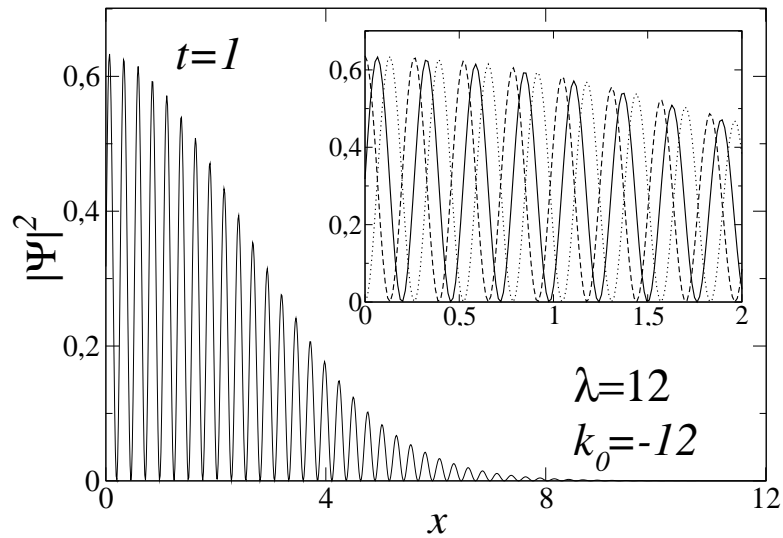


Fig. 5.2: Evolução temporal de um pacote de Gaussiano da Fig. 5.1 para os parâmetros indicados. No gráfico inserido comparamos o caso de $\lambda = 12$ com os casos de Dirichlet (pontilhado) e Neumann (tracejado).

Dirichlet ($\lambda = +\infty$) e a condição de contorno de Neumann ($\lambda = 0$). Podemos ver claramente as diferenças apresentadas nas fases.

Na Fig. 5.3 mostramos os casos de $\lambda = 12$, de Dirichlet e Neumann para os parâmetros da Fig. 5.2 porém para $t = 10$. Para comparações também mostramos a propagação do pacote de ondas Gaussiano livre (sem barreira) centrado em $\bar{x} = -12$ e com $k_0 = +12$ — ou seja, uma “imagem especular” do estado inicial. Em uma visão geral todos os casos são muito similares. Os três pacotes de ondas estão viajando para a direita com praticamente o mesmo momento médio $k_{0,\text{scat.}} = +12$ — o mesmo ocorre para tempos longos. No entanto, uma ampliação próxima da parede (figura inserida) revela que em torno de $x = 0$ eles diferem um do outro devido às diferentes condições de contorno.

Na Fig. 5.4 mostramos $|\psi(x, t = 200)|^2$ para $\lambda = 2$ e $k_0 = -2$ e também para a evolução livre da correspondente imagem especular do pacote de ondas inicial. Note que para esses valores de parâmetros encontramos novamente $f(k_0) = i$. Além disso, o tempo necessário para o centro do estado inicial atingir a parede é agora $t = 6$. O comportamento oscilatório é observado até mesmo para o tempo longo de

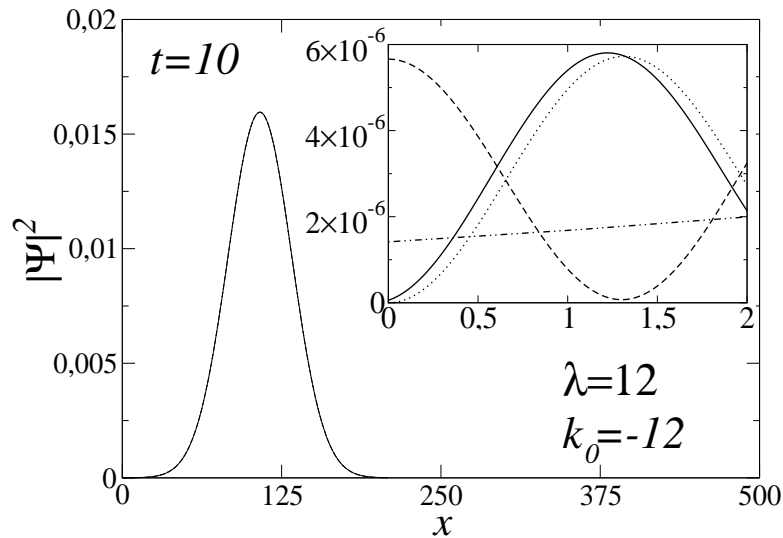


Fig. 5.3: Para a mesma situação descrita na Fig. 5.2, mas com $t = 10$. Na figura comparamos os casos para $\lambda = 12$ (sólido), Dirichlet (pontilhado), Neumann (tracejado) e a propagação livre (traço-pontilhado). Visualmente não podemos distinguir entre os diferentes casos. Na figura inserida mostramos uma ampliação em torno da parede.

$t = 200$, que está simplesmente relacionado com o fato de no caso $k_0 = -2$ o pacote de onda inicial ter uma contribuição importante de pequenas componentes de $|k|$. De fato, as oscilações resultam da interferência entre as componentes do pacote que ainda estão chegando com aquelas de já foram espalhadas pela barreira. Finalmente, na figura inserida na Fig. 5.4 comparamos o caso de $\lambda = 2$ com as correspondentes condições de contorno de Dirichlet e Neumann.

5.2.2 CASO DE INTERAÇÕES PONTUAIS

O problema de partículas espalhadas por uma interação de contato geral em 1D exibem muitos fenômenos inesperados. São encontrados exemplos em: interação de muitos corpos [173]; dualidade férmions-bósons [174]; junções Josephson [175]; reconstruções quânticas [169]; *etc.* Tal riqueza pode ser explicada pela dependência da amplitude de reflexão e de transmissão com os parâmetros a, b, c e d destes potenciais — veja a Eq. (5.7). Aqui, estamos adicionando um novo ingrediente no problema; o

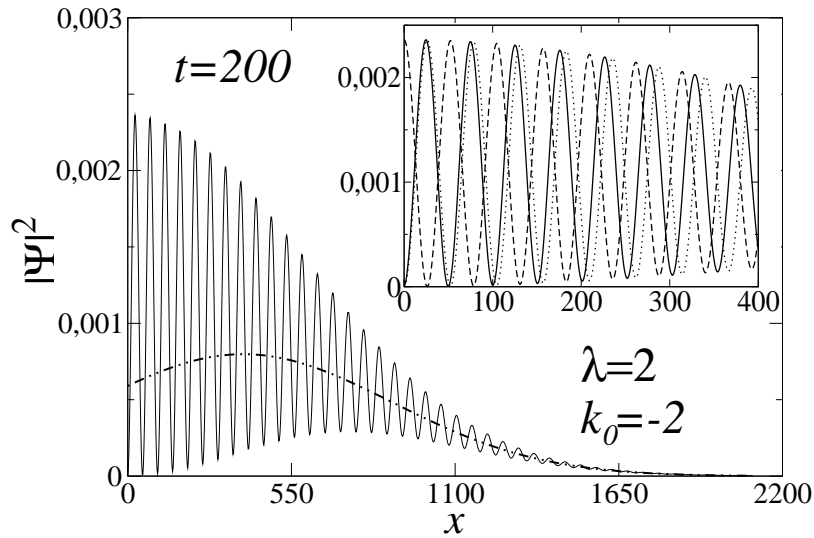


Fig. 5.4: Evolução temporal do pacote Gaussiano mostrado na Fig. 5.1 para os parâmetros indicados. Para comparação, é também mostrado a imagem especular da evolução livre do pacote de ondas inicial (traço-pontilhada). Na figura inserida comparamos os casos de $\lambda = 2$ com os correspondentes casos de Dirichlet (pontilhado) e Neumann (tracejado).

deslocamento da barreira.

Vamos considerar como primeiro caso particular uma interação do tipo δ , para a qual $T^{(\delta)} = ik/(-\lambda + ik)$ e $R^{(\delta)} = \lambda/(-\lambda + ik)$. Apesar de ser o ponto de interação mais simples, análises de espalhamento do pacote de ondas para o potencial δ para barreiras fixas são escassas [176, 177]. Para o caso em movimento, existem alguns resultados [171, 178, 179], mas nestes exemplos o problema do espalhamento não foi tratado.

Vamos admitir uma interação tipo função δ cujo $\lambda = 12$, localizada na origem em $t = 0$. Para o pacote Gaussiano inicial consideramos $\bar{x} = 12$, $\Delta = 0,2$, e $k_0 = 12$. Então ambos, o pacote de ondas e sua distribuição de momentos $g(k)$, são apenas imagens especulares dos gráficos traçados na Fig. 5.1. Mostramos, respectivamente, nas Figs. 5.5 e 5.6, o espalhamento do pacote de ondas para o caso do potencial δ fixo ($u = 0$) e em movimento ($u = 4$). Na Fig. 5.5 observamos que após um tempo suficientemente longo o pacote inicial é separado em dois pacotes Gaussianos propagando-se em direções opostas. Integrando-se o quadrado do pacote

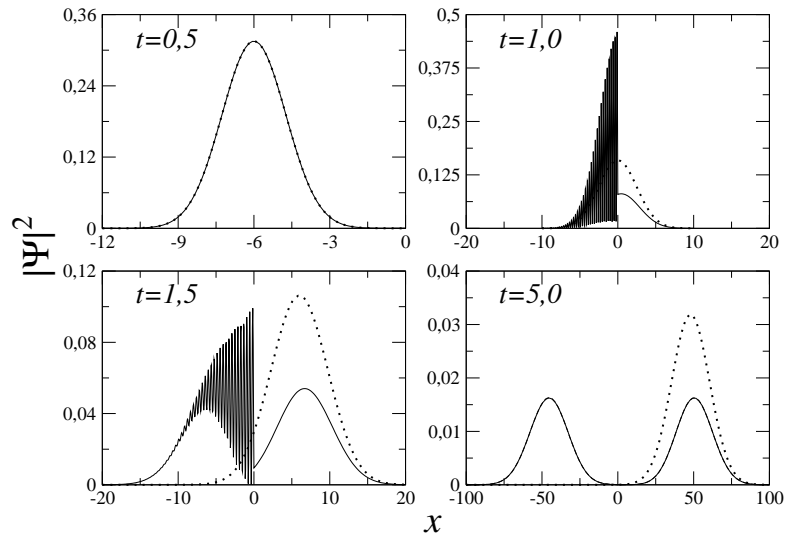


Fig. 5.5: Evolução temporal do pacote de ondas Gaussiano em diferentes instantes de tempos para um potencial δ fixo ($u = 0$), $\lambda = 12$ e $\bar{x} = -12$. Por comparação, mostramos em linhas pontilhadas a evolução temporal do mesmo pacote de ondas inicial para o caso livre (sem barreira).

de onda refletido e transmitido em suas respectivas regiões, o resultado é 49%-51%. Essa divisão em partes quase iguais ocorre devido ao fato que o pacote de onda inicial praticamente não tem componentes negativas do momento e $|R^{(\delta)}(k_0)|^2 = |T^{(\delta)}(k_0)|^2 = 0,5$. As porcentagens não são exatamente iguais (50%-50%) porque $|T^{(\delta)}(k)|^2$ não é simétrica em torno de $k = k_0$. Analisando a Fig. 5.5 para $t = 5$ observamos que o pacote de ondas transmitido tem uma velocidade de grupo maior que a refletida e da evolução livre (sem potencial). Características similares podem ser vistas na Fig. 5.6 para $t \geq 7,5$. Também, para o caso na Fig. 5.6, o momento médio do pacote de ondas inicial relativo ao potencial em movimento é $k_{0,\text{rel.}} = k_0 - u = 8$, então $|T(k_{0,\text{rel.}} = 8)|^2 = 0,308$. Isso explica porque somente em torno de 30% do estado inicial foi transmitido.

Comparando as Figs. 5.5 e 5.6, notamos na última a persistência de efeitos oscilatórios para a “cauda” do pacote de ondas refletido próximo a localização da barreira. Durante o espalhamento, interferências ocorrem entre as componentes da onda plana refletida (k grande) com aqueles ainda propagando-se em direção ao potencial ($k > 0$, mas pequeno) e também com aqueles que inicialmente já estavam viajando

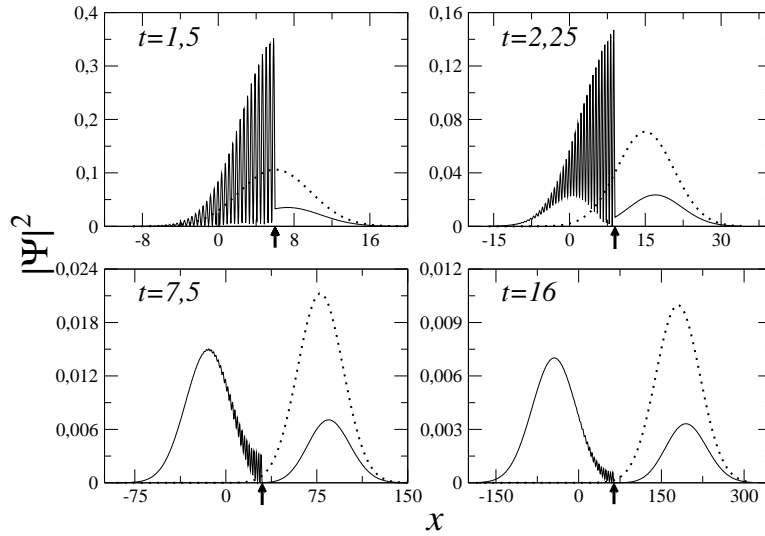


Fig. 5.6: A mesma situação descrita na Fig. 5.5, mas para $u = 4$. A flecha indica a posição do potencial δ em movimento. Observe que podemos fazer uma comparação direta para os respectivos instantes de tempo t iguais a 1,5, 2,25, e 7,5 com os instantes de tempo t iguais a 1, 1,5, e 5 na Fig. 5.5 porque $k_{0,rel.}(u = 0)/k_{0,rel.}(u = 4) = 12/8 = 1,5$.

para a esquerda ($k < 0$). A diminuição relativa dos valores dos k 's do pacote no caso em movimento, fazem com que as contribuições dos últimos dois processos mencionados de interferência aumentem, deste modo prolongando as oscilações observadas.

Na Fig. 5.7 traçamos o gráfico de $|\Psi(x, t = 20)|^2$ para os mesmos parâmetros da Fig. 5.5, mas com $k_0 = 3$. Neste caso $\int_{-\infty}^0 dk |g(k)|^2 = 0,115$ então, momento negativo corresponde a 11,5% das componentes da onda plana de um estado inicial, explicando muitas oscilações vistas na Fig. 5.7. Mencionamos que $t = 20$ é equivalente a $t = 5$ na Fig. 5.5 no sentido de ambas serem iguais ao tempo necessário para o centro do pacote de ondas inicial atingir o potencial de contato.

Para calcular $\Psi(x, t)$ para uma interação de contato arbitrária, é necessário primeiro escrever o propagador K correspondente — em geral dado por uma expressão complicada, veja a Ref. [161] — e então calcular a integral na Eq. (5.13) numericamente. No entanto, se o pacote de onda inicial é bem localizado em um dos lados do potencial, podemos resolver uma integral mais simples que envolve somente a amplitude quântica (5.7), ao invés do propagador total. No apêndice A deduzimos

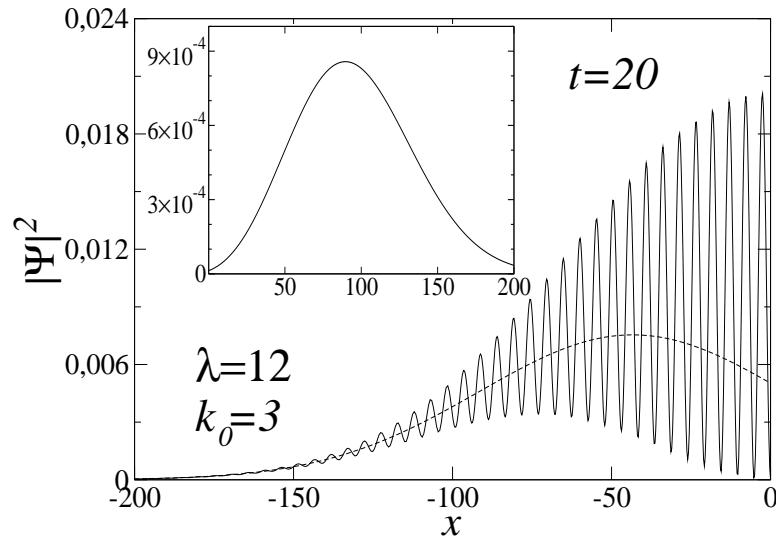


Fig. 5.7: $|\Psi(x, t = 20)|^2$ para os mesmos parâmetros da Fig. 5.5, mas com $k_0 = 3$. A propagação livre (curva tracejada) é mostrada também para $x < 0$.

as expressões para a parte transmitida e para a parte refletida para o caso de um potencial de contato geral, isto é, um potencial de forma arbitrária, mas identicamente nulo fora de uma certa região. Obviamente interações de contato são exemplos particulares desta classe mais geral de potencial. Então, do resultado apresentado no apêndice A segue:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \Psi^{(\text{livre})}(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) R^{(\pm)}(k) e^{\mp i k x - i \frac{k^2}{2} t} & (x \leq 0) \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) T^{(\pm)}(k) e^{\pm i k x - i \frac{k^2}{2} t} & (x \geq 0) \end{cases} \quad (5.14)$$

Na equação acima o subscrito superior (inferior) significa que o pacote de ondas inicial está localizado no lado esquerdo (direito) do potencial de contato em $x = 0$. Mencionamos que, usando as expressões acima, conseguimos reproduzir todos os gráficos mostrados nas Figs. 5.5-5.7, como deveria ser.

Da Eq. (5.14) podemos fazer estudos comparativos sobre os efeitos de diferentes interações de contato no espalhamento de um pacote de ondas inicialmente localizado. Por exemplo, no limite do tempo assintótico podemos calcular o quanto o pacote de onda (inicialmente localizado no lado esquerdo de um potencial de contato) foi

transmitido através de um potencial. Para isso basta fazermos $\int_0^{+\infty} dx \Psi^* \Psi$ para $x > 0$ e admitindo t suficientemente grande, com isso obtemos: $P_T = \int_0^{+\infty} dk |g(k)|^2 |T^{(+)}(k)|^2$. Além disso, podemos obter o momento médio do pacote de ondas transmitido por $\langle p \rangle = \int_0^{+\infty} dk k |g(k)|^2 |T^{(+)}(k)|^2 / \int_0^{+\infty} dk |g(k)|^2 |T^{(+)}(k)|^2$. Para casos particulares de potenciais⁴ δ e δ' , temos (observando que⁵ $T^{(\delta')} = \lambda^{-1}/(\lambda^{-1} - ik)$ e $R^{(\delta')} = -ik/(\lambda^{-1} - ik)$)

$$\begin{aligned} \langle p \rangle^{(\delta)} &= \frac{1}{P_T^{(\delta)}} \int_0^{+\infty} dk k |g(k)|^2 \frac{k^2}{\lambda^2 + k^2}, \\ \langle p \rangle^{(\delta')} &= \frac{1}{P_T^{(\delta')}} \int_0^{+\infty} dk k |g(k)|^2 \frac{\lambda^{-2}}{\lambda^{-2} + k^2}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

A equação descrita acima fornece para $\langle p \rangle^{(\delta)}$ (veja as Figs. 5.5, 5.6 e 5.7) respectivamente os valores: 12,53, 9,01 e 5,38. Tais valores estão em conformidade com os cálculos numéricos mais elaborados de $\langle p \rangle^{(\delta)}$ em termos das Eq. (5.13). Da Eq. (5.15) percebemos que para o caso δ' o momento médio do pacote de ondas transmitido é menor que o momento médio do pacote de ondas inicial, e portanto, contrário ao caso usual de potencial de contato. Este é apenas um exemplo de uma característica não usual de interações de contatos gerais, em que eventualmente poderia ser usado para manipular pacotes de ondas.

5.3 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Neste capítulo mostramos como estender a técnica usual de extensão auto-adjunta para tratar uma interação de contato movendo-se com velocidade constante. A idéia central consiste em usar as condições de contornos análogas às de um caso de potencial de contato fixo. A diferença, no entanto, é que no problema em movimento impomos tal condição de contorno não na função de onda total, mas sim no termo

⁴Lembrando que o potencial δ' não representa a derivada do potencial δ , e sim, uma notação para um tipo particular de potencial de contato.

⁵Os cálculos dos coeficientes de transmissão e reflexão são obtidos a partir da Eq. (5.7).

da função de onda correspondente ao referencial em movimento. Este procedimento assegura a conservação da densidade de corrente, um dos guias do método auto-adjunto.

Discutimos como um pacote de ondas Gaussianas é espalhado por uma parede infinita para diferentes potenciais de contato. Analisamos também a influência do movimento da barreira no espalhamento do pacote. Os cálculos foram realizados também para uma barreira fixa ($u = 0$). Mostramos como a dinâmica da barreira interfere nos coeficientes de transmissão e reflexão.

É muito interessante observar que apesar da nossa abordagem ser direta, a mesma não representa a única possibilidade de construir uma extensão auto-adjunta para o presente sistema. Em seguida exemplificaremos esse ponto para uma barreira de potencial infinita em movimento. Como mencionado antes, a imposição direta da condição de contorno na função de onda dependente do tempo, a saber

$$\left. \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right|_{x=ut} = \lambda \psi(x, t) \Big|_{x=ut} ,$$

conduz à não conservação do fluxo. Mas aqui estamos assumindo λ uma constante que não depende dos parâmetros do sistema. Então, uma idéia diferente da usada na seção 5.1 é tentar algumas generalizações para a própria condição de contorno. Deste modo, considere

$$\left. \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right|_{x=ut} = \lambda \psi(x, t) \Big|_{x=ut} + \Lambda \left. \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \right|_{x=ut} ,$$

sendo λ um número real arbitrário e Λ um parâmetro que pode depender do sistema. Se fizermos $\Lambda = -2u/(u^2 + k^2)$ (note a dependência explícita de k e u), então a Eq. (5.2) será a solução exata para o problema com φ dado pela Eq. (5.3), onde, f_u é substituído por

$$f_\Lambda(k) = \frac{\lambda + ik(k^2 - u^2)/(k^2 + u^2)}{-\lambda + ik(k^2 - u^2)/(k^2 + u^2)} . \quad (5.16)$$

Observe que: (i) $|f_\Lambda(k)|^2 = 1$ para qualquer λ e u ; e (ii) conseguimos obter a prévia solução exata para o caso fixo onde $u = 0$.

O exemplo acima mostra a grande liberdade para se implementar a extensão auto-adjunta para potenciais de contato em movimento. Para sistemas concretos, certamente a forma correta de escolher a extensão mais apropriada deve vir das restrições para as características físicas do problema em mãos (veja, por exemplo a Ref. [152]).

Por último, observamos que este capítulo foi exploratório e podemos encontrar outras aplicações para esses resultados. Por exemplo, condições de contorno mais gerais para barreiras infinitas em movimento podem ser particularmente interessantes em estudos de: (a) flutuações no efeito Casimir [180]; e (b) o surgimento de caos quântico em modelos de acelerador de Fermi [181, 182]. Também, nossa interação de contato em movimento; pode (c) aumentar a compressão do pacote de ondas [177] devido ao seu maior efeito singular sobre o estado incidente durante o tunelamento; e (d) ser analisado em termos de uma parametrização da interação de contato discutida recentemente na Ref. [183], proposta como uma possível realização de qubits em computação quântica [184, 185].

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

A proposta desta tese foi desenvolver um procedimento de controle original que pudesse ser aplicado em sistemas quânticos. Este novo procedimento foi baseado na aplicação de campos externos estáticos por partes, cuja dependência temporal pode ser conseguida através da aplicação de sucessivas partes do controle. Com isso, do ponto de vista quântico podemos concluir que é possível usar campos estáticos para controlar a dinâmica quântica. Os resultados obtidos no controle do valor esperado de um observável, da função de autocorrelação e do momento médio do pacote de ondas nos levaram a essas conclusões. É claro que outros fenômenos podem interferir no processo de controle, tais como, divergências no campo para o controle de trajetórias [33], incoerências quânticas [40], flutuações e erros nos valores do campo [51], aparecimento de caos *etc.* De fato, como vimos nesta tese, esses efeitos interferem diretamente na qualidade do controle, não obstante o controle pode ser realizado.

O ingrediente mais importante desse processo dinâmico está relacionado com as regras de interação entre o campo externo e o sistema, ou seja, uma vez que o campo externo é a única forma de acessar e interferir⁶ na dinâmica molecular, devemos evitar que o campo desacople do sistema. O surgimento de singularidades no campo ocorrem devido ao desacoplamento do campo com o sistema quântico, e com isso, temos perdas momentaneamente de controle.

⁶Neste ponto estamos nos referindo aos processos de interferências em ondas de matéria causada pela presença do campo externo.

Para demonstrar a técnica escolhemos quatro tipos de sistemas: um sistema descrito por apenas dois níveis de energia [51], um sistema com três níveis [53], uma partícula em um bilhar circular [54] e uma partícula livre interagindo com um potencial de contato geral [55]. Deste modo, iniciamos com um sistema simples e fomos progressivamente avançando para sistemas mais complicados, o que nos parece uma boa estratégia para se começar a testar um novo método. Cada um desses sistemas foi escolhido por razões específicas.

O sistema de dois níveis mostrou-se suficientemente simples para que fossem obtidas soluções completamente analíticas para o vetor de estado, o que resultou em um sistema robusto o suficiente para se testar o método, além disso, esse tipo de sistema serve como protótipo para diversas aplicações, como já foi mencionado no Cap. 2. Neste sistema nos concentramos no controle sobre o valor esperado de um observável geral e mostramos que é possível realizar o controle configurando-se dois ou até mesmo um parâmetro do campo externo, independentemente do estado inicial do sistema. Além disso, observamos que este sistema é robusto a erros aleatórios introduzidos nos parâmetros do campo, embora, a existência de erros resulte em perda de qualidade no controle.

Com o sistema de três níveis tivemos a oportunidade de estudar o controle em um sistema fisicamente mais rico e propício ao surgimento de novos fenômenos físicos, como por exemplo, a transparência quântica, aprisionamento de estados, inversão de população adiabática e outros efeitos de interesse em óptica quântica. No entanto, no âmbito deste trabalho estudamos apenas o controle de um observável relevante no contexto do controle de trajetórias. Apontamos para o fato da qualidade do controle depender das características físicas e do estado inicial do sistema em estudo.

Para o bilhar circular aplicamos somente um passo de controle, mas agora o alvo de controle foi a função de autocorrelação, que traz informações sobre os processos de reconstrução. Este é um caso particular de controle global. Este foi o primeiro passo de controle rumo a um sistema com muitos níveis. A escolha do bilhar circular está no fato de conseguirmos soluções analíticas para os estados

próprios do sistema em um regime de campos intensos. Soluções para o sistema nesse regime são, em geral, bastante difíceis de se obter na prática. Um outro aspecto interessante é que o bilhar circular freqüentemente é utilizado como primeiro modelo de pontos quânticos, o que o torna interessante para estudos em sistemas atômicos. Observamos como incoerências nas energias conduzem a perdas de qualidade na reconstrução. Chegamos a esta conclusão comparando os nossos resultados com aqueles apresentados na Ref. [131].

Como extensão do estudo da dinâmica de pacotes de ondas, tratamos o caso do espalhamento de um pacote de ondas Gaussiano por um potencial de contato geral movendo-se com velocidade constante. Desses estudos mostramos que dependendo da velocidade da barreira conseguimos controlar a velocidade média do pacote de ondas transmitido pela barreira de potencial. O pacote de ondas transmitido é uma imagem especular do pacote de ondas inicial com momento médio maior.

PERSPECTIVAS

Nos últimos 20 anos avanços foram conseguidos rumo ao entendimento do controle em processos atômicos e moleculares. Estes avanços foram possíveis em parte pelos desenvolvimentos teóricos e em parte pelo progresso experimental. Devido ao interesse em ciência aplicada, as pesquisas em controle quântico vêm caminhando em direções como: na aplicação em sistemas quânticos grandes (moléculas poliatômicas), controle em sistemas com decoerência quântica (sistemas biológicos e de matéria condensada), pulsos altamente configuráveis com dependências temporais mais ricas (desenvolvimento de lasers e dispositivos ópticos), e a busca por um controle global (controle das funções de onda). Em teoria o grande desafio consiste em resolver sistemas de equações diferenciais não lineares complexas com dimensões elevadas (equação de Schrödinger).

Neste sentido, apresentamos nesta tese quatro estudos que resultaram nos Capítulos 2, 3, 4 e 5. No entanto, podemos apontar alguns estudos que poderão

ser realizados a partir desses trabalhos. A seguir vamos indentificar alguns casos de interesse.

Para um problema de dois níveis podemos aplicar um campo harmônico com uma frequência característica ν , e estudar a qualidade do controle em função da frequência do campo aplicado. Para um caso particular em que a frequência do campo externo é ressonante com a transição, podemos usar a aproximação de função de ondas rotacional e obter uma solução analítica para os estados próprios. Para frequências não ressonantes teremos que resolver a equação de Schrödinger numericamente. Ou seja, será que podemos conseguir um controle melhor se usarmos um campo com uma frequência apropriada? Este pode ser um ponto importante quando pensamos em controle em laboratório. Ou então podemos pensar em aplicar um pulso com um conjunto grande de frequências e efetuar o controle através da configuração desse pulso. Como uma aplicação mais específica podemos pensar em utilizar esses conhecimentos para controlar um sistema de *spin* em um ponto quântico.

Com relação a um sistema de três níveis podemos aplicar um conjunto constituído por dois campos harmônicos, e resolver a equação de Schrödinger numericamente, a fim de estudar a qualidade do controle com relação a essas duas frequências. Com isso poderemos otimizar uma inversão de população para aplicações em *laser*, por exemplo.

Para os bilhares podemos aplicar a técnica de controle inverso para controlar o valor esperado da posição da partícula dentro do bilhar, e comparar com as trajetórias clássicas de uma partícula. Para isso, podemos escolher inicialmente um sistema mais simples conhecido, o poço quadrado infinito, cujo objetivo é encontrar os campos de controle, tanto para o caso clássico quanto para o caso quântico. O que podemos esperar desses campos?

APÊNDICE A

CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE TRANSMISSÃO E REFLEXÃO

Como é conhecido na literatura [186], o propagador é dado em termos da função de Green G por ($k^2 = 2E$)

$$K(x, t; x_0, 0) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk k \exp[-i\frac{t}{2}k^2] G(x, x_0; k) \quad . \quad (\text{A.1})$$

Vamos considere um potencial $V(x)$, identicamente nulo para $x < l_i$ or $x > l_f$, $l_f \geq l_i$. Para esses potenciais, a forma exata para G foi calculada na Ref. [187]. Definindo G_{+-} para $x > l_f$, $x_0 < l_i$; G_{-+} para $x_0 > l_f$, $x < l_i$; G_{++} para $x, x_0 > l_f$ e G_{--} para $x, x_0 < l_i$; temos que (\mathcal{R} e \mathcal{T} são os coeficientes de reflexão e transmissão através do potencial)

$$\begin{aligned} G_{\pm\mp}(x, x_0; k) &= \frac{1}{ik} \mathcal{T}^{(\pm)}(k) \exp[ik|x - x_0|] \quad , \\ G_{\mp\mp}(x, x_0; k) &= \frac{1}{ik} \left[\exp[ik|x - x_0|] + \mathcal{R}^{(\pm)}(k) \exp[\mp ik(x + x_0)] \right] \quad . \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

Precisamos calcular $\Psi(x, t) = \int dx_0 K(x, t; x_0, 0) \Psi(x_0, 0)$ para um pacote de ondas inicial $\Psi(x, 0) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \exp[ikx]$ bem localizada em um lado do potencial, como por exemplo, no lado esquerdo, tal que $\Psi(x, 0)$ é praticamente nulo para $x \geq l_i$.

Iniciaremos com o caso em que $x < l_i$. Na integral para $\Psi(x, t)$ usamos (A.1) para o propagador e a representação do estado inicial pela integral de Fourier. Desde que $x < l_i$, a integração envolverá $G_{-\pm}$, a Eq. (A.2), bem como a expressão exata para $G(x, x_0; k)$ para $l_i < x_0 < l_f$ [187]. No entanto, o pacote de ondas inicial é nulo para $x \geq l_i$. Portanto, as contribuições relevantes na integral vem de G_{--} . Além disso, para esse termo podemos estender a integral em x_0 (na qual varia de $-\infty$ até l_i) para toda a linha sem introduzir erros significantes no resultado. Deste modo, podemos escrever

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) \approx & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp[ikx_0] \\ & \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{k} \exp[-i\frac{t}{2}\tilde{k}^2] \exp[i\tilde{k}|x - x_0|] \\ & + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp[ikx_0] \\ & \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{k} \mathcal{R}^{(+)}(\tilde{k}) \exp[-i\frac{t}{2}\tilde{k}^2] \exp[-i\tilde{k}(x + x_0)] \quad . \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

Após algumas manipulações, encontramos

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) \approx & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \exp[ik(x - \frac{k}{2}t)] \\ & + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \exp[-ik(x + \frac{k}{2}t)] \\ & \times \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp[ix_0^2] \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{k} \exp[-i\tilde{k}^2] \\ & \times \mathcal{R}^{(+)}\left(k + \sqrt{\frac{2}{t}}(\tilde{k} - x_0)\right) \quad . \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

O primeiro termo no lado direito da equação acima representa apenas a evolução livre do pacote de ondas inicial. Para o segundo termo, a integral em ambos x_0 e k pode ser realizada exatamente por meio da transformação: $w = k - x_0$ e $v = (k + x_0)/2$. A integral em v fornece a função delta de Dirac e desse modo, a integração em w é simplificada, resultando simplesmente em $\mathcal{R}^{(+)}(k)$. Com isso chegamos

$$\Psi(x < l_i, t) = \Psi^{(\text{free})}(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \mathcal{R}^{(+)}(k) \exp[-ik(x + \frac{k}{2}t)] \quad . \quad (\text{A.5})$$

O cálculo de $\Psi(x, t)$ para $x > l_f$ é realizado de maneira similar. Podemos escrever

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) \approx & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp[ikx_0] \\ & \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{k} \mathcal{T}^{(+)}(\tilde{k}) \exp[-i\frac{t}{2}\tilde{k}^2] \exp[i\tilde{k}(x - x_0)] \quad , \quad (\text{A.6}) \end{aligned}$$

na qual pode ser simplificada

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) \approx & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \exp[ik(x - \frac{k}{2}t)] \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp[ix_0^2] \\ & \times \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{k} \exp[-i\tilde{k}^2] \mathcal{T}^{(+)}\left(k + \sqrt{\frac{2}{t}}(\tilde{k} - x_0)\right) \quad . \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

Novamente, considerando as mesmas transformações de variáveis para w e v , finalmente encontramos

$$\Psi(x > l_f, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk g(k) \mathcal{T}^{(+)}(k) \exp[ik(x - \frac{k}{2}t)] \quad . \quad (\text{A.8})$$

Naturalmente, podemos derivar uma forma similar para o pacote de ondas inicial localizado no lado direito do potencial. Nesse caso, a expressão final envolve a amplitude $\mathcal{R}^{(-)}$ and $\mathcal{T}^{(-)}$.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] T. H. Maiman. Stimulated optical radiation in ruby. *Nature* **187**, 493 (1960).
- [2] J. L. Bromberg. The birth of the laser. *Phys. Today* **41**, 26 (1988).
- [3] A. Javan, D. R. Herriott, e W. R. Bennett. Population inversion and continuous optical maser oscillation in a gas discharge containing a He–Ne mixture. *Phys. Rev. Lett.* **6**, 106 (1961).
- [4] A. M. Ronn. Laser chemistry. *Sci. Am.* **240**, 114 (1979).
- [5] V. S. Letokhov. Laser biology and medicine. *Nature* **316**, 325 (1985).
- [6] V. S. Letokhov. Photophysics and photochemistry. *Phys. Today* **30**, 23 (1977).
- [7] A. H. Zewail. The birth of molecules. *Sci. Am.* **263**, 76 (1990).
- [8] V. S. Letokhov. Laser-induced chemical processes. *Phys. Today* **33**, 34 (1980).
- [9] N. Bloembergen e A. H. Zewail. Energy redistribution in isolated molecules and the question of mode-selective laser chemistry revisited. *J. Phys. Chem.* **88**, 5459 (1984).
- [10] A. H. Zewail. Laser selective chemistry - is it possible? *Phys. Today* **33**, 27 (1980).
- [11] W. S. Warren, H. Rabitz, e M. Dahleh. Coherent control of quantum dynamics : the dream is alive. *Science* **259**, 1581 (1993).

- [12] H. Rabitz, R. de Vivie-Riedle, M. Motzkus, e K. Kompa. Whither the future of controlling quantum phenomena? *Science* **288**, 824 (2000).
- [13] D. J. Tannor e S. A. Rice. Control of selectivity of chemical reaction via control of wave packet evolution. *J. Chem. Phys.* **83**, 5013 (1985).
- [14] P. Brumer e M. Shapiro. Control of unimolecular reactions using coherent light. *Chem. Phys. Lett.* **126**, 541 (1986).
- [15] T. Seideman, M. Shapiro, e P. Brumer. Coherent radiative control of unimolecular reactions: Selective bond breaking with picosecond pulses. *J. Chem. Phys.* **90**, 7132 (1989).
- [16] M. Shapiro e P. Brumer. Laser control of unimolecular decay yields in the presence of collisions. *J. Chem. Phys.* **90**, 6179 (1989).
- [17] B. G. Englert, M. O. Scully, e H. Walther. The duality in matter and light. *Sci. Am.* **271**, 56 (1994).
- [18] A. Shnitman, I. Sofer, I. Golub, A. Yogev, M. Shapiro, Z. Chen, e P. Brumer. Experimental observation of laser control: electronic branching in the photodissociation of Na₂. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2886 (1996).
- [19] L. C. Zhu, V. Kleiman, X. N. Li, S. P. Lu, K. Trentelman, e R. J. Gordon. Coherent laser control of the product distribution obtained in the photoexcitation of HI. *Science* **270**, 77 (1995).
- [20] C. J. Bardeen, V. V. Yakovlev, K. R. Wilson, S. D. Carpenter, P. M. Weber, e W. S. Warren. Feedback quantum control of molecular electronic population transfer. *Chem. Phys. Lett.* **280**, 151 (1997).
- [21] A. Assion, T. Baumert, M. Bergt, T. Brixner, B. Kiefer, V. Seyfried, M. Strehle, e G. Gerber. Control of chemical reactions by feedback-optimized phase-shaped femtosecond laser pulses. *Science* **282**, 919 (1998).

- [22] T. C. Weinacht, J. Ahn, e P. H. Bucksbaum. Controlling the shape of a quantum wavefunction. *Nature* **397**, 233 (1999).
- [23] P. Brumer e M. Shapiro. Laser control of chemical reactions. *Sci. Am.* **272**, 34 (1995).
- [24] C. K. Chan, P. Brumer, e M. Shapiro. Coherent radiative control of IBr photodissociation via simultaneous (ω_1, ω_3) excitation. *J. Chem. Phys.* **94**, 2688 (1991).
- [25] Z. Chen, M. Shapiro, e P. Brumer. Incoherent interference control of photodissociation in the strong-field domain. *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.* **4**, 605 (1995).
- [26] I. Serban, J. Werschnik, e E. K. U. Gross. Optimal control of time-dependent targets. *Phys. Rev. A* **71**, 053810 (2005).
- [27] M. Shapiro e P. Brumer. *Principle of the quantum control of molecular processes*. John Wiley New Jersey (2003).
- [28] R. Kosloff, S. A. Rice, P. Gaspard, S. Tersigni, e D. J. Tannor. Wavepacket dancing: achieving chemical selectivity by shaping light pulses. *Chem. Phys.* **139**, 201 (1989).
- [29] B. Amstrup, R. J. Carlson, A. Matro, e S. A. Rice. The use of pulse shaping to control the photodissociation of a diatomic molecule - preventing the best from being the enemy of the good. *J. Phys. Chem.* **95**, 8019 (1991).
- [30] B. Hartke, E. Kolba, J. Manz, e H. H. R. Schor. Model-calculations of laser-induced dissociation of bromine with control of electronic product excitation. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **94**, 1312 (1990).
- [31] C. K. Ong, G. M. Huang, T. J. Tarn, e J. W. Clark. Invertibility of quantum-mechanical control systems. *Math. Systems Theory* **17**, 335 (1984).

- [32] J. W. Clark, C. K. Ong, T. J. Tarn, e G. M. Huang. Quantum nondemolition filters. *Math. Systems Theory* **18**, 33 (1985).
- [33] P. Gross, H. Singh, H. Rabitz, K. Mease, e G. M. Huang. Inverse quantum-mechanical control: a means for design and a test of intuition. *Phys. Rev. A* **47**, 4593 (1993).
- [34] W. S. Zhu, M. Smit, e H. Rabitz. Managing singular behavior in the tracking control of quantum dynamical observables. *J. Chem. Phys.* **110**, 1905 (1999).
- [35] A. Guldberg e G. D. Billing. Laser-induced dissociation of hydrogen-fluoride. *Chem. Phys. Lett.* **186**, 229 (1991).
- [36] B. Darquie, M. P. A. Jones, J. J. Dingjan, J. Beugnon, S. Bergamini, Y. Sortais, G. Messin, A. Browaeys, e P. Grangier. Controlled single-photon emission from a single trapped two-level atom. *Science* **309**, 454 (2005).
- [37] S. Chu. Cold atoms and quantum control. *Nature* **416**, 206 (2002).
- [38] M. O. Scully e M. S. Zubairy. *Quantum optics*. Cambridge (2002).
- [39] P. D. DiVincenzo. Double quantum dot as a quantum bit. *Science* **309**, 2173 (2005).
- [40] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, e A. C. Gossard. Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots. *Science* **309**, 2180 (2005).
- [41] C. H. Bennett. Quantum information and computation. *Phys. Today* **48**, 24 (1995).
- [42] C. H. Bennett e D. P. DiVincenzo. Quantum information and computation. *Nature* **404**, 247 (2000).

- [43] C. Monroe. Quantum information processing with atoms and photons. *Nature* **416**, 238 (2002).
- [44] R. S. Judson e H. Rabitz. Teaching lasers to control molecules. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1500 (1992).
- [45] I. Walmsley e E. Rabitz. Quantum physics under control. *Phys. Today* **56**, 43 (2003).
- [46] M. Chergui. Controlling biological functions. *Science* **313**, 1246 (2006).
- [47] K. C. Nowack, F. H. L. Koppens, Y. V. Nazarov, e L. M. K. Vandersypen. Coherent control of a single electron spin with electric fields. *Science* **318**, 1430 (2007).
- [48] B. J. Sussman, D. Townsend, M. Yu. Ivanov, e A. Stolow. Dynamic stark control of photochemical processes. *Science* **314**, 278 (2006).
- [49] E. A. Shapiro, M. Spanner, e M. Y. Ivanov. Quantum logic approach to wave packet control. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 237901 (2003).
- [50] K. F. Lee, D. M. Villeneuve, P. B. Corkum, e E. A. Shapiro. Phase control of rotational wave packets and quantum information. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 233601 (2004).
- [51] J. Kuhn e M. G. E. da Luz. Piecewise time-independent procedure to control two-level systems. *Phys. Rev. A* **75**, 053410 (2007).
- [52] W. P. Schleich. Quantum control: Sculpting a wavepacket. *Nature* **397**, 207 (1999).
- [53] J. Kuhn e M. G. E. da Luz. Quantum control in a three-level quantum system. *Em preparação* (2008).

- [54] J. Kuhn, G. J. Delben, e M. G. E. da Luz. Quantum control of a wavepacket in a circular quantum billiard. *Em preparação* (2008).
- [55] J. Kuhn, F. M. Zanetti, A. L. Azevedo, A. G. M. Schmidt, B. K. Cheng, e M. G. E. da Luz. Time-dependent point interactions and infinite walls: some results for wavepacket scattering. *J. Opt. B: Quantum Semicl. Opt.* **7**, S77 (2005).
- [56] R. Uberna, M. Khalil, R. M. Williams, J. M. Papanikolas, e S. R. Leone. Phase and amplitude control in the formation and detection of rotational wave packets in the $E^1\Sigma_g^+$ state of Li_2 . *J. Chem. Phys.* **108**, 9259 (1998).
- [57] R. Bartels, S. Backus, E. Zeek, L. Misoguti, G. Vdovin, I. P. Christov, M. M. Murnane, e H. C. Kapteyn. Shaped-pulse optimization of coherent emission of high-harmonic soft X-rays. *Nature* **404**, 164 (2000).
- [58] A. Vagov, V. M. Axt, e T. Kuhn. Electron-phonon dynamics in optically excited quantum dots: Exact solution for multiple ultrashort laser pulses. *Phys. Rev. B* **66**, 165312 (2002).
- [59] J. M. Taylor, W. Dur, P. Zoller, A. Yacoby, C. M. Marcus, , e M. D. Lukin. Solid-state circuit for spin entanglement generation and purification. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 236803 (2005).
- [60] R. N. Zare. Laser control of chemical reactions. *Science* **279**, 1875 (1998).
- [61] E. Brown e H. Rabitz. Some mathematical and algorithmic challenges in the control of quantum dynamics phenomena. *J. Math. Chem.* **31**, 17 (2002).
- [62] L. E. E. de Araujo e I. A. Walmsley. Analytic solution for quantum control of atomic and molecular wavepackets. *J. Opt. B: Quantum Semicl. Opt.* **5**, R27 (2003).

- [63] S. G. Schirmer, A. Kolli, e D. K. L. Oi. Experimental hamiltonian identification for controlled two-level systems. *Phys. Rev. A* **69**, 050306(R) (2004).
- [64] M. Z. Tian, Z. W. Barber, J. A. Fischer, e W. R. Babbitt. Geometric manipulation of the quantum states of two-level atoms. *Phys. Rev. A* **69**, 050301(R) (2004).
- [65] M. Z. Tian, Z. W. Barber, J. A. Fischer, e W. R. Babbitt. The geometric phase in two-level atomic systems. *J. Lumines.* **107**, 155 (2004).
- [66] A. A. Batista e D. S. Citrin. Rabi flopping in a two-level system with a time-dependent energy renormalization: Intersubband transitions in quantum wells. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 127404 (2004).
- [67] D. E. Rourke, L. Khodarinova, e A. A. Karabanov. Two-level systems with relaxation. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 163003 (2004).
- [68] X. S. Liu, W. Z. Liu, R. B. Wu, e G. L. Long. Control of state localization in a two-level quantum system. *J. Opt. B: Quantum Semicl. Opt.* **7**, 66 (2005).
- [69] P. C. P. de Andrade e J. A. Freire. Effective hamiltonians for the nonorthogonal basis set. *J. Chem. Phys.* **118**, 6733 (2003).
- [70] P. C. P. de Andrade e J. A. Freire. Electron transfer in proteins: nonorthogonal projections onto donor-acceptor subspace of the hilbert space. *J. Chem. Phys.* **120**, 7811 (2004).
- [71] F. I. Gauthey, C. H. Keitel, P. L. Knight, e A. Maquet. Phase of harmonics from strongly driven two-level atoms. *Phys. Rev. A* **55**, 615 (1997).
- [72] J. D. Lee. Low-energy valence photoemission in Ce compounds: Beyond the anderson impurity model. *Phys. Rev. B* **61**, 8062 (2000).
- [73] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. John Wiley New York 3rd edition (1998).

- [74] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, e F. Laloë. *Quantum mechanics* volume 1. John Wiley New York (1977).
- [75] V. S. Malinovsky, C. Meier, e D. J. Tannor. Optical paralysis in electronically congested systems: application to large-amplitude vibrational motion of ground state Na₂. *Chem. Phys.* **221**, 67 (1997).
- [76] R. Kosloff, A. D. Hammerich, e D. Tannor. Excitation without demolition: radiative excitation of ground-surface vibration by impulsive stimulated raman scattering with damage control. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2172 (1992).
- [77] J. G. Underwood, M. Spanner, M. Y. Ivanov, J. Mottershead, B. J. Sussman, e A. Stolow. Switched wave packets: a route to nonperturbative quantum control. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 223001 (2003).
- [78] C. Leichtle, W. P. Schleich, I. S. Averbukh, e M. Shapiro. Quantum state holography. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1418 (1998).
- [79] A. M. Weiner. Femtosecond pulse shaping using spatial light modulators. *Rev. Sci. Instrum.* **71**, 1929 (2000).
- [80] Y. Ohtsuki, G. Turinici, e H. Rabitz. Generalized monotonically convergent algorithms for solving quantum optimal control problems. *J. Chem. Phys.* **120**, 5509 (2004).
- [81] X. Song, S. Gong, R. Li, e Z. Xu. Effect of time-dependent ionization on the propagation of a few-cycle laser pulse in a two-level medium. *Phys. Rev. A* **72**, 043820 (2005).
- [82] Q. Su e J. H. Eberly. Model atom for multiphoton physics. *Phys. Rev. A* **44**, 5997 (1991).
- [83] T. Seideman e M. Shapiro. Laser catalysis and transition state spectra of the H + H₂ exchange reaction. *J. Chem. Phys.* **88**, 5525 (1988).

- [84] R. G. Gordon. New method for construction wavefunctions for bound states and scattering. *J. Chem. Phys.* **51**, 14 (1969).
- [85] S. Bienstock e R. G. Gordon. Piecewise analytical integration of chemical rate equations. I. The algorithm. *J. Chem. Phys.* **77**, 2902 (1982).
- [86] S. Bienstock e R. G. Gordon. Piecewise analytical integration of chemical rate equations. ii. error analysis, implementation, and applications. *J. Chem. Phys.* **77**, 2912 (1982).
- [87] W. S. Zhu e H. Rabitz. A rapid monotonically convergent iteration algorithm for quantum optimal control over the expectation value of a positive definite operator. *J. Chem. Phys.* **109**, 385 (1998).
- [88] V. S. Malinovsky e D. J. Tannor. Simple and robust extension of the stimulated raman adiabatic passage technique to n-level systems. *Phys. Rev. A* **56**, 4929 (1997).
- [89] D. J. Tannor, R. Kosloff, e A. Bartanab. Laser cooling of internal degrees of freedom of molecules by dynamically trapped states. *Faraday Discuss.* **113**, 365 (1999).
- [90] S. A. Kauffman e W. G. Macready. Search strategies for applied molecular evolution. *J. Theor. Biol.* **173**, 427 (1995).
- [91] T. Brixner, B. Kiefer, e G. Gerber. Problem complexity in femtosecond quantum control. *Chem. Phys.* **267**, 241 (2001).
- [92] D. Cocolicchio e M. Viggiano. The diagonalization of cubic matrices. *J. Phys. A: Math. Gen.* **33**, 5669 (2000).
- [93] Y. B. Band e O. Magnes. Is adiabatic passage population transfer a solution to an optimal-control problem? *J. Chem. Phys.* **101**, 7528 (1994).

- [94] N. J. Wang e H. Rabitz. Optimal control of optical pulse propagation in a medium of three-level systems. *Phys. Rev. A* **52**, R17 (1995).
- [95] M. C. Stowe, F. C. Cruz, A. Marian, e J. Ye. High resolution atomic coherent control via spectral phase manipulation of an optical frequency comb. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 153001 (2006).
- [96] T. A. Laine e S. Stenholm. Adiabatic processes in three-level systems. *Phys. Rev. A* **53**, 2501 (1996).
- [97] N. V. Vitanov e S. Stenholm. Non-adiabatic effects in population transfer in three-level systems. *Opt. Commun.* **127**, 215 (1996).
- [98] B. J. Dalton e P. L. Knight. Population trapping and ultranarrow raman lineshapes induced by phase-fluctuating fields. *Opt. Commun.* **42**, 411 (1982).
- [99] T. Halfmann, L. P. Yatsenko, M. Shapiro, B. W. Shore, e K. Bergmann. Population trapping and laser-induced continuum structure in helium: Experiment and theory. *Phys. Rev. A* **58**, R46 (1998).
- [100] K.-J. Boller, A. Imamolu, e S. E. Harris. Observation of electromagnetically induced transparency. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2593 (1991).
- [101] S. E. Harris. Electromagnetically induced transparency. *Phys. Today* **50**, 36 (1997).
- [102] J. Oreg, F. T. Hioe, e J. H. Eberly. Adiabatic following in multilevel systems. *Phys. Rev. A* **29**, 690 (1984).
- [103] C. E. Carroll e F. T. Hioe. Three-state model driven by two laser beams. *Phys. Rev. A* **36**, 724 (1987).
- [104] C. E. Carroll e F. T. Hioe. Analytic solutions for three-state systems with overlapping pulses. *Phys. Rev. A* **42**, 1522 (1990).

- [105] C. E. Carroll e F. T. Hioe. Two-photon resonance in three-state model driven by two laser beams. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2633 (1989).
- [106] J. R. Kuklinski, U. Gaubatz, F. T. Hioe, e K. Bergmann. Adiabatic population transfer in a three-level system driven by delayed laser pulses. *Phys. Rev. A* **40**, 6741 (1989).
- [107] B. W. Shore, K. Bergmann, J. Oreg, e S. Rosenwaks. Multilevel adiabatic population transfer. *Phys. Rev. A* **44**, 7442 (1991).
- [108] A. Kuhn, G. W. Coulston, G. Z. He, S. Schiemann, K. Bergmann, e W. S. Warren. Population transfer by stimulated raman scattering with delayed pulses using spectrally broad light. *J. Chem. Phys.* **96**, 4215 (1992).
- [109] B. W. Shore, K. Bergmann, A. Kuhn, S. Schiemann, J. Oreg, e J. H. Eberly. Laser-induced population transfer in multistate systems: A comparative study. *Phys. Rev. A* **45**, 5297 (1992).
- [110] J. Oreg, K. Bergmann, B. W. Shore, e S. Rosenwaks. Population transfer with delayed pulses in four-state systems. *Phys. Rev. A* **45**, 4888 (1992).
- [111] U. Gaubatz, P. Rudecki, S. Schiemann, e K. Bergmann. Population transfer between molecular vibrational levels by stimulated raman-scattering with partially overlapping laserfields. a new concept and experimental results. *J. Chem. Phys.* **92**, 5363 (1990).
- [112] P. Pillet, C. Valentin, R.-L. Yuan, e J. Yu. Adiabatic population transfer in a multilevel system. *Phys. Rev. A* **48**, 845 (1993).
- [113] S. Schiemann, A. Kuhn, S. Steuerwald, e K. Bergmann. Efficient coherent population transfer in NO molecules using pulsed lasers. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3637 (1993).

- [114] K. Bergmann, H. Theuer, e B. W. Shore. Coherent population transfer among quantum states of atoms and molecules. *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1003 (1998).
- [115] T. Halfmann e K. Bergmann. Coherent population transfer and dark resonances in SO₂. *J. Chem. Phys.* **104**, 7068 (1996).
- [116] M. Galassi, J. Davies, J. Theiler, B. Gough, G. Jungman, M. Booth, e F. Rossi. *GNU Scientific Library: reference manual*. Free Software Foundation 1.8 edition (2006).
- [117] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, e B. P. Flannery. *Numerical recipes in C: the art of scientific computing*. Cambridge University Press 2nd edition (1992).
- [118] M. A. Reed. Quantum dots. *Sci. Am.* **268**, 98 (1993).
- [119] U. Hohenester e G. Stadler. Quantum control of electron-phonon scatterings in artificial atoms. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 196801 (2004).
- [120] M. A. M. de Aguiar. Eigenvalues and eigenfunctions of billiards in a constant magnetic field. *Phys. Rev. E* **53**, 4555 (1996).
- [121] H. Katsuki, H. Chiba, B. Girard, C. Meier, e K. Ohmori. Visualizing picometric quantum ripples of ultrafast wave-packet interference. *Science* **311**, 1589 (2006).
- [122] R. W. Robinett. Quantum wave packet revivals. *Phys. Rep.* **392**, 1 (2004).
- [123] M. Fushitani, M. Bargheer, M. Guhr, e N. Schwentner. Pump-probe spectroscopy with phase-locked pulses in the condensed phase: decoherence and control of vibrational wavepackets. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 3143 (2005).
- [124] F. F. Guimarães, F. Gel'mukhanov, A. Cesar, e H. Agren. Quantum wave packet revivals in ir + x-ray pump-probe spectroscopy. *Chem. Phys. Lett.* **405**, 398 (2005).

- [125] C. Day. Semiconductor quantum dots take first steps toward spin-based quantum computation. *Phys. Today* **59**, 16 (2006).
- [126] A. Barenco, D. Deutsch, A. Ekert, e R. Jozsa. Conditional quantum dynamics and logic gates. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4083 (1995).
- [127] M. Spanner, E. A. Shapiro, e M. Ivanov. Coherent control of rotational wave-packet dynamics via fractional revivals. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 093001 (2004).
- [128] R. W. Robinett e S. Heppelmann. Quantum wave-packet revivals in circular billiards. *Phys. Rev. A* **65**, 062103 (2002).
- [129] F. Geerinckx, F. M. Peeters, e J. T. Devreese. Effect of the confining potential on the magneto-optical spectrum of a quantum dot. *J. Appl. Phys.* **68**, 3435 (1990).
- [130] H. Bruus e A. D. Stone. Quantum chaos in a deformable billiard: applications to quantum dots. *Phys. Rev. B* **50**, 18275 (1994).
- [131] G. J. Delben, A. Gusso, e M. G. E. da Luz. Improving wave-packet revivals in circular billiards by applying constant magnetic fields. *Phys. Rev. A* **73**, 055601 (2006).
- [132] E. Butkov. *Física Matemática*. LTC (1988).
- [133] I. S. Gradshteyn e I. M. Ryzhik. *Table of integrals, series, and products*. Academic press New York (1994).
- [134] M. Abramowitz e I. A. Stegun. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. Dover publications New York (1964).
- [135] G. A. Vugalter, A. K. Das, e V. A. Sorokin. Revivals in an infinite square well in the presence of a δ well. *Phys. Rev. A* **66**, 012104 (2002).

- [136] D. L. Aronstein e C. R. Stroud. Analytical investigation of revival phenomena in the finite square-well potential. *Phys. Rev. A* **62**, 022102 (2000).
- [137] David L. Aronstein e C. R. Stroud. Fractional wave-function revivals in the infinite square well. *Phys. Rev. A* **55**, 4526 (1997).
- [138] R. Bluhm, V. A. Kostelecký, e B. Tudosé. Wave-packet revivals for quantum systems with nondegenerate energies. *Phys. Lett. A* **222**, 220 (1996).
- [139] J. J. Sakurai e San Fu Tuan. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wiley revidited edition (1994).
- [140] S. Tomsovic e J. H. Lefebvre. Can wave packet revivals occur in chaotic quantum systems? *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3629 (1997).
- [141] M. Robnik e M. V. Berry. Classical billiards in magnetic fields. *J. Phys. A: Math. Gen.* **18**, 1361 (1985).
- [142] L. G. G. V. D. da Silva e M. A. M. de Aguiar. Periodic orbits in magnetic billiards. *Eur. Phys. J. B* **16**, 719 (2000).
- [143] F. Shimizu. Specular reflection of very slow metastable neon atoms from a solid surface. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 987 (2001).
- [144] T. Fülöp, T. Cheon, e I. Tsutsui. Classical aspects of quantum walls in one dimension. *Phys. Rev. A* **66**, 052102 (2002).
- [145] P. Exner. Contact interactions on graph superlattices. *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 87 (1996).
- [146] P. Exner e P. Seba. Point interactions in two and three dimensions as models of small scatterers. *Phys. Lett. A* **222**, 1 (1996).
- [147] J. F. Brasche, P. Exner, Y. A. Kuperin, e P. Seba. Schrödinger operators with singular interactions. *J. Math. Anal. Appl.* **184**, 112 (1994).

- [148] F. M. Zanetti, J. Kuhn, G. J. Delben, B. K. Cheng, e M. G. E. da Luz. Classifying the general family of 1d point interactions: a scattering approach. *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 2493 (2006).
- [149] R. J. Hughes. Finite-rank perturbations of the dirac operator. *J. Math. Anal. Appl.* **238**, 67 (1999).
- [150] G. F. Dell'Antonio, R. Figari, e A. Teta. A limit evolution problem for time-dependent point interactions. *J. Funct. Anal.* **142**, 249 (1996).
- [151] N. I. Akhiezer e I. M. Glazman. *The theory of linear operators in Hilbert space*. Dover (1993).
- [152] G. Bonneau, J. Faraut, e G. Valent. Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics. *Am. J. Phys.* **69**, 322 (2001).
- [153] T. E. Clark, R. Menikoff, e D. H. Sharp. Quantum mechanics on the half-line using path integrals. *Phys. Rev. D* **22**, 3012 (1980).
- [154] M. G. E. da Luz e B. K. Cheng. Exact propagators for moving hard-wall potentials. *J. Phys. A: Math. Gen.* **25**, L1043 (1992).
- [155] B. Gaveau e L. S. Schulman. Reactive scattering with exact propagators. *Phys. Lett. A* **182**, 207 (1993).
- [156] P. Exner. Lattice kronig-penney models. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3503 (1995).
- [157] M. Carreau, E. Farhi, e S. Gutmann. Functional integral for a free particle in a box. *Phys. Rev. D* **42**, 1194 (1990).
- [158] C. Pisani e B. H. J. McKellar. Semiclassical propagators and wigner-kirkwood expansions for hard-core potential. *Phys. Rev. A* **44**, 1061 (1991).
- [159] A. G. M. Schmidt, B. K. Cheng, e M. G. E. da Luz. Green functions for generalized point interactions in one dimension: A scattering approach. *Phys. Rev. A* **66**, 062712 (2002).

- [160] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, e H. Holden. *Solvable models in quantum mechanics*. Springer Berlin (1988).
- [161] S. Albeverio, Z. Brzezniak, e L. Dabrowski. Time-dependent propagator with point interaction. *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 4933 (1994).
- [162] S. M. Blinder. Green's function and propagator for the one-dimensional δ -function potencial. *Phys. Rev. A* **37**, 973 (1988).
- [163] D. K. Park. Proper incorporation of the self-adjoint extension method to the green function formalism: one-dimensional δ' -function potential case. *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 6407 (1996).
- [164] C. Grosche. Boundary conditions in path integrals from point interactions for the path integral of the one-dimensional Dirac particle. *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 1675 (1999).
- [165] N. Y. Demkov e V. N. Ostrovsky. *Zero-range potentials and their applications in atomic physics*. Plenum New York (1988).
- [166] C. Weisbuch e B. Vinter. *Quantum semiconductor structures*. Academic New York (1991).
- [167] L. N. Pandey, T. F. George, e M. L. Rustgi. Intersubband transitions in an asymmetric quantum well with a thin barrier or a delta-function potential. *J. Appl. Phys.* **68**, 1933 (1990).
- [168] C. J. Bolton-Heaton, C. J. Lambert, V. I. Fal'ko, V. Prigodin, e A. J. Epstein. Distribution of time constants for tunneling through a one-dimensional disordered chain. *Phys. Rev. B* **60**, 10569 (1999).
- [169] A. G. M. Schmidt e M. G. E. da Luz. Wave-packet dynamics for general contact interactions on a circular setup: Revivals, bouncing, and trapping. *Phys. Rev. A* **69**, 052708 (2004).

- [170] H. Danared. An exactly solvable schrodinger equation modelling quasi-resonant ion-atom collisions. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **17**, 2619 (1984).
- [171] G. Scheitler e M. Kleber. Propagator for two dispersing δ -function potentials. *Phys. Rev. A* **42**, 55 (1990).
- [172] V. V. Dodonov e M. A. Andreatta. Deflection of quantum particles by impenetrable boundary. *Phys. Lett. A* **275**, 173 (2000).
- [173] S. Albeverio, S. M. Fei, e P. Kurasov. Many body problems with spin-related contact interactions. *Rep. Math. Phys.* **47**, 157 (2001).
- [174] T. Cheon, T. Fülöp, e I. Tsutsui. Symmetry, duality, and anholonomy of point interactions in one dimension. *Ann. Phys.* **294**, 1 (2001).
- [175] Colin Trueman e K. K. Wana. Single point interactions, quantization by parts, and boundary conditions. *J. Math. Phys.* **41**, 195 (2000).
- [176] W. Elberfeld e M. Kleber. Time-dependent tunneling through thin barriers: a simple analytical solution. *Am. J. Phys.* **56**, 154 (1988).
- [177] M. A. Andreatta e V. V. Dodonov. Tunnelling of narrow gaussian packets through delta potentials. *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, 2423 (2004).
- [178] B. K. Cheng e M. G. E. da Luz. Propagator for the δ -function potential moving with constant velocity. *Phys. Rev. A* **47**, 4720 (1993).
- [179] R. J. Hughes. Unitary propagators for time-dependent hamiltonians with singular potentials. *J. Math. Anal. Appl.* **193**, 447 (1995).
- [180] A. V. Dodonov, E. V. Dodonov, e V. V. Dodonov. Photon generation from vacuum in nondegenerate cavities with regular and random periodic displacements of boundaries. *Phys. Lett. A* **317**, 378 (2003).

- [181] G. Abala, A. Romanelli, A. C. S. Schifino, R. Siria, e R. Donangeloc. Accumulation of resonances in the Fermi accelerator: a quantum route to chaos? *Physica A* **272**, 87 (1999).
- [182] F. Saif, I. Bialynicki-Birula, M. Fortunato, e W. P. Schleich. Fermi accelerator in atom optics. *Phys. Rev. A* **58**, 4779 (1998).
- [183] I. Tsutsuia, T. Fülöp, e T. Cheon. Möbius structure of the spectral space of schrodinger operators with point interaction. *J. Math. Phys.* **42**, 5687 (2001).
- [184] T. Cheon e P. Exner. An approximation to δ' couplings on graphs. *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, L329 (2004).
- [185] T. Cheon, I. Tsutsui, e T. Fülöp. Quantum abacus. *Phys. Lett. A* **330**, 338 (2004).
- [186] L. S. Schulman. *Techniques and Applications of Path Integration*. John Wiley (1981).
- [187] M. G. E. da Luz, E. J. Heller, e Bin Kang Cheng. Exact form of green functions for segmented potentials. *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 2975 (1998).