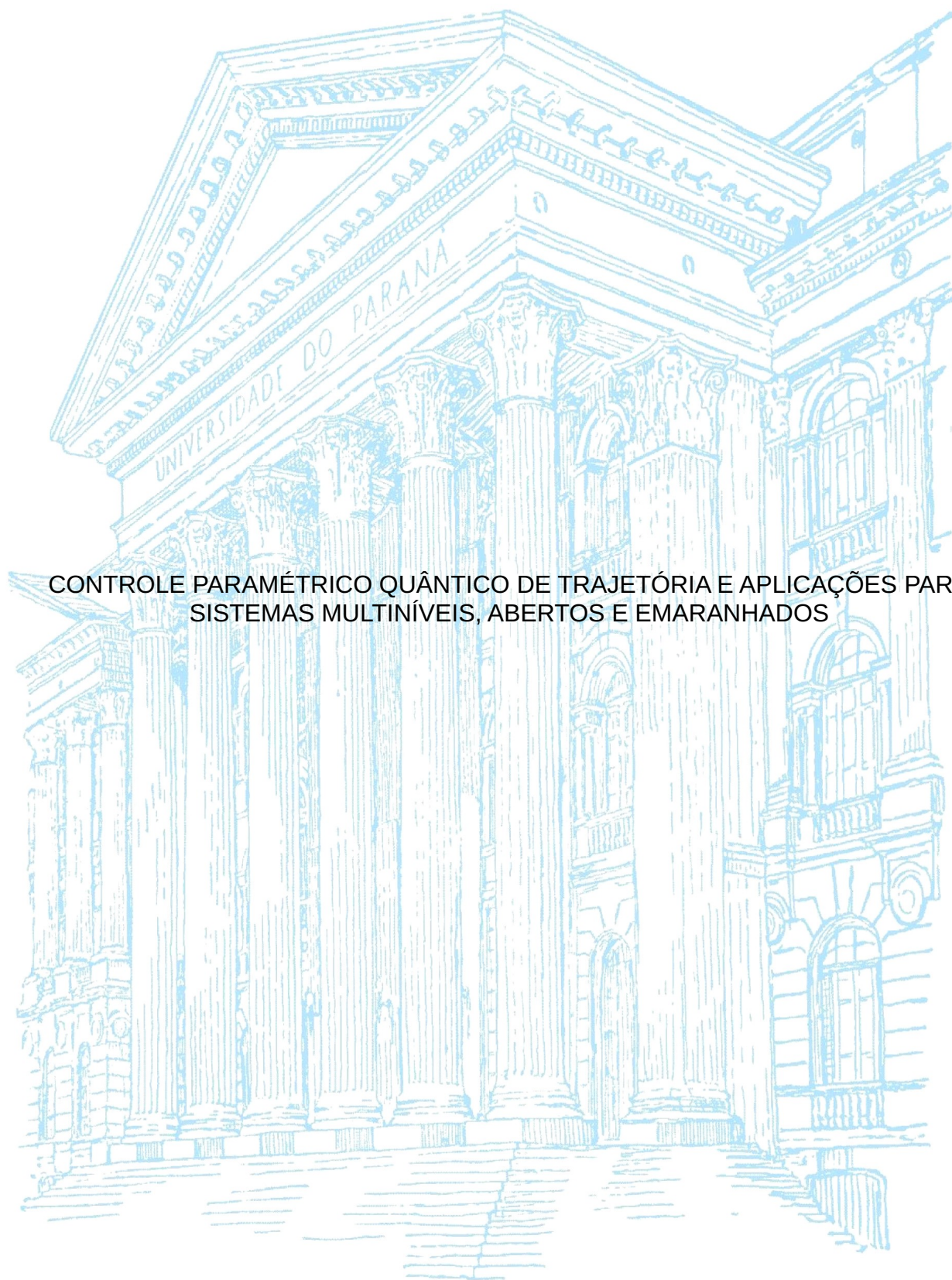


UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

ARON LUIZ OLIVEIRA DOS SANTOS



CONTROLE PARAMÉTRICO QUÂNTICO DE TRAJETÓRIA E APLICAÇÕES PARA SISTEMAS MULTÍNÍVEIS, ABERTOS E EMARANHADOS

Curitiba  
2022

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

ARON LUIZ OLIVEIRA DOS SANTOS

CONTROLE PARAMÉTRICO QUÂNTICO DE TRAJETÓRIA E APLICAÇÕES PARA  
SISTEMAS MULTINÍVEIS, ABERTOS E EMARANHADOS

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

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz.

Curitiba  
2022

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP)  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SISTEMA DE BIBLIOTECAS – BIBLIOTECA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Santos, Aron Luiz Oliveira dos.

Controle paramétrico quântico de trajetória e aplicações para sistemas multiníveis, abertos e emaranhados. / Aron Luiz Oliveira dos Santos. – Curitiba, 2022.

1 recurso on-line : PDF.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz.

1. Física. 2. Sistema quântico. 3. Campos magnéticos. 4. Lasers em física. I. Luz, Marcos Gomes Eleutério da. II. Universidade Federal do Paraná. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

Bibliotecário: Nilson Carlos Vieira Júnior CRB-9/1797

## TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **ARON LUIZ OLIVEIRA DOS SANTOS** intitulada: "**Controle Paramétrico Quântico de Trajetória e Aplicações para Sistemas Multiníveis, Abertos e Emaranhados**", sob orientação do Prof. Dr. MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de doutor está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 30 de Maio de 2022.

Assinatura Eletrônica

31/05/2022 09:47:42.0

MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ  
Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

31/05/2022 08:49:17.0

LUIZ GUILHERME DE CARVALHO REGO  
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA)

Assinatura Eletrônica

30/05/2022 21:02:25.0

MARCIO HENRIQUE FRANCO BETTEGA  
Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

30/05/2022 21:05:41.0

PAULO HENRIQUE SOUTO RIBEIRO  
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA)

## AGRADECIMENTOS

Aos meus pais Luiz e Ceci e minhas irmãs Piera e Marihá pelo apoio e motivação.

A minha parceira Beatriz por me fazer feliz desde o dia que nos conhecemos.

A todos os meus amigos e amigas desde o ensino médio, passando pela graduação até a pós-graduação. Seria injusto mencionar nomes aqui, pois todos vocês foram, e são, especiais em diferentes momentos da minha trajetória.

Aos integrantes do UFPR OPTICA Student Chapter pela amizade e pela oportunidade de fazer parte desse grande projeto.

A todos os integrantes do corpo docente e administrativo do curso de licenciatura em Física do IFPR.

Aos professores Dr. Jiusandro Kühn e Dra. Jane Rosa por contribuírem na minha formação como professor de Física.

Ao meu orientador Dr. Marcos G. E. da Luz na construção desta tese e pelos conselhos e discussões que tivemos ao longo dos seis anos de pós-graduação sob sua supervisão.

Ao amigo e colaborador Dr. Guilherme J. Delben por contribuir imensamente para o meu desenvolvimento pessoal, profissional e acadêmico.

Ao Programa de Pós-Graduação em Física pelo suporte financeiro, o acesso a infraestrutura computacional e ao corpo docente pelos excelentes cursos.

Ao secretário Leandro Camilo por auxiliar nas demandas recorrentes do universo acadêmico.

A Hevelin e seu companheiro Cássio, amigo de longa data, pela verificação ortográfica e concordância verbal da tese.

A todos que de alguma forma, direta ou indiretamente, me ajudaram a superar os desafios que tive de enfrentar em minha vida.

## RESUMO

Nesta tese apresentamos o Controle Paramétrico Quântico de Trajetória aplicado a diferentes sistemas quânticos de múltiplos níveis de energia. A ideia é fazer um sistema quântico seguir um certo comportamento determinado pela escolha apropriada do potencial externo. Nosso método consiste na discretização temporal tanto da trajetória alvo – descrita pelo valor esperado do observável – quanto do próprio potencial externo – a fonte de luz laser. Nesse sentido, as equações a serem resolvidas são independentes do tempo por “pedaços”. O primeiro sistema analisado é o típico problema de dois *qubits* acoplados e interagindo com o ambiente via equação de Lindblad. Aqui o ambiente corresponde a processos estocásticos que interferem diretamente na dinâmica do sistema, como por exemplo, causando transições entre os autoestados de energia (*amplitude damping* AD) ou a destruição das coerências (*phase damping* PD). Além desses dois tipos de ruídos, investigamos outra possibilidade, no qual o ambiente AD é adicionado ao ambiente PD (APD). Controlamos a população do estado excitado de um dos *qubits* e também o emaranhamento do sistema. Implementamos o controle paramétrico direto ao oscilador harmônico quântico e também à molécula de OH, com um número considerável de níveis quânticos. Dentro de tais sistemas, desenvolvemos duas formas de se analisar e restringir o amplo espaço de soluções: uma envolve o controle de restrição das populações do sistema (escrita na base de energia) e das probabilidades na base do próprio observável. Já a outra, é o controle de mínima dispersão, onde determinamos que a dispersão no valor esperado de qualquer observável será mínima se seu valor estiver entre dois autovalores consecutivos desse observável. Na prática, isso é satisfeito quando o valor esperado é escrito considerando apenas as duas probabilidades associadas a tais níveis consecutivos. Por fim, apresentamos o método paramétrico misto, que resulta da associação entre um problema de  $N$  níveis com um controle de dois níveis efetivos. Em trabalhos anteriores, o mapeamento entre os diferentes subespaços de  $N \rightarrow 2$  níveis era feito inteiramente numérico. Nossa principal contribuição ao método é justamente a obtenção de um conjunto de equações analíticas que fornecem um espaço de soluções completamente definido, de modo que tais soluções podem ser utilizadas para a determinação dos parâmetros do campo externo que conduzam a dinâmica de algum observável de interesse. Como exemplo, aplicamos tal técnica no controle da distância intermolecular do ácido HF. Além de manipular tais oscilações, geramos um pacote de ondas com os estados vibracionais desse sistema, onde analisamos dados tridimensionais do espalhamento e possíveis reconstruções a partir da densidade de probabilidade do pacote de ondas à medida que se desloca no potencial Morse.

**Palavras-chaves:** Controle quântico. Dois *qubits*. Sistemas quânticos abertos. Múltiplas soluções. Restrições no espaço de soluções. Controle de oscilações moleculares.

## ABSTRACT

In this thesis we present Quantum Parametric Tracking Control applied to different quantum systems of multiple energy levels. The idea is to make a quantum system follow a certain behavior determined by the appropriate choice of the external potential. Our method consists in the time discretization of both the target trajectory – described by the expected value of the observable – and the external potential – the laser light source itself. In this sense, the equations to be solved are time-independent by “parts”. The first system analyzed is the typical problem of two *qubits* coupled and interacting with the environment via Lindblad’s equation. Here the environment corresponds to stochastic processes that directly interfere with the dynamics of the system, such as causing transitions between energy eigenstates (*amplitude damping* AD) or the destruction of coherences (*phase damping* PD). In addition to these two types of noise, we investigate another possibility, in which the AD environment is added to the PD environment (APD). We control the population of the excited state of one of the *qubits* and also the entanglement of the system. We implement direct parametric control to the quantum harmonic oscillator and also to the OH molecule, with a considerable number of quantum levels. Within such systems, we develop two ways of analyzing and constraining the large solution space: one involves constraint control of the populations of the system (written in the energy basis) and of the probabilities in the basis of the observable itself. The other, on the other hand, is the least dispersion control, where we determine that the dispersion in the expected value of any observable will be minimal if its value lies between two consecutive eigenvalues of that observable. In practice, this is satisfied when the expected value is written considering only the two probabilities associated with such consecutive levels. Finally, we present the mixed parametric method, which results from the association between an  $N$ -level problem with a two-level effective control. In previous work, the mapping between the different  $N \rightarrow 2$ -level subspaces was done entirely numerically. Our main contribution to the method is precisely to obtain a set of analytic equations that provide a completely defined solution space, so that such solutions can be used for the determination of the external field parameters that drive the dynamics of some observable of interest. As an example, we apply such a technique to the control of the intermolecular distance of HF acid. In addition to manipulating such oscillations, we generate a wave packet with the vibrational states of this system, where we analyze three-dimensional scattering data and possible reconstructions from the probability density of the wave packet as it moves in the Morse potential.

**Keywords:** Quantum control. Two *qubits*. Open quantum systems. Multiple solutions. Constraints on solution space. Control of molecular oscillations.

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>10</b>
1.1	O Controle Quântico	10
1.2	O Controle Ótimo	11
1.3	O Controle da Trajetória	12
1.4	Controle Paramétrico Direto	13
1.5	Controle Paramétrico Indireto	14
1.6	Controle de Sistemas Abertos e Emaranhados	15
1.7	Sistemas Multiníveis e Controle Coerente	18
1.8	Objetivos e Estrutura da Tese	18
<b>2</b>	<b>Controle de Dois Qubits em Estado X</b>	<b>20</b>
2.1	Descrição do Método de Controle Quântico	20
2.2	Definição do Sistema	23
2.3	Dinâmica de Sistemas Abertos - A Equação Mestra	24
2.3.1	Informação Quântica	25
2.3.2	Estados Puros e Estados de Mistura	26
2.3.3	Amortecimento de Amplitude ( <i>Amplitude Damping</i> ) (AD)	28
2.3.4	Amortecimento de Fase ( <i>Phase Damping</i> ) (PD)	28
2.3.5	Amortecimento de Amplitude e Fase (APD)	29
2.4	Quantificadores de Coerência e Correlações Quânticas	29
2.4.1	Coerência	29
2.4.2	Concorrência	30
2.4.3	Rastreando o Emaranhamento	30
2.4.4	Negatividade	31
2.4.5	Fidelidade e Distinguibilidade ( <i>Fidelity and Trace Distance</i> )	32
2.4.6	Valor Esperado da Energia	32
2.5	Resultados	33
2.5.1	Evolução Temporal Livre	33
2.5.2	Evolução Temporal com $\Omega_R$ Constante	36
2.5.3	Controle de População do Estado Excitado de $Q_1$	40
2.5.4	Controle de Emaranhamento – Concorrência $E_C$	42
2.5.5	Análise da Distinguibilidade Durante o Controle	47
2.6	Discussão e Considerações Finais	50
<b>3</b>	<b>Controle Paramétrico Direto e Mínima Dispersão</b>	<b>54</b>
3.1	Fundamentos da Técnica	54



3.2	Implementando o controle para um único intervalo de tempo . . . . .	55
3.2.1	Seleção de características específicas para as soluções de controle . . . . .	58
3.2.2	Especificando a população de $H_0$ no controle de trajetória . . . . .	60
3.2.3	Minimizando a dispersão de $\langle \mathcal{O} \rangle(t)$ . . . . .	61
3.3	Resultados e Discussões . . . . .	65
3.3.1	Controle sem restrição de $\langle x \rangle(t)$ pra dez e vinte níveis do OHQ . . . . .	65
3.3.2	Controlando a Molécula de OH . . . . .	71
3.3.3	Controle Restrito de População . . . . .	73
3.3.4	Controle Restrito da Probabilidade na Base do Observável . . . . .	75
3.3.5	Controle de Mínima Dispersão . . . . .	77
3.3.6	Síntese do Capítulo . . . . .	79
<b>4</b>	<b>Controle Paramétrico Misto . . . . .</b>	<b>81</b>
4.1	Modificações Propostas . . . . .	81
4.2	Ortonormalização de Gram-Schmidt . . . . .	81
4.2.1	Gram-Schmidt Clássico e Modificado . . . . .	82
4.3	Aspectos Teóricos do Método Misto . . . . .	84
4.3.1	Selecionando o Estado Alvo . . . . .	84
4.3.2	Trajectoria $S(t)$ Para Qualquer Autovalor $\{o_n\}$ . . . . .	85
4.3.3	Trajectoria $S(t)$ no Intervalo $o_{n-1} \leq \tilde{S} \leq o_n$ . . . . .	87
4.4	O Hiperplano de Dois Níveis Efetivos . . . . .	89
4.5	Controlando Dois Níveis Efetivos . . . . .	92
4.5.1	Solução dos Parâmetros no Subespaço 2-D Efetivo . . . . .	94
4.6	As Condições para o Controle Total de um Sistema de $N$ Níveis . . . . .	97
4.7	Implementação do Método Misto . . . . .	99
4.8	Resultados e Discussões . . . . .	101
4.9	Oscilações Moleculares Livres . . . . .	106
4.10	Controle de Oscilações Moleculares . . . . .	107
4.11	Dinâmica de um Pacote de Ondas . . . . .	109
4.12	Discussões do Capítulo . . . . .	115
<b>5</b>	<b>Conclusão . . . . .</b>	<b>116</b>
	<b>Referências . . . . .</b>	<b>119</b>
	<b>APÊNDICE A Operadores, Matrizes e Tensores . . . . .</b>	<b>133</b>
A.1	Matrizes de Pauli e Propriedades . . . . .	133
A.2	Matriz Densidade de População . . . . .	134
A.3	Parametrização do Campo de Controle . . . . .	137
A.3.1	Campo Polarizado em $\sigma_x$ . . . . .	137

A.3.2	Campo Polarizado em $\sigma_y$ . . . . .	137
A.3.3	Campo Polarizado em $\sigma_z$ . . . . .	138
A.4	Operadores de Kraus e Aproximação de Markov e Equação de Lindblad . . . . .	139
A.4.1	Emissão Espontânea - Amplitude damping . . . . .	139
A.4.2	Dedução do Teorema de Lindblad . . . . .	140
<b>APÊNDICE B Soluções Conhecidas de Potenciais . . . . .</b>		<b>143</b>
B.1	Potencial Morse de uma Molécula Diatômica . . . . .	143
B.2	O Oscilador Harmônico Quântico . . . . .	144
B.2.1	O Valor Esperado da Posição . . . . .	144
B.2.2	Elementos de Matriz do Operador Momento de Dipolo . . . . .	145
B.3	Potencial de Controle na Forma Dipolar . . . . .	146
<b>APÊNDICE C Detalhamento Teórico do Método Misto . . . . .</b>		<b>147</b>
C.1	Diagonalização de Matrizes $2 \times 2$ . . . . .	147
C.1.1	Autovalores de $H^{(2)}$ . . . . .	147
C.1.2	Autovetores de $H^{(2)}$ . . . . .	148
C.2	Equações no Subespaço 2-D Efetivo . . . . .	151

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 O CONTROLE QUÂNTICO

O controle quântico, enquanto área de pesquisa devidamente estabelecida, é consideravelmente recente. De fato, por volta dos anos 70, não havia uma fundamentação teórica que estruturasse a “manipulação” de sistemas quânticos, sendo algo que evoluiu rapidamente até o estado da arte observado nos dias atuais. Por manipular um sistema quântico temos em mente uma ‘engenharia’ de sistemas microscópicos [1]. Ou seja, a ideia é dirigir ou induzir um sistema quântico a apresentar uma dinâmica totalmente determinada no tempo, ou ao menos atingir um estado final desejado. Tal aspecto é de interesse para as aplicações mais diversas e ao longo da tese apontaremos alguns exemplos. Com tal objetivo, é necessário buscar por uma compreensão mais precisa da interação da radiação com a matéria e como esta interação contribui para a evolução do sistema em si. Este tipo de análise teórica constitui o campo de estudo de controle quântico [2].

A definição de controle quântico é muito ampla e acaba agregando diversos instrumentos de controle. Por exemplo, os instrumentos mais comuns são campos magnéticos [3], variações de tensão em um semicondutor [4], campos de laser [5] ou até mesmo combinando campos magnéticos e de laser ao mesmo tempo [6]. Logo, devemos ressaltar que o objeto de estudo desta tese considera exclusivamente o controle usando campos de laser, ou também conhecido como controle coerente [7]. De fato, fontes de luz coerente são muito úteis na geração de estados de superposição, e assumimos que os exemplos explorados nesta tese são sensíveis a esse tipo de interação.

No ano de 2020 completou 60 anos desde a criação da primeira fonte de luz laser, realizada por T. H. Maiman no ano de 1960 [8]. Com o advento do laser hoje podemos contar com complexas redes de comunicação óptica [9], terapias fundamentais na área da saúde [10], incontáveis aplicações tecnológicas industriais [11] e ferramentas essenciais para o avanço da ciência [12, 13]. Na publicação recente do editorial da revista *Nature Physics*, do ano de 2020, temos os exemplos mais específicos sobre a criação de novas áreas e aplicações na física, como a óptica não-linear, a metrologia de precisão, o imageamento por fluorescência e espectroscopia ultra rápida, que não existiriam caso o laser não fosse concebido [14]. Notadamente, controle quântico é uma dessas áreas que emergiram graças à tecnologia laser.

Um dos aspectos mais fundamentais do controle quântico coerente (ver a seguir), dado o cenário atual da óptica quântica, é a capacidade de configurar o campo externo aliada a uma sequência de pulsos de laser ultra rápidos [15]. Nesse contexto, é conveniente definir duas classes principais: lasers do tipo CW e do tipo pulsado. CW significa *Continue Wave*, isto é, fontes de laser cujo perfil temporal é uma onda que oscila continuamente no tempo. O laser pulsado corresponde ao perfil de variação entre um certo valor máximo e zero, cujos picos de intensidade são espaçados temporalmente. A largura de cada pulso pode assumir valores desde  $10^{-12}$  ou  $10^{-15}$  segundos até a ordem de  $10^{-18}$  segundos (exemplo ultrarrápido) [1, 16] em aplicações mais recentes. O uso da luz laser com campos ultrarrápidos viabiliza a geração de estados de superposição altamente coerentes, favorecendo a manipulação de sistemas que usualmente não são acessíveis com pulsos mais largos [15, 17, 18], embora ainda existam aplicações relevantes envolvendo diferentes escalas temporais. Desse modo, feixes de laser cada vez menores e técnicas experimentais sistematicamente mais precisas em laboratório, aliado a trabalhos teóricos introduzindo novos métodos de controle, promoveram a rápida popularização dessa área [19].

No que se refere ao procedimento de controle em si, essencialmente, diferentes métodos têm como base a aplicação de um potencial externo configurável no sistema quântico, geralmente ajustando a amplitude do campo elétrico e a fase do laser. O propósito desse acoplamento é conduzir a evolução temporal do valor esperado de algum observável de interesse [20], tal como  $\langle \mathcal{O} \rangle(t)$ . O observável é qualquer quantidade física do sistema mensurável em laboratório [21] como energia, posição, probabilidade, momento angular, entre outros operadores. Em geral, o objetivo central é conduzir o sistema a partir de um estado inicial no instante  $t_0$  para um estado final no instante  $t_f$  [22], ou descrevendo o mesmo comportamento de alguma função conhecida no tempo [23, 24, 25]. Nas próximas seções veremos alguns métodos e suas principais características. Desta forma o laser precisa ser ajustável para ter o perfil necessário para o controle. Nesta tese iremos supor que as fontes de laser sempre poderão nos fornecer as configurações necessárias.

## 1.2 O CONTROLE ÓTIMO

Dentre as mais variadas metodologias para designar campos de controle que implementam uma evolução quântica desejada, a técnica mais tradicional e amplamente difundida na literatura é a teoria do controle ótimo [26]. Em essência, os parâmetros do laser são determinados via extremização de um funcional  $\mathcal{J}$  ( $\delta\mathcal{J} = 0$ ), escrito na forma

$$\mathcal{J} = \langle \psi(t_f) | \mathcal{O} | \psi(t_f) \rangle - \lambda \left[ \int_{t_0}^{t_f} |\vec{\mathcal{E}}(t)|^2 dt - I \right] - 2 \operatorname{Im} \int_{t_0}^{t_f} \langle \chi(t) | \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \psi(t) \rangle dt, \quad (1.1)$$

sendo o primeiro termo o valor esperado do observável  $\langle \mathcal{O} \rangle(t_f)$ , o estado alvo  $|\psi(t_f)\rangle$  no instante final  $t_f$ ,  $\mathcal{E}(t)$  o campo elétrico do laser,  $I$  a fluência (ou intensidade máxima)

do campo,  $H(t) = H_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{E}}(t)$  o Hamiltoniano total (sistema + laser), com o operador momento de dipolo  $\vec{\mu}$  e campo elétrico  $\vec{\mathcal{E}}(t)$ , e os termos  $(\lambda, \langle \chi(t) |)$  multiplicadores de Lagrange [27]. Repare que a equação de Schrödinger está apenas rearranjada dentro do último termo.

Ao extremizar tal funcional em relação ao estado final, o campo e multiplicadores de Lagrange, somos capazes de determinar o campo ótimo que maximiza a probabilidade do sistema quântico de atingir o estado alvo descrito pelo valor esperado  $\langle \mathcal{O} \rangle(t_f)$ . Na prática, fazemos  $\{\delta_{(\psi_f)} \mathcal{J} = 0, \delta_{(\lambda, \chi)} \mathcal{J} = 0, \delta_{(\mathcal{E})} \mathcal{J} = 0\}$ . A partir da derivação parcial do funcional obtemos um conjunto de equações de controle, cuja resolução depende de sofisticados procedimentos numéricos.

Em geral, são utilizados os algoritmos de gradiente conjugado [28] e de Krotov [29] para acelerar a convergência das soluções para o campo. Embora o ferramental teórico seja relativamente elaborado, o controle ótimo tem sido amplamente utilizado desde a sua concepção [26, 30]. Alguns poucos exemplos são suficientes para ressaltar a importância desse método, como por exemplo, em computação quântica [31], dissociação molecular visando a reação  $HCN \rightarrow HC + N$  [32], dinâmica molecular do  $OH$  e  $HF$  na presença de campos sob influência de ruído branco [33], e também no controle de estados eletrônicos da molécula de ozônio a fim de promover a sua isomerização [34].

### 1.3 O CONTROLE DA TRAJETÓRIA

Em meados das décadas de 1980 e 1990 o controle de trajetória surgiu como uma nova alternativa de controle quântico [35, 36], pois ao contrário do controle ótimo em que somente o estado final é atingido, a dinâmica temporal descrita pelo valor esperado de algum observável é continuamente satisfeita no processo. A equação de movimento principal na representação de Heisenberg, é dada por

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathcal{O}, H_0] \rangle - \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathcal{O}, \vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{E}}(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t} \right\rangle. \quad (1.2)$$

A manipulação algébrica de tal relação, a fim de isolar o campo elétrico em função dos outros termos,  $\mathcal{E}(t)$ , resulta na Eq. (3) do estudo [37]

$$\mathcal{E}(t) = \frac{\frac{d\langle \mathcal{O} \rangle}{dt} + i\langle \psi(t) | [\mathcal{O}, H_0] | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t} | \psi(t) \rangle}{i\langle \psi(t) | [\mathcal{O}, \mu] | \psi(t) \rangle}, \quad (1.3)$$

sendo  $\vec{\mu} = e\vec{x}$  (carga elétrica  $e$ ) o operador momento de dipolo elétrico e  $H_0 = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(\vec{x})$  (onde  $\hbar = 1$ ) o Hamiltoniano do sistema não perturbado. A ideia chave é determinar inversamente o campo elétrico que controla a trajetória  $S(t) = \langle \mathcal{O} \rangle(t)$ , sendo  $S(t)$  uma função conhecida. No entanto, existem operadores que podem comutar no denominador da Eq. (1.3), gerando divergências nas soluções do campo  $\mathcal{E}(t)$ . H. Rabitz e W. Zhu propuseram

o cálculo da segunda derivada dessa mesma expressão, e impondo determinadas condições, foi determinada a Eq. (4) do trabalho [37]

$$\mathcal{E}(t) = \frac{\frac{d^2 S(t)}{dt^2} + \langle \psi(t) | \left( \left[ [\mathcal{O}, H_0] + 2i \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t}, H_0 \right] - \frac{\partial^2 \mathcal{O}}{\partial t^2} \right) | \psi(t) \rangle}{\langle \psi(t) | \left[ [\mathcal{O}, H_0] + i \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t}, \mu \right] | \psi(t) \rangle}, \quad (1.4)$$

assim removendo as singularidades ‘triviais’ da Eq. (1.3), contudo, eventualmente o denominador ainda pode ser nulo.

Estudos recentes empregando tal artifício forneceram novas fronteiras no campo da óptica com a técnica de mímica espectral [38], onde H Rabitz *et. al.* conseguiram tornar determinados sistemas quânticos espectralmente idênticos. Segundo os autores, a mímica espectral pode ser adaptada para problemas de óptica não linear na geração de harmônicos de alta ordem (*High Harmonic Generation*). Um procedimento análogo, porém aplicado a um sistema de muitos corpos, validou a robustez do controle de trajetória ao induzir a mudança no estado metálico condutor para o estado isolante de Mott fortemente correlacionado [39], cujo observável escolhido foi simplesmente a densidade de corrente eletrônica. No entanto, ainda não existem realizações experimentais de tal proposição teórica.

Nas próximas seções apresentaremos o método paramétrico inverso, originado a partir do controle de trajetória. Ao abordar o mesmo problema de maneira original, os autores removeram toda e qualquer singularidade por meio da discretização temporal, afinal, tanto o campo de controle quanto a trajetória alvo tornam-se independente do tempo em cada intervalo de controle. Ainda sim, apesar dessa simplificação, múltiplas soluções podem surgir devido a não-linearidade intrínseca de problemas inversos [2, 40]. A questão da multiplicidade associada ao mesmo objetivo de controle já foi explorada no próprio método paramétrico por partes [24, 41] bem como no controle de panorama (*landscape control*) [42, 43].

## 1.4 CONTROLE PARAMÉTRICO DIRETO

Com o controle paramétrico de evolução quântica, desenvolvido por Kuhn e Luz [2], introduziu na literatura um procedimento puramente analítico (a princípio para dois níveis) que combinava o (i) conceito de controle inverso com o (ii) controle de trajetória  $S(t)$  [35] e (iii) independência temporal do potencial externo (campo elétrico do laser). A princípio, tais propriedades já eram amplamente exploradas separadamente nessa área. Contudo, associá-los possibilitou o controle do valor esperado do observável em cada instante de tempo, até atingir um estado final de interesse [24]. A equação fundamental do método

para o estado final da janela temporal é dada por

$$|\psi_f\rangle = \sum_n \left( \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(in)} \exp[-i E_l \tau] \right) |o_n\rangle. \quad (1.5)$$

sendo  $c_m^{(in)}$  os coeficientes de expansão do estado inicial da janela, a matriz  $\Gamma_{ik}$  correspondente a base que conecta os autoestados do Hamiltoniano total  $H = H_0 - \mu\Omega(\exp[-i\phi] + \exp[+i\phi])$  ( $\Omega$  a amplitude e  $\phi$  a fase) e as bases  $\{|o_n\rangle\}$  do observável  $\mathcal{O}$ , as autoenergias  $H$  como  $E_l$ , a largura da janela de controle  $\tau$ . Para dois níveis, a expressão acima é totalmente analítica (tanto os autovalores de energia quanto a base de  $H$  são conhecidas), bem como a própria expressão do valor esperado  $S(\tau) = \langle \psi_f | \mathcal{O} | \psi_f \rangle$ . Não exibiremos todos os detalhes matemáticos aqui, mas em essência o problema resume-se em determinar algebricamente os parâmetros do campo de controle conhecendo-se  $S(\tau)$ .

Apesar de ser uma construção matemática muito simples, quando tenta-se estender o protocolo para um sistema de três níveis, simplesmente não é possível obter uma solução algébrica fechada. Por exemplo em [2] o controle com  $N = 3$  foi realizado numericamente, contudo, nenhum trabalho explorando sistemas de dimensão  $N > 2$  foi publicado. Assim, a primeira contribuição desta tese está no Capítulo 3 onde desenvolvemos o controle direto para sistemas de  $N$  níveis, e também ao trazermos uma nova abordagem no que se refere ao espaço de soluções.

## 1.5 CONTROLE PARAMÉTRICO INDIRETO

Com o intuito de encontrar uma alternativa teórica mais versátil ao Controle Direto para problemas multiníveis, Delben e Luz [40] propuseram um procedimento análogo e que ainda preservava a estrutura lógica do método. A contribuição notável dos autores envolve a utilização de um sistema de coordenadas esféricas na parametrização das probabilidades de ocupação de cada estado, como

$$p_1 = \cos(\theta_1^*), \quad (1.6)$$

$$p_2 = \cos(\theta_2^*) \sin(\theta_1^*), \quad (1.7)$$

$$\vdots \quad (1.8)$$

$$p_n = \cos(\theta_n^*) \sin(\theta_{n-1}^*) \dots \sin(\theta_1^*), \quad (1.9)$$

e relacionando com o valor esperado do observável  $\langle \mathcal{O} \rangle(\tau)$

$$S(\tau) = \langle \mathcal{O} \rangle(\tau) = \sum_{n=1}^N o_n p_n, \quad (1.10)$$

onde  $o_n$  é o autovalor desse observável.

Um procedimento denominado de diagonalização inversa [41] introduziu operações matriciais que resultam em um sistema de equações algébricas acopladas, na forma

$$H^{(E)} = M H M^\dagger, \quad (1.11)$$

onde  $H^{(E)}$  é um Hamiltoniano diagonal,  $H$  o Hamiltoniano total (sistema + campo paramétrico) e  $M$  uma matriz ortogonal. Justamente por causa desse artifício que o denominamos de *Método Indireto*. Então a resolução do sistema de equações mencionado nos parágrafos anteriores fornece os parâmetros do campo de controle (para mais detalhes ver [41]).

Embora tal abordagem tenha dado resultados promissores para sistemas de três, quatro e cinco níveis [41], os autores passaram a enfrentar algo que já foi observado nos trabalhos de Kuhn e Luz – que seria o de analisar as múltiplas soluções de controle. O espaço de soluções para a trajetória alvo introduzia dificuldades práticas à medida que  $N$  aumentava.

Buscando uma alternativa diferente, os autores criaram o *método paramétrico misto*, combinando duas perspectivas fundamentais: o controle direto com o método paramétrico indireto, assim justificando a escolha do nome ‘*misto*’. Em síntese, a informação dinâmica do problema original de dimensão  $N$  é mapeado em um Hamiltoniano de 2-níveis efetivos no espaço de Hilbert, visto que todo sistema de dois níveis sempre possui solução [24, 40, 41]. Ao determinar as variáveis desse Hamiltoniano efetivo, é realizada uma transformação inversa para o subespaço com a dimensão original  $N$  do sistema físico de interesse. Parte dessa operação era necessariamente numérica, e selecionar melhores soluções nessas condições era algo desafiador. Uma segunda contribuição desta tese é mostrar no Capítulo 4 como acessar diretamente tais soluções após um desenvolvimento analítico das equações constituintes do método.

## 1.6 CONTROLE DE SISTEMAS ABERTOS E EMARANHADOS

O emaranhamento é um dos fenômenos mais surpreendentes da teoria quântica [44], principalmente devido ao conceito inerente de não-localidade [45]. Podemos caracterizar tal correlação quântica através da não-separabilidade de um vetor de estado, isto é, a incapacidade em decompor na forma de produto os autoestados dos subsistemas associados (é possível fatorar o vetor  $|\psi\rangle = (1/\sqrt{2})(|00\rangle + |11\rangle)$  com uma ‘multiplicação’ distributiva dos ket’s  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ ?) [46]. Observe que em sistemas clássicos também existem correlações, no entanto, os eventos que ocorrem espacialmente separados interferem entre si localmente, ao contrário do que ocorre no mundo quântico [47]. A não-localidade da mecânica quântica se manifesta, por exemplo, na medição de algum componente de um estado emaranhado. Isso significa que após a medição a função de onda de todos os componentes colapsam, independentemente da sua localização espacial [45, 48].



Tanto no campo teórico quanto em realizações experimentais, têm-se observado com frequência a importância do emaranhamento na ciência da informação quântica [49], até mesmo como um recurso físico fundamental [50]. Em essência, informação quântica se refere a quantidade de informação armazenada no estado de um sistema quântico [46], e convém representar tal estado através de *qubits* (e não mais bits clássicos de 0 e 1). Além disso, demonstrou-se também ser indispensável para diversas tarefas em comunicação quântica, tais como teletransporte, correção quântica de erros, codificação superdensa, redes quânticas e afins [51, 52, 53, 54, 55, 56]. Tais aplicações vêm sendo aperfeiçoadas na proporção que aprofundamos nosso entendimento sobre os aspectos físicos mais fundamentais, como por exemplo, em sistemas interagentes sob influência do ambiente [57], ou seja, sistemas abertos [52].

Sistemas abertos representam uma extensão do conceito de sistemas *interagentes* ou *compostos*, mas envolvendo processos estocásticos [47, 58]. Um sistema que interage com o ambiente pode ser representado por uma matriz densidade  $\hat{\rho}$  que contém informações de todos os graus de liberdade, como por exemplo, o produto tensorial  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^S \otimes \hat{\rho}^E$  no espaço de Hilbert  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$  associado, onde  $S$  representa o sistema e  $E$  o ambiente. Analisamos a evolução temporal de  $\hat{\rho}$  como se fosse um ‘grande sistema’ fechado, cuja dinâmica é completamente conhecida para todo o tempo  $t$ . Quando falamos de sistema fechado estamos nos referindo àquele cuja dinâmica é descrita por uma evolução unitária, tal como  $\hat{\rho}_t = \hat{U} \rho \hat{U}^\dagger$ . O operador unitário  $\hat{U}$  é determinado pela equação de Schrödinger  $i\hbar \partial_t \hat{U} = \hat{H} \hat{U}$  ou, de forma equivalente, a evolução do estado é dada por  $i\hbar \partial_t \hat{\rho}_t = [\hat{H}, \hat{\rho}_t]$  no formalismo de von Neumann, com  $\hat{H}$  sendo o operador Hamiltoniano total. No entanto, geralmente estamos interessados em caracterizar apenas os graus de liberdade internos, tal como  $\hat{\rho}^S$ , em detrimento da atuação do ambiente  $\hat{\rho}^E$ . Nesse caso, precisamos decompor apropriadamente o estado  $\hat{\rho}$ , calculando o traço parcial sobre o ambiente, isto é,  $\hat{\rho}^S = \text{Tr}_E[\hat{\rho}]$  [47]. Escrevemos o Hamiltoniano completo como  $\hat{H} = \hat{H}_S \otimes I_E + I_S \otimes \hat{H}_E + g\hat{H}_{int}$ , em que  $I_{S,E}$  é o operador identidade do espaço vetorial correspondente,  $\hat{H}_{S,E}$  o Hamiltoniano do sistema livre  $S$  (e do ambiente  $E$ ), e  $\hat{H}_{int}$  o termo de interação entre os subespaços com intensidade de acoplamento  $g$  [58]. Aqui fica evidente que o sistema livre correlaciona-se com o ambiente de acordo com o grau de intensidade do parâmetro  $g$ . Se  $g = 0$ , o sistema evolui livremente de modo independente, caso contrário, quando  $g \neq 0$  o ambiente passa a perturbar o estado  $\hat{\rho}^S$  [47].

Ao manipularmos algebricamente a expressão  $\hat{\rho}_t^S = \text{Tr}_E[\hat{U} \rho \hat{U}^\dagger]$  em termos do conjunto de bases  $\{|S_i\rangle \otimes |E_j\rangle\}$  (para mais detalhes ver [58]) chegamos a definição dos operadores de Kraus [47]. Tais operadores, ou ‘mapas’, atuam sobre a matriz densidade  $\hat{\rho}^S$  mimetizando o processo de interferência do ambiente na dinâmica do sistema livre  $S$ . Portanto, em sistemas quânticos abertos a evolução passa a ser descrita por canais ou operações quânticas que assumem a forma  $\hat{\rho}_t^S \rightarrow \sum_k M_k \hat{\rho}^S M_k^\dagger$  [47]. Ou seja, o conjunto  $\{M_k\}$ , que satisfaz a relação  $\sum_k M_k^\dagger M_k = 1$ , representa a amplitude de probabilidade de

ocorrer uma transição nos estados quânticos do sistema. Vale mencionar que diferentes fenômenos quânticos são modelados por esses operadores, tais como decoerência [59] e emissão espontânea [60], por exemplo. Ressaltamos que as relações discutidas até aqui foram elaboradas na forma discreta, caso deseje consultar o formalismo contínuo, ver [61, 62].

É a partir desse ponto que relacionamos o controle quântico com sistemas abertos. Em boa parte das aplicações nessa área [63], controle quântico é melhor compreendido em sistemas fechados do que em sistemas abertos [57]. No entanto, somente em sistemas abertos podemos observar fenômenos que emergem em aplicações reais, ou mais precisamente em laboratório [22]. Para ilustrar esse contexto, efeitos dissipativos tornam-se relevantes em protocolos cujo interesse é a geração de emaranhamento [64], na fabricação de memórias quânticas [65] ou em metrologia quântica [66].

Antes de controlar qualquer sistema quântico aberto, primeiramente devemos compreender a natureza do acoplamento gerado pelo ambiente e como a coerência quântica pode ser perdida. De fato, as duas principais causas para a destruição do emaranhamento em situações reais são os processos de *amplitude damping*, associado a dissipação de energia, ou *phase damping*, que destrói os termos de coerência na matriz densidade [57, 67, 68, 69].

Novos métodos de controle vêm sendo elaborados a fim de suprimir a decoerência em sistemas quânticos abertos, sobretudo no que se refere a manter o sistema emaranhado [70, 71, 72, 73]. Sabemos que coerência e emaranhamento estão intimamente associadas ao fenômeno de superposição quântica, contudo, não há evidência de uma conexão quantitativa direta entre eles [74]. Por exemplo, um campo externo (de um laser) é capaz de criar coerência em um certo sistema, entretanto, o acréscimo na intensidade desse campo pode simplesmente destruir as correlações existentes [51]. Outro aspecto curioso é o fato de que apesar de ser possível suprimir a decoerência através de algum protocolo de controle, isso não implica necessariamente na preservação do emaranhamento [51].

Assim, um dos tópicos abordados nesta tese é justamente o controle de dois *qubits*. Embora tal sistema tenha sido extensivamente explorado na literatura, com uma vasta gama de publicações [75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83], entender todos os mecanismos de controle continua sendo um desafio, principalmente com a presença de algum tipo de ambiente [57]. Uma perspectiva diferente é analisar a energia do sistema, tanto na ausência quanto na presença de um potencial externo. Poucos estudos na literatura de informação quântica exploram o problema de quantificar a energia necessária para ‘extrair’ o emaranhamento de um sistema quântico [54, 84, 85]. Para auxiliar neste estudo, é conveniente utilizar diferentes quantificadores em informação quântica, tais como a medida de concorrência [86, 87], negatividade [88], coerência [89] e distinguibilidade de estados quânticos [90]. No Capítulo 2 desta tese falaremos com mais detalhes sobre as medidas citadas.

## 1.7 SISTEMAS MULTINÍVEIS E CONTROLE COERENTE

Grande parte dos problemas reais envolvendo aplicações em mecânica quântica dependem de sistemas multiníveis [91]. Não obstante, ainda existem trabalhos direcionados ao controle de dois níveis no intuito de entender os aspectos mais fundamentais da dinâmica [92, 93]. Dependendo da quantidade de níveis a ser controlado, ou o tipo de observável escolhido, pode haver a necessidade de se utilizar mais de um potencial de interação. Outra possibilidade é ajustar mais parâmetros do campo, tais como a largura do pulso, amplitude ou a fase do laser, por exemplo [94].

Na última década os protocolos de controle quântico evoluíram significativamente na capacidade de manipulação de sistemas multiníveis. Como exemplo, a fim de controlar um observável no qual um único laser não é suficiente para induzir a migração de carga da molécula de ácido propiólico [95], onde os autores desse trabalho aplicaram dois potenciais defasados temporalmente com  $\Delta t \approx 0,6$  (fs). Além do mais, podemos citar métodos que utilizaram até sete parâmetros ajustáveis para realizar determinadas operações quânticas [96]. Apenas para elencar exemplos na área experimental, observamos cada vez mais arranjos com múltiplos potenciais externos em sistemas moleculares [97, 98, 99]. Diferente da maioria das técnicas que mencionamos ao longo do texto, que geralmente dependem de algoritmos refinados de otimização, no método misto aqui explorado determinaremos inversamente os parâmetros do campo (amplitude e fase) ao resolver um sistema de equações algébricas não-lineares, sendo diretamente adaptável para qualquer problema de  $N$  níveis. Assim iremos considerar o problema de muitos níveis com esta abordagem no Capítulo 4.

## 1.8 OBJETIVOS E ESTRUTURA DA TESE

O objetivo central desta tese é aplicar a técnica de controle independente do tempo por partes em sistemas quânticos abertos e fechados com diferentes propósitos, sendo melhor detalhados nos próximos capítulos. Note que a essência do método é justamente simplificar a determinação inversa dos parâmetros do campo de controle via discretização temporal, e a princípio, a técnica pode ser aplicada a qualquer tipo de sistema quântico. Sistemas que estejam sob influência de algum potencial com dependência explícita ou implícita do tempo podem ser controlados assumindo que dentro de cada janela temporal (que deve ser pequena o suficiente) o estado quântico evolui como se fosse independente do tempo, o que simplifica a determinação do perfil do campo externo que manipula tal dinâmica.

Em síntese, os capítulos desta tese estão organizados do seguinte modo:

CAPÍTULO 2: Apresentaremos o controle de dois *qubits* acoplados e interagindo

com diferentes ambientes, ou seja, um sistema aberto. Também explicaremos brevemente o protocolo de controle empregado no sistema escolhido. Finalizaremos o capítulo com os principais resultados numéricos obtidos e discussões relacionadas.

**CAPÍTULO 3:** Apresentaremos o controle paramétrico direto, aplicando a técnica para diferentes sistemas fechados de  $N$  níveis. Também exibiremos alguns resultados em que restringimos a população de determinados níveis de energia. Em seguida, implementamos o procedimento de controle baseado na minimização da dispersão do observável controlado.

**CAPÍTULO 4:** Trataremos exclusivamente do método paramétrico misto, onde organizamos um apanhado histórico de todas as gerações de técnicas baseadas no controle de trajetória com independência temporal em sistemas fechados. Detalharemos teoricamente o método misto e delinearíamos os pontos fundamentais que precisam ser melhorados, finalizando com um exemplo de controle pontual com o intuito de investigar a influência do subespaço bidimensional sobre o espaço de soluções associado ao problema real.

**CAPÍTULO 5:** Dedicaremos a este capítulo as conclusões da tese, comentando todos os resultados obtidos nos capítulos anteriores.

O material suplementar é apresentado nos seguintes apêndices:

**APÊNDICE I:** Neste apêndice incluímos os principais operadores, matrizes e tensores, bem como definições convenientes utilizadas no Capítulo 4.

**APÊNDICE II:** Incluiremos duas soluções conhecidas para o oscilador harmônico quântico, potencial Morse, e outras deduções pertinentes, referentes ao Capítulo 5.

**APÊNDICE III:** Organizaremos a dedução da diagonalização de uma matriz bidimensional e outras transformações convenientes do método misto, empregadas no Capítulo 3.

## 2 CONTROLE DE DOIS QUBITS EM ESTADO X

---

*No presente capítulo apresentaremos os resultados teóricos do controle de dois qubits acoplados em estado X. Tal configuração da matriz densidade demonstrou-se útil na simplificação de expressões que descrevem o emaranhamento do sistema, pois no estado X apenas as duas diagonais principais são consideradas. Analisaremos o valor médio da energia em todas as simulações, com o intuito de encontrar uma relação com a controlabilidade e a manutenção do emaranhamento no sistema.*

---

### 2.1 DESCRIÇÃO DO MÉTODO DE CONTROLE QUÂNTICO

Em determinadas aplicações em controle quântico o objetivo é fazer com que o valor esperado de um observável relevante  $\mathcal{O}$  siga uma trajetória predeterminada  $S(t)$  (durante o intervalo de tempo  $0 \leq t \leq T$ ). Dessa forma, utilizando um potencial dependente do tempo  $H_C(t)$  com parâmetros sintonizáveis, tais como a amplitude e a fase de um campo de laser, conduzimos a evolução do sistema através da equação de Lindblad (veremos nas próximas seções), fornecendo um  $\rho(t)$  no qual,

$$\langle \mathcal{O} \rangle(t) = \text{Tr} \left[ \rho(t) \mathcal{O} \right] = S(t). \quad (2.1)$$

Assim, encontraremos os parâmetros do campo laser que geram tal potencial  $H_C(t)$ .

Com esse propósito, consideramos o método de controle quântico independente do tempo por partes (PTIQCM)<sup>1</sup>, sendo um método particularmente simples do ponto de vista computacional [24, 25]. A ideia central é discretizar todo o intervalo de tempo correspondente a dinâmica temporal do observável em  $N$  janelas de largura  $\delta t_n$  – geralmente todos iguais, então  $\delta t_n = \delta t = T/N$  para  $n = 1, 2, \dots, N$  (onde  $t_n$  é o  $n$ -ésimo intervalo de tempo médio). Fundamentalmente, o principal objetivo do PTIQCM é rastrear

---

<sup>1</sup> A sigla refere-se a nomenclatura original do método, que é *Piecewise Time – Independent Quantum Control Method* [24].

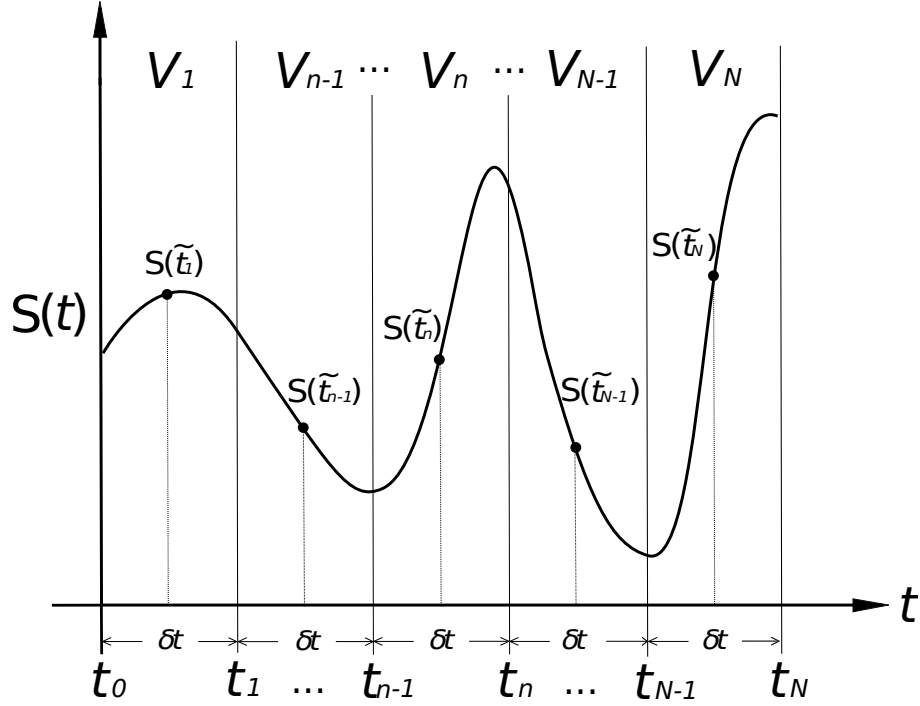


Figura 1 – Trajetória  $S(t)$  correspondente ao valor esperado de um observável  $\langle \mathcal{O} \rangle$  arbitrário. Note que a função da trajetória possui um valor diferente em cada janela temporal  $t_n - \delta t/2 < t < t_n + \delta t/2$  (com  $\tilde{t}_n = t_n - \delta t/2$ ), e conseqüentemente, há um potencial externo  $H_n(t_n)$  que controlará o sistema a fim de atingir tal valor. Fonte: [1].

potenciais independentes do tempo  $V_n$ 's dentro de  $t_n - \delta t/2 < t < t_n + \delta t/2$ , resultando em  $\text{Tr}[\rho(t_n), \mathcal{O}] = S(t_n)$  (de acordo com a Fig. 1).

De acordo com esse procedimento, se (i) os parâmetros externos do laser puderem ser alterados de modo que a variação de  $V_n \rightarrow V_{n+1}$  é suficientemente rápida (em referência ao intervalo  $\delta t$ ) e (ii)  $\delta t$  é suficiente pequeno, o valor obtido para  $\mathcal{O}(t)$  devido aos sucessivos  $V_n$ 's é uma excelente aproximação para a Eq. (2.1). E na verdade, como discutido e exemplificado nos trabalhos [100, 25], satisfazer as condições (i) e (ii) é viável do ponto de vista experimental levando em conta a atual tecnologia de fontes laser. Portanto, conhecendo a trajetória  $S(t)$ , o PTIQCM calcula o perfil do laser  $V_1, V_2, \dots, V_N$  e o resultado obtido é o valor esperado do observável em função do tempo.

Dentro de cada  $\delta t_n$ , assumimos que  $V_n$  tem como resultado um campo elétrico monocromático harmônico na aproximação dipolar. Logo, em termos da base de um qubit não-perturbado, temos

$$V_n = -\Omega_n^{(R)} \begin{pmatrix} 0 & \exp[-i\varphi_n] \\ \exp[i\varphi_n] & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

onde  $\Omega^{(R)}$  é a frequência de Rabi<sup>2</sup> e  $\varphi$  é a fase relativa entre os vetores de polarização do campo e do momento de dipolo. Os elementos da diagonal são negligenciados desde que os

<sup>2</sup> Existe uma extensa literatura sobre as oscilações de Rabi em sistemas quânticos, sendo assim, vamos

estados não-perturbados tenham mesma paridade.

Usualmente, assumimos que o campo de interação atua somente em um qubit [102], e no nosso caso escolhemos  $Q_1$ , tal que

$$H_C = V \otimes \sigma_x \quad (2.3)$$

No Apêndice A apresentamos todas as possíveis parametrizações para  $H_C$ , seja em termos de  $\sigma_y$  ou  $\sigma_z$  (Aqui,  $\sigma_{x,y,z}$  são matrizes de Pauli). O campo  $H_C = V \otimes \sigma_y$  fornece os mesmos resultados físicos (obtidos para  $\sigma_x$ ) e  $H_C = V \otimes \sigma_z$  demonstrou-se um acoplamento inefetivo para o controle quântico desejado<sup>3</sup>

É conveniente expressarmos o operador densidade  $\rho$  através de uma representação matricial especial, particularmente conveniente no controle dos *qubits* devido a sua simplicidade. Vamos pressupor que a dinâmica do sistema seja expressa pela matriz densidade no estado X [103]. Nesse caso, a escolha para tal configuração é justificada pela simplicidade matemática e também a relativa facilidade na implementação experimental [64, 104, 105]. A parametrização para  $\rho = \sum_{j,k}^4 |j\rangle \langle k|$  é definida como

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{14} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{41} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

escrito em termo das bases  $|1\rangle = |ee\rangle$ ,  $|2\rangle = |eg\rangle$ ,  $|3\rangle = |ge\rangle$  e  $|4\rangle = |gg\rangle$ . Assim, escrevemos o valor esperado  $\langle \mathcal{O} \rangle$  como sendo

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \rho_{11} \mathcal{O}_{11} + \rho_{22} \mathcal{O}_{22} + \rho_{33} \mathcal{O}_{33} + \rho_{44} \mathcal{O}_{44} + (\rho_{14} + \rho_{41}) \mathcal{O}_{14} + (\rho_{23} + \rho_{32}) \mathcal{O}_{23}. \quad (2.5)$$

Portanto, impomos uma trajetória  $S(t) = \langle \mathcal{O} \rangle(t)$  para a Eq. (2.5) e em seguida aplicamos PTIQCM. É importante frisar que uma vantagem do método de controle aqui utilizado está em sua simplicidade, e quando aplicado a sistemas quânticos abertos pode proporcionar ou facilitar o controle de coerência ou concorrência, lembrando que no caso do emaranhamento fazemos um procedimento indireto. Veremos nas seções seguintes que precisamos controlar indiretamente o emaranhamento, pois tal quantificador não é um observável em mecânica quântica [24, 25].

---

referenciar apenas a obra original [101]. A frequência de Rabi é o produto do campo elétrico pelo momento de dipolo elétrico, ou seja,  $\Omega = \vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{E}}$ .

<sup>3</sup> Na verdade, não existe nenhuma diferença qualitativa em qualquer resultado obtido nesta tese quando aplicamos o potencial externo em ambos os *qubits*, a menos de pequenas variações no padrão dos  $\{V_1, V_2, \dots\}$ , que não apresentaremos aqui.

## 2.2 DEFINIÇÃO DO SISTEMA

Analisamos um sistema quântico constituído por dois *qubits* acoplados sob a influência dos ruídos de amortecimento de amplitude e fase<sup>4</sup>, isto é, dois sistemas de dois níveis interagindo entre si e também com um ambiente markoviano. Na prática, um ambiente markoviano se refere a um sistema cuja dinâmica temporal não depende de processos ‘anteriores’, ou em outras palavras, não existem efeitos de memória [46].

O primeiro *qubit* será rotulado por  $Q_1$  e o segundo *qubit* por  $Q_2$ . O Hamiltoniano inicial associado aos *qubits* é definido por

$$\frac{1}{\hbar\omega_0}H_0 = \frac{\alpha_1}{2}\sigma_z^{(1)} + \frac{\alpha_2}{2}\sigma_z^{(2)} + \gamma\left(\sigma_+^{(1)}\sigma_-^{(2)} + \sigma_-^{(1)}\sigma_+^{(2)}\right). \quad (2.6)$$

Os dois primeiros termos representam o Hamiltoniano livre, em que as frequências naturais dos *qubits* são  $\omega_n = \alpha_n\omega_0$  ( $n = 1, 2$  e  $\alpha_n$  uma quantidade adimensional). O termo  $\gamma$  descreve a força de acoplamento entre  $Q_1$  e  $Q_2$ , considerando a aproximação de onda rotacional<sup>5</sup>. Os termos  $\omega_1$  e  $\omega_2$  são as frequências naturais de transição dos *qubits* e os operadores  $\sigma_\mu^{(1)}$  e  $\sigma_\mu^{(2)}$  (onde  $\mu = z, +$  ou  $-$ ) são as matrizes responsáveis pelo acoplamento entre  $Q_1$  e  $Q_2$ , conforme a relação

$$\sigma_\mu^{(1)} = \sigma_\mu \otimes \sigma_0, \quad (2.7)$$

$$\sigma_\mu^{(2)} = \sigma_0 \otimes \sigma_\mu, \quad (2.8)$$

em que  $\sigma_+ = |e\rangle\langle g|$  é o operador de levantamento e  $\sigma_- = |g\rangle\langle e|$  de rebaixamento. A forma matricial e todas as expressões tensoriais, com os respectivos detalhes matemáticos, encontram-se no Apêndice A. As bases escolhidas para representar os estados fundamental e excitado são, respectivamente,  $|e\rangle = (1\ 0)^T$  e  $|g\rangle = (0\ 1)^T$  (onde  $T$  indica a Transposta). Os operadores  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$  e  $\sigma_0$  que aparecem no produto tensorial são as matrizes de Pauli usuais, que ao ser escrita na forma da soma de projetores corresponde a

$$\sigma_0 = |e\rangle\langle e| + |g\rangle\langle g|, \quad (2.9)$$

$$\sigma_x = |e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|, \quad (2.10)$$

$$\sigma_y = i|g\rangle\langle e| - i|e\rangle\langle g|, \quad (2.11)$$

$$\sigma_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|. \quad (2.12)$$

Um dos objetivos do nosso estudo é identificar como a decoerência e o fluxo de energia para o ambiente se relacionam, e também, como o protocolo de controle aqui proposto

<sup>4</sup> Ao longo do capítulo vamos utilizar a sigla em inglês, ou seja, amortecimento de amplitude AD (*amplitude damping*) e amortecimento de fase PD (*phase damping*).

<sup>5</sup> *Rotate wave approximation*. Nesta aproximação, quando um campo externo é ressonante com as transições do sistema quântico, os termos oscilatórios de maior frequência são negligenciados, simplificando as expressões que descrevem a dinâmica temporal [106].



pode conter tais efeitos. Para isso, iniciamos a análise determinando os autovalores e os respectivos autoestados de energia de  $H_0/\hbar\omega_0$ , da Eq. (2.6), sendo

$$|\alpha+\rangle = |ee\rangle, \quad \varepsilon_0^{(1)} = +\alpha, \quad (2.13)$$

$$|\gamma+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ge\rangle + |eg\rangle), \quad \varepsilon_0^{(2)} = +\gamma, \quad (2.14)$$

$$|\gamma-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ge\rangle - |eg\rangle), \quad \varepsilon_0^{(3)} = -\gamma, \quad (2.15)$$

$$|\alpha-\rangle = |gg\rangle, \quad \varepsilon_0^{(4)} = -\alpha. \quad (2.16)$$

cuja representação das bases  $\{|ee\rangle, |eg\rangle, |ge\rangle, |gg\rangle\}$  é o produto  $|ab\rangle = |a^{(1)}\rangle \otimes |b^{(2)}\rangle$ . Veremos na seção de resultados o comportamento dos *qubits* em termos da energia e como os autoestados estacionários são acessados durante o procedimento de controle. Um caso particular de interesse para o propósito desse estudo é fazer  $\alpha = \gamma = 1$ . Tal escolha configura um sistema de dois qubits ressonantes e com máxima força de interação.

Ao considerarmos o campo externo interagindo com os *qubits*, definimos o Hamiltoniano total  $H_S = H_0 + H_C$ , onde  $H_C$  é expresso pela Eq. 2.3. Os autoestados e autoenergias de  $H_S$  são expressos como

$$|F_{\alpha+}\rangle = A^{(+)}|gg\rangle + B^{(+)}|ee\rangle, \quad \varepsilon_s^{(1)} = +\alpha\sqrt{1+a^2}, \quad (2.17)$$

$$|F_{\gamma+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ge\rangle + D|eg\rangle), \quad \varepsilon_s^{(2)} = +\gamma\sqrt{1+b^2+2b\cos(\phi)}, \quad (2.18)$$

$$|F_{\gamma-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ge\rangle - D|eg\rangle), \quad \varepsilon_s^{(3)} = -\gamma\sqrt{1+b^2+2b\cos(\phi)}, \quad (2.19)$$

$$|F_{\alpha-}\rangle = A^{(-)}|gg\rangle + B^{(-)}|ee\rangle, \quad \varepsilon_s^{(4)} = -\alpha\sqrt{1+a^2}. \quad (2.20)$$

introduzindo os termos

$$\begin{aligned} f &= \frac{1}{\sqrt{2(1+a^2+\sqrt{1+a^2})}}, \\ B^{(+)} &= A^{(-)} = \frac{1+\sqrt{1+a^2}}{f}, \\ A^{(+)} \exp[-i\phi] &= B^{(-)} \exp[+i\phi] = \frac{a}{f}, \\ D &= \frac{\sqrt{1+b^2+2b\cos[\phi]}}{1+b\exp[i\phi]}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

com  $a = -\Omega_R/(\alpha\hbar\omega_0)$  e  $b = -\Omega_R/(\gamma\hbar\omega_0)$ .

### 2.3 DINÂMICA DE SISTEMAS ABERTOS - A EQUAÇÃO MESTRA

Uma abordagem possível para tratarmos da evolução de sistemas quânticos abertos utiliza o conceito de processo Markoviano, onde empregamos a expressão na forma de

Lindblad, ou mais precisamente Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad (GKSL) [66, 47]. A demonstração do teorema de Lindblad é apresentada na Sec. A.4.2 do Ape. A. A equação mestra escrita em termos do operador densidade  $\rho(t)$  é definida por

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_S, \rho(t)] + \mathcal{L}(\rho(t)), \quad (2.22)$$

onde  $[H_S, \rho(t)] = H_S\rho(t) - \rho(t)H_S$  é um comutador,  $H_S = H_0 + H_C$  é o Hamiltoniano dos *qubits* acoplados sob atuação de um potencial externo  $H_C$  de controle, e  $\mathcal{L}(\rho)$  é o superoperador<sup>6</sup> que definirá a influência do meio dissipativo sobre o sistema. Como mencionado nas seções anteriores, analisaremos interações importantes para o processamento de informação quântica, que são: amortecimento de amplitude (AD), amortecimento de fase (PD), e o efeito combinado das duas interações (APD), em que serão discutidas nas seções seguintes.

### 2.3.1 Informação Quântica

Comentaremos de maneira direta e breve a respeito da área de informação quântica e suas principais relações. Basicamente, na teoria de informação clássica se estuda o armazenamento, processamento e transmissão de informação com bits clássicos (0 ou 1) [46]. Tal teoria fundamenta hoje as bases científicas da comunicação moderna [107]. Neste capítulo estamos interessados em uma fonte diferente de informação, algo mais relacionado com a teoria da mecânica quântica. Nesse contexto, utiliza-se um raciocínio análogo aos processos inerentes da teoria de informação clássica, mas aplicado ao universo quântico. Portanto, a teoria de informação quântica se concentra no armazenamento, processamento e transmissão de informação com um ‘ingrediente extra’, isto é, utilizando bits quânticos (ou *qubits*) [46].

Uma forma de quantificar a informação em um sistema é através da entropia de informação de Shannon [108]

$$H(X) = -\sum_i p_i \log(p_i), \quad (2.23)$$

onde  $p_i$  é a probabilidade de ocorrência do estado  $i$  e  $X$  uma variável aleatória.

A generalização para o caso quântico veio através da contribuição de von Neumann [46], definindo como

$$S(\rho) = -\text{Tr}[\rho \log(\rho)], \quad (2.24)$$

a operação do traço  $\text{Tr}[\ ]$  é definida como  $\text{Tr}[M] = \sum_i \langle i | M | i \rangle$ , tal como a soma dos elementos diagonais da matriz  $M$  em questão. Podemos recuperar a mesma expressão para

<sup>6</sup> O termo ‘superoperador’ decorre da sua atuação sobre a matriz densidade, que também é um operador em mecânica quântica.

a entropia de Shannon (2.23) quando a matriz densidade for diagonal em alguma base, por exemplo:  $\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|$ .

De todas as suas propriedades matemáticas, vale mencionar três delas:

**Não negatividade:** A entropia de von Neumann nunca assumirá valores negativos, pois  $0 \leq p_i \leq 1$ .

**Valor Mínimo:** A entropia de um estado puro é zero. Isso significa que temos total informação do estado do sistema.

**Valor Máximo:** O valor máximo da entropia é atingido para o estado de máxima mistura:  $S(\rho) \leq \log d$ , onde  $d$  é a dimensão do espaço de Hilbert. Logo, não temos informação do estado do sistema. De certa forma, a entropia nos fornece uma medida de ‘ignorância’ do sistema, e uma das razões de utilizarmos o formalismo de matriz densidade com sistemas abertos, conforme exposto na Sec. 2.3, é devido a sua generalidade em descrever estados puros e estados de mistura. De fato, o ambiente pode afetar a coerência do estado  $\rho$  (termos fora da diagonal principal) a ponto transformá-lo em um estado misto, cuja informação é totalmente perdida (ou a entropia é máxima!).

### 2.3.2 Estados Puros e Estados de Mistura

Em mecânica quântica temos diversas formas para descrever um sistema quântico qualquer. Na representação de Heisenberg utilizamos matrizes para representar os observáveis, transformando a dependência temporal do estado  $|\Psi(t)\rangle = U|\psi_0\rangle$  diretamente para esses observáveis  $\mathcal{O}(t) \rightarrow U^\dagger \mathcal{O} U$  em termos de seus valores esperados [109] ( $U$  é um operador unitário que evolui o sistema quântico no tempo). Na representação de Schrödinger é o vetor de estado do sistema que carrega a dinâmica temporal  $|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi(t)\rangle$ , ao contrário dos observáveis do sistema  $\mathcal{O}(t) \rightarrow \mathcal{O}$ . Outra abordagem denominada Representação de Interação envolve a dependência temporal em ambos – estados e observáveis do sistema  $\{\mathcal{O}(t), |\Psi(t)\rangle\}$  [109]. Apesar da importância inquestionável de todos os exemplos citados, nenhum deles é suficiente para descrever *ensembles aleatórios*.

Antes de ir ao ponto, precisamos definir apropriadamente o que é um *ensemble*. O ensemble é uma coleção de cópias de sistemas microscópicos preparados igualmente, e geralmente representados pelo mesmo ket  $|\psi\rangle$  [21]. Vamos considerar o experimento de Stern-Gerlach (SG) para desenvolvermos nosso raciocínio. Sem realizar qualquer medição do tipo SG (ex. medir a componente  $z$ ), um feixe de átomos (em um certo exemplo) pode ter qualquer polarização de spin (+, -) e em qualquer direção ( $x, y, z$ ). Uma tentativa razoável para descrever tal ensemble seria propor

$$|\theta\rangle = \cos(\beta/2)|z+\rangle + \text{sen}(\beta/2)e^{i\alpha}|z-\rangle, \quad (2.25)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são os ângulos polar e azimutal, respectivamente. Se analisarmos a Eq. (2.25) e nos questionarmos: Qual a probabilidade de encontrarmos no ensemble um estado quântico

caracterizado por  $|z+\rangle$ ? Embora seja tentador afirmar que é  $|\cos(\beta/2)|^2$ , tal resultado na verdade corresponde a probabilidade do estado  $|\theta\rangle$  estar no autoestado  $|z+\rangle$  do operador  $S_z$ . Na prática sabemos que nesse ensemble existe uma parcela dos átomos que estão aleatoriamente com a orientação de spin up, e a outra parcela restante com spin down. No entanto, não há nenhuma informação da fase relativa entre os ket's  $|z+, -\rangle$ .

Portanto, o formalismo de 'ket's de estados' não é suficiente para descrever um ensemble composto por uma mistura de, por exemplo, 30% dos átomos apontando na direção 'z+' e outros 70% apontando na direção 'x-', e além disso, não sabemos quais átomos desse ensemble apontam em qualquer uma dessas direções, pois é algo puramente aleatório. A descrição em termos de bra's e ket's não é capaz de representar uma mistura completamente aleatória de estados quânticos. Nesse ponto, é mais apropriado o uso da definição de matriz densidade  $\rho$ , tal como

$$\rho = \sum_i p_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}|, \quad (2.26)$$

com os  $p_i$ 's chamados de pesos probabilísticos. Note que se fizermos  $p_1 = 0,3$  e  $p_2 = 0,7$ , onde  $i = 1 \rightarrow z+$  e  $i = 2 \rightarrow x-$ , teremos

$$\rho = 0,30|z+\rangle \langle z+| + 0,70|x-\rangle \langle x-|, \quad (2.27)$$

conforme o exemplo mencionado nos parágrafos anteriores. Daqui concluímos que: *A probabilidade de encontrarmos no ensemble  $\rho$  o estado  $|z+\rangle$  é de 30%, e do estado  $|x-\rangle$  é de 70%.*

Nesse momento pode parecer que estados quânticos não servem para mais nada, entretanto, estados quânticos são um caso particular da matriz densidade quando temos um *ensemble puro*. Um estado (ou ensemble) puro é a coleção de sistemas físicos representados pelo mesmo ket  $|\psi\rangle$ , o que equivale fazer simplesmente  $p_1 = 1$  (assim removendo a somatória) na Eq. (2.26) (não mencionamos antes, mas o estado Eq. (2.25) é um estado puro!). Podemos interpretar o valor de  $p_1$  como se fosse: *100% do ensemble está polarizado na direção do ket  $|\psi\rangle$* . Nesse caso, é totalmente válida a relação  $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$ , onde  $|\psi\rangle$  poderia ser um ket arbitrário  $|z+\rangle$ ,  $|y-\rangle$ ,  $|x+\rangle$ , ou uma combinação linear desses ket's, por exemplo.

No caso de qualquer estado (ou ensemble) de mistura, cada ket é ponderado por determinada fração  $\{p_i\}$ , perdendo-se a polarização observada em um estado puro. Uma forma de diferenciar um ensemble puro de um ensemble misto é calcular a pureza da matriz densidade. Isso é feito através da relação  $\mathcal{P} = \text{Tr}[\rho^2]$ . Se o resultado de  $\mathcal{P}$  for 1 o ensemble é puro e qualquer outro valor de  $\mathcal{P} < 1$  configura um ensemble misto. Algo interessante ocorre quando um estado é de máxima mistura, ou em outras palavras, quando a matriz densidade assume a forma  $\rho = (1/d)I$ , no qual  $d$  é a dimensão do espaço de Hilbert e  $I$  a

matriz identidade. Se  $d = 4$ , a matriz identidade assume a forma

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

### 2.3.3 Amortecimento de Amplitude (*Amplitude Damping*) (AD)

No estudo de operações quânticas envolvendo a dissipação de energia em sistemas microscópicos, a melhor forma de representar tais processos é através do amortecimento de amplitude [46]. Esse canal de ruído é amplamente utilizado na caracterização da dinâmica radiativa em átomos ou moléculas, justamente por descrever a emissão de fótons nas transições entre os estados quânticos. A equação que retrata a atuação do amortecimento de amplitude é dada por

$$\mathcal{L}(\rho) = \sum_{n=1}^2 \omega_0 \Gamma_n^{(AD)} \left( \sigma_-^{(n)} \rho \sigma_+^{(n)} - \frac{1}{2} \sigma_+^{(n)} \sigma_-^{(n)} \rho - \frac{1}{2} \rho \sigma_+^{(n)} \sigma_-^{(n)} \right), \quad (2.29)$$

onde os diferentes valores de  $n$  representam cada um dos *qubits*. A constante  $\Gamma_n^{(AD)}$  é o termo de dissipação.

### 2.3.4 Amortecimento de Fase (*Phase Damping*) (PD)

O amortecimento de fase é um dos processos de maior importância no estudo da computação quântica e da informação quântica. Trata-se de um ruído capaz de descrever a perda de informação sem a perda de energia, manifestando-se na destruição dos elementos fora da diagonal da matriz densidade. Para o entendimento de tal mecanismo, é conveniente lembrarmos que os autovetores de um sistema quântico são estacionários quando expandidos em termos dos estados de energia, ou seja, os autoestados do Hamiltoniano não evoluem em função do tempo, no entanto, acumulam um fator de fase que é proporcional ao autovalor correspondente. Contudo, tais fases relativas podem ser parcialmente suprimidas devido ao efeito de amortecimento de fase induzido pelo ambiente, que afeta de modo significativo os elementos de coerência da matriz densidade  $\rho(t)$ .

A expressão matemática associada a esse tipo de ruído é dada por

$$\mathcal{L}(\rho) = \sum_{n=1}^2 \frac{1}{2} \omega_0 \Gamma_n^{(PD)} \left( \sigma_z^{(n)} \rho \sigma_z^{(n)} - \frac{1}{2} \sigma_z^{(n)} \sigma_z^{(n)} \rho - \frac{1}{2} \rho \sigma_z^{(n)} \sigma_z^{(n)} \right), \quad (2.30)$$

em que  $\Gamma_n^{(PD)}$  é a constante de decaimento. Outra forma de interpretar tal fenômeno é considerar que o ruído induz o decaimento exponencial no valor esperado dos elementos  $\rho_{(j,k)}$  ( $j \neq k$ ) do operador  $\rho(t)$  com o tempo [46]. Nesse caso extremo, o estado resultante é

simplesmente uma mistura estatística, isto é, o ensemble é representado por uma mistura incoerente de estados puros. Uma definição satisfatória para estados puros e estados mistos é fornecida na Sec. 2.3.2.

### 2.3.5 Amortecimento de Amplitude e Fase (APD)

Introduziremos agora a associação dos dois ruídos apresentados nas seções anteriores, isto é, somamos o amortecimento de amplitude com a contribuição do amortecimento de fase. Agora, o ruído resultante é capaz de dissipar a energia e a informação do sistema simultaneamente. Inspiramos tal composição no trabalho de R. Fortes e G. Rigolin [110], onde aproveita-se a inevitabilidade de existirem processos estocásticos afetando qualquer sistema quântico real. A estratégia consiste em combinar esses canais para gerar correlações quânticas mais estáveis a fim de combater a decoerência no estado do sistema.

A interação resultante torna-se

$$\mathcal{L}(\rho) = \sum_{n=1}^2 \omega_0 \left[ \frac{\Gamma_n^{(AD)}}{2} \left( 2\sigma_-^{(n)} \rho \sigma_+^{(n)} - \left\{ \sigma_+^{(n)} \sigma_-^{(n)}, \rho \right\} \right) + \frac{\Gamma_n^{(PD)}}{4} \left( 2\sigma_z^{(n)} \rho \sigma_z^{(n)} - \left\{ \sigma_z^{(n)} \sigma_z^{(n)}, \rho \right\} \right) \right], \quad (2.31)$$

sendo  $\{xy, \rho\} = xy\rho + \rho xy$  um anticomutador.

## 2.4 QUANTIFICADORES DE COERÊNCIA E CORRELAÇÕES QUÂNTICAS

Caracterizar o emaranhamento de um sistema quântico pode ser feito de diversas formas no campo da informação quântica. Cada quantificador tem sua particularidade e, geralmente, revelam um aspecto distinto do tipo de correlação estudada [86]. Apesar de estarmos analisando somente três medidas, tais como coerência quântica [89], concorrência [87] e negatividade [88], elas serão suficientes para o desenvolvimento do presente estudo.

### 2.4.1 Coerência

O fenômeno de interferência entre os estados quânticos tem relação direta com a coerência quântica [89]. Métodos teóricos e novas formulações matemáticas vem sendo desenvolvidas para caracterizar mais rigorosamente a coerência em sistemas multipartidos, principalmente em função das novas aplicações, como no caso de sistemas biológicos [111].

Para o caso do controle dos *qubits*, analisaremos o grau da coerência à medida que o sistema evolui sob influência do ambiente. Devido a configuração particular dos

estados  $X$  (conforme a Eq. (2.4)), o traço parcial de  $\rho^7$  (em estado  $X$ ) não é suficiente para descrever o grau de coerência do sistema (veremos que os elementos fora da diagonal da matriz reduzida são nulos para ambos os *qubits*). Uma forma geral de quantificar a coerência é através da norma  $l_1$  da coerência, dado pela equação

$$C = \sum_{\substack{j,k \\ j \neq k}} |\rho_{jk}|. \quad (2.32)$$

O somatório do módulo dos elementos fora da diagonal da matriz densidade é facilmente calculável para qualquer sistema quântico.

### 2.4.2 Concorrência

A medida de concorrência tem sido um dos quantificadores de correlações quânticas mais utilizados em informação quântica, particularmente no estudo de emaranhamento em sistemas bipartidos [66]. Tal medida é usualmente empregada na determinação da criação de emaranhamento no sistema [86]. Por exemplo, os *qubits* em nosso estudo estão acoplados devido ao termo  $\gamma$  da Eq.(2.6), e tal interação entre os espaços de Hilbert de  $Q_1$  e  $Q_2$  induz correlações quânticas, sendo o emaranhamento uma delas.

Para representar os *qubits* interagentes utilizamos uma transformação chamada de função *spin – flipped* [66], dada por

$$\tilde{\rho} = \left( \sigma_y \otimes \sigma_y \right) \rho^* \left( \sigma_y \otimes \sigma_y \right). \quad (2.33)$$

onde  $\rho^*$  é o complexo conjugado de  $\rho$  e assumimos estar escrito na base  $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\}$ . Assim, podemos apresentar a expressão da concorrência

$$E_C(\rho) = \text{Max} \left( 0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4} \right), \quad (2.34)$$

em que  $\lambda_j$  são os autovalores da matriz anti-Hermitiana  $\rho\tilde{\rho}$  e respeitando o ordenamento  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$ . A Eq. (2.34) varia no intervalo  $0 \leq E_C(\rho) \leq 1$ , no qual  $E_C(\rho) = 1$  representa um estado maximamente emaranhado.

### 2.4.3 Rastreamento o Emaranhamento

Seguindo os passos descritos em [64] é possível obter uma expressão analítica para a concorrência utilizando explicitamente os elementos, e os autovalores, do operador  $\rho$  no estado  $X$ . A solução analítica é de grande interesse para o controle quântico, pois viabiliza

<sup>7</sup> No Apêndice A demonstramos como obter a matriz reduzida de população de cada *qubit* por intermédio do traço parcial.

a manipulação indireta da medida de emaranhamento do sistema. Após determinar os autovalores  $\{\lambda_n\}$  e substituí-los na Eq. (2.34), encontramos as expressões

$$E_C(\rho) = \text{Max}\left(0, E_{C_1}, E_{C_2}\right), \quad (2.35)$$

onde temos

$$E_{C_1} = 2(\sqrt{\rho_{23}\rho_{32}} - \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}), \quad \text{e} \quad E_{C_2} = 2(\sqrt{\rho_{14}\rho_{41}} - \sqrt{\rho_{22}\rho_{33}}) \quad (2.36)$$

cujo resultado para  $E_C$  sempre será o valor máximo entre  $E_{C_1}$  e  $E_{C_2}$  (verificamos tal propriedade numericamente). Veremos na Seção 2.1 os resultados e detalhes dessa técnica.

#### 2.4.4 Negatividade

Outro quantificador frequentemente aplicado na caracterização de correlações de natureza quântica é a negatividade [88]. Essa medida é baseada no critério de Peres-Horodecki no que se refere a separabilidade de dois sistemas quânticos  $A$  e  $B$ . Tal critério, também denominado de transposição parcial positiva - PPT<sup>8</sup>, é testado calculando-se o traço da norma (definidos abaixo) da matriz densidade  $\rho$  após a transposição parcial em relação ao subsistema  $A$ , sendo representado por  $\rho^{TA}$ . O nome ‘negatividade’ advém do sinal dos autovalores do operador  $\rho^{TA}$ , ou seja, se algum desses autovalores forem negativos o estado  $\rho$  é necessariamente emaranhado [112], caso contrário, o estado é separável.

Uma das principais propriedades da negatividade é não aumentar sob operações locais e comunicação clássica (*LOCC*)<sup>9</sup>, sendo conseqüentemente uma medida monótona [113]. Determinamos a negatividade do sistema através da relação

$$N(\rho) = \frac{1}{2} \left( \|\rho^{TA}\| - 1 \right). \quad (2.37)$$

onde o símbolo  $\|\rho^{TA}\|$  é o traço da norma  $\text{Tr} \left[ \sqrt{(\rho^{TA})^\dagger \rho^{TA}} \right]$ . A partir da Eq. (2.37) podemos obter uma outra expressão, que denominaremos negatividade logarítmica, dado por

$$E_N(\rho) = \log_2 \left[ 2N(\rho) + 1 \right], \quad (2.38)$$

representando um limite superior ao emaranhamento destilável para  $\rho(t)$ . Isso facilita a comparação com a medida de concorrência, pois apresenta os mesmos valores para estados puros [112, 114]. O termo destilável corresponde a possibilidade de ‘extrair’ emaranhamento do sistema, apesar de existirem estados emaranhados não destiláveis, ou não detectáveis, em sistemas com dimensões maiores do que  $2 \otimes 2$  ou  $2 \otimes 3$ . Tais estados representam algo como ‘emaranhamento ligado’ (*bound entanglement* em inglês) [115], sendo necessário utilizar medidas complementares para identificá-los.

<sup>8</sup> O termo em inglês é Positive Partial Transposition.

<sup>9</sup> Do inglês Local Operations and Classical Communication. Trata-se de uma transformação realizada sobre os estados do sistema, como por exemplo, a própria medição desse estado, e em seguida enviando o resultado da medida por um canal clássico como internet ou telefone.



### 2.4.5 Fidelidade e Distinguibilidade (*Fidelity and Trace Distance*)

Quando processos estocásticos atuam em um sistema quântico aberto a tendência é que a diferença entre os estados físicos seja reduzida continuamente, como consequência do fluxo de informação do sistema diretamente para o ambiente [66]. Tal comportamento corresponde ao decréscimo da distinguibilidade ( $T_D$ ) desses estados com o tempo, e tal variação pode ser computada em termos dos elementos da matriz densidade do sistema.

Para determinar a diferença entre dois subsistemas, representado pelos estados quânticos  $\rho^{(1)}$  e  $\rho^{(2)}$ , tem-se

$$\begin{aligned} T_D(\rho^{(1)}, \rho^{(2)}) &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[ \left| \rho^{(1)} - \rho^{(2)} \right| \right] \\ &= \frac{1}{2} \left( \left| \rho_{ee}^{(1)} - \rho_{ee}^{(2)} \right| + \left| \rho_{gg}^{(1)} - \rho_{gg}^{(2)} \right| \right), \\ &= \left| \rho_{22} - \rho_{33} \right|, \end{aligned} \quad (2.39)$$

onde utilizamos a matriz reduzida de  $Q_1$  e  $Q_2$  da Seção A.2.

Outra situação de interesse é quando desejamos transmitir alguma informação através de um canal de comunicação arbitrário. É esperado que nesse canal existam interferências randômicas que podem destruir todo, ou parcialmente, o sinal durante o processo. Uma forma de mensurar a acurácia de tal transmissão é calculando a fidelidade

$$F(\rho^{(1)}, \rho^{(2)}) = \left[ \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho^{(2)}} \rho^{(1)} \sqrt{\rho^{(2)}}} \right]^2. \quad (2.40)$$

Na prática, a fidelidade fornece o quão próximo, ou o quão parecidos, são os estados quânticos [90].

O leitor provavelmente deve ter notado que a fidelidade e a distinguibilidade são medidas diametralmente opostas, ou melhor dizendo, são complementares entre si. Uma forma de relacionar ambas as medidas é a partir da seguinte equação [90],

$$\begin{aligned} F(\rho^{(1)}, \rho^{(2)}) &\geq 1 - T_D(\rho^{(1)}, \rho^{(2)}). \\ &\geq 1 - \left| \rho_{22} - \rho_{33} \right|. \end{aligned} \quad (2.41)$$

### 2.4.6 Valor Esperado da Energia

Uma das principais análises a serem apresentadas nos resultados desta tese é sobre o valor esperado da energia dos *qubits*, dado por  $\varepsilon_0(t) \equiv \langle \varepsilon_0 \rangle (t)$ , e da energia total do sistema, com  $\varepsilon_s(t) \equiv \langle \varepsilon_s \rangle (t)$ . Como fazemos uso do formalismo de matriz densidade, o valor esperado é calculado pelo traço do produto entre os operadores que desejamos medir com o estado  $\rho(t)$ , sendo assim

$$\varepsilon_0(t) = \text{Tr} \left[ \rho(t) \frac{H_0}{\hbar\omega_0} \right] = \alpha(\rho_{11}(t) - \rho_{44}(t)) + 2\gamma \text{Re}[\rho_{23}(t)], \quad (2.42)$$

e [54]

$$\varepsilon_s(t) = \text{Tr} \left[ \rho(t) \frac{H_S}{\hbar\omega_0} \right] = \varepsilon_0(t) - 2 (\Omega_R/\alpha) \text{Re} \left[ \exp[i\varphi] (\rho_{14}(t) + \rho_{23}(t)) \right], \quad (2.43)$$

onde as energias estão adimensionalizadas e já assumimos o uso da matriz densidade  $\rho(t)$  em estado  $X$ , conforme a Eq. (2.4). Temos a frequência do campo  $\Omega_R$  e a diferença de fase  $\varphi$  entre o campo externo e o momento de dipolo do sistema (para mais detalhes a respeito das propriedades do campo visite a Sec. 2.1).

Em resumo, o valor médio da energia servirá de base para identificarmos as melhores estratégias para conter o fluxo de informação do sistema para o ambiente, na geração e manutenção de emaranhamento e para identificar as limitações no controle coerente de sistemas abertos.

## 2.5 RESULTADOS

Os resultados numéricos foram obtidos considerando as unidades de energia dadas em  $\hbar\omega_0$  (com  $\hbar = 1$ ) e no tempo em  $1/\omega_0$ , logo, trabalhamos somente com soluções adimensionais, lembrando que  $\alpha = \gamma = 1$ . Assumimos que o mesmo ambiente está acoplado a ambos os *qubits*, o que nos leva a mesma taxa  $\Gamma_1 = \Gamma_2$ , sendo o caso em que existe fidelidade máxima de informação para as populações dos *qubits*. A única exceção para tal configuração será apresentada na Seção 2.5.5, onde analisaremos a distinguibilidade entre  $Q_1$  e  $Q_2$ , variando  $\Gamma_2$ . A dinâmica do sistema para amortecimento de fase puro (ruído PD) foi obtida fazendo  $\Gamma^{(PD)} = \Gamma$  e  $\Gamma^{(AD)} = 0$ , e no caso do sistema sob amortecimento de amplitude (ruído AD) configuramos  $\Gamma^{(AD)} = \Gamma$  e  $\Gamma^{(PD)} = 0$ . Se ambos os amortecimentos forem levados em conta, que é o caso do amortecimento de fase e amplitude (APD), então  $\Gamma^{(PD)} = \Gamma^{(AD)} = \Gamma$ . O valor numérico do ruído é  $\Gamma = 0, 1$ , sendo um valor relativamente grande quando comparado aos estudos citados ao longo do capítulo, mas suficientemente pequeno para que não viole a aproximação de Lindblad. Os códigos desenvolvidos para as simulações computacionais foram escritos em linguagem C e aplicando as bibliotecas de computação científica do GSL-GNU (*Gnu Scientific Library*) [116]. A principal motivação para o uso de tais bibliotecas é a massiva capacidade numérica e ampla variedade de funções prontas para uso na linguagem de programação que temos experiência.

### 2.5.1 Evolução Temporal Livre

Antes de examinarmos os efeitos do potencial externo sobre o sistema, primeiramente observamos como o ambiente interfere na dinâmica dos *qubits*. A evolução temporal dos elementos da matriz densidade, a ser mostrada a seguir, foi obtida através da Eq. (2.22) considerando  $H_C = 0$ . Com isso, impomos o estado inicial  $\rho(0) = |ee\rangle\langle ee| = |1\rangle\langle 1|$ ,

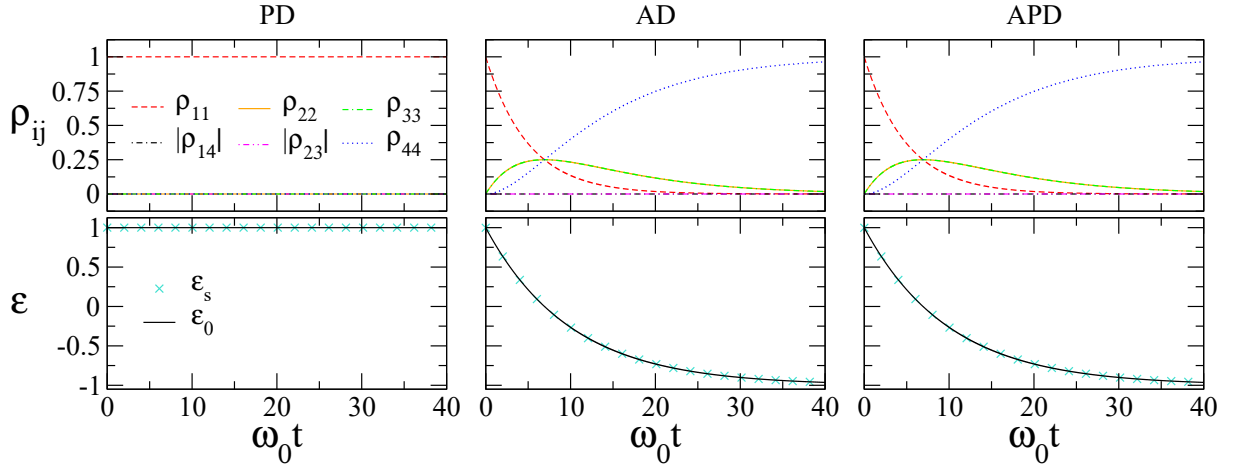


Figura 2 – Sem aplicar o campo de controle externo, temos a evolução temporal de  $\rho(t)$  e do valor esperado da energia do sistema com  $\epsilon_s = \epsilon_0$ . Cada coluna corresponde a um tipo de ruído do ambiente. Para o ruído PD todos os  $\rho_{jk}$  são nulos com exceção de  $\rho_{11}(t) = 1$ , o que significa que  $Q_1$  e  $Q_2$  permanecem no estado excitado para todo  $t$ , e com a energia correspondente a  $\epsilon_s(t) = 1$ . Note que as curvas AD e APD são idênticas, pelo fato do ruído PD não interferir na dinâmica dos *qubits*. Em ambos os casos as populações são induzidas para o estado  $\rho_{44} \rightarrow 1$ .

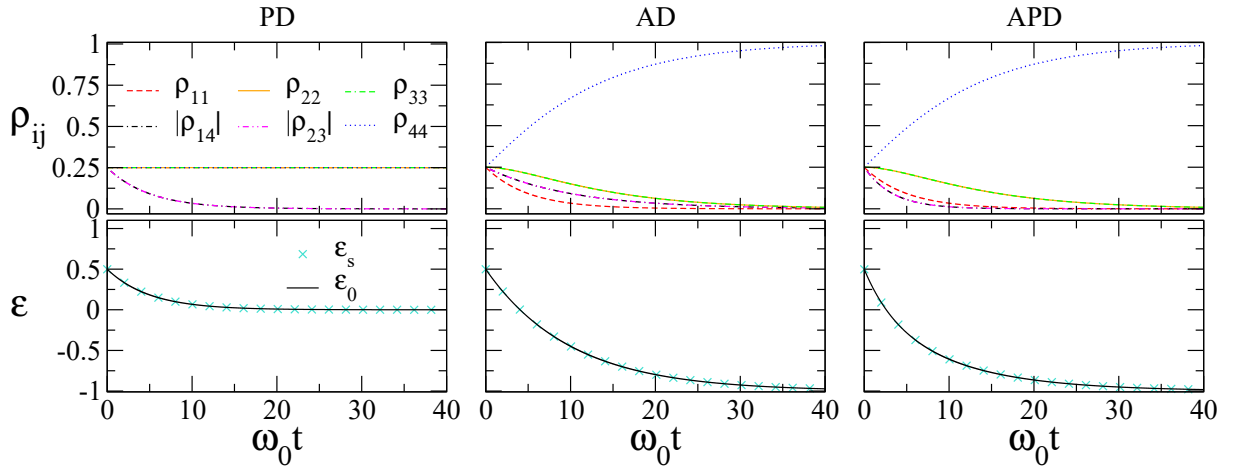


Figura 3 – Assim como apresentado na Fig. 2, o sistema evolui livremente sem atuação do laser, mas a partir do estado inicial  $\rho_{ii}(0) = |\rho_{14}(0)| = |\rho_{23}(0)| = 1/4$ . Aqui temos  $\epsilon_s(0) = 1/2$ .

notando que  $|ee\rangle = |1\rangle$  é um autoestado de  $H_0$ . De acordo com a Fig. 2, o ruído PD não afeta nenhum elemento da matriz densidade  $\rho$ , permanecendo estacionária em  $\rho_{11}(t) = 1$  para todo  $t$ , assim como a energia do sistema em  $\epsilon_s(t) = \epsilon_0(t) = 1$  não muda. Em contrapartida, o ruído AD induz o sistema para o estado  $\rho_{44} = |gg\rangle\langle gg| \rightarrow 1$  com os elementos  $\rho_{ij}$  tendendo a zero e, conseqüentemente,  $\epsilon_s(t) \rightarrow -1$ . O mesmo comportamento acontece para o caso APD, pois na primeira coluna já havíamos notado que o PD não afeta a dinâmica dos  $\rho_{ij}(t)$  na ausência do campo externo. Para todos esses exemplos, as medidas de emaranhamento e coerência são sempre nulos.

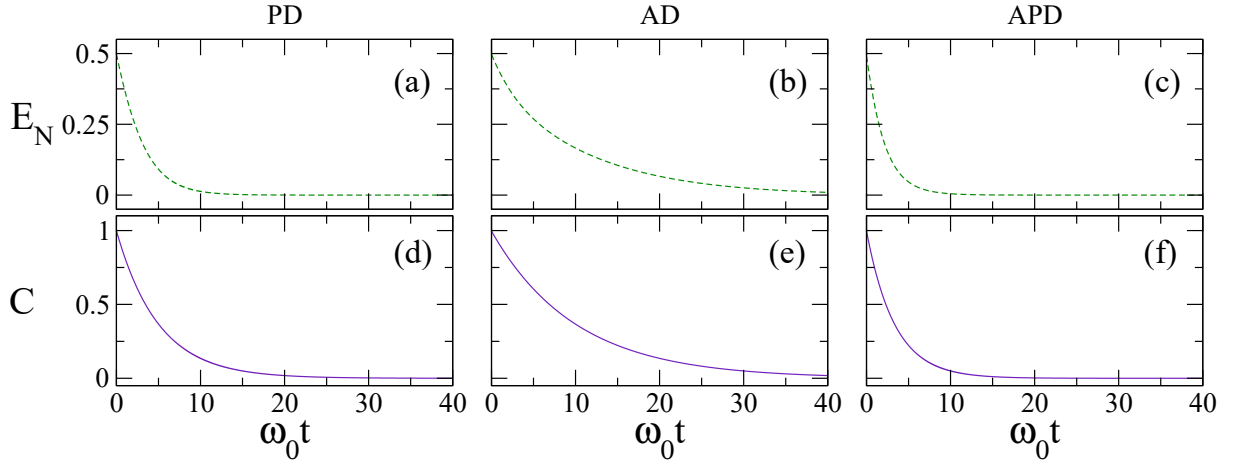


Figura 4 – Para as condições e parâmetros da Fig. 3, expomos as medidas de negatividade  $E_N$ , e coerência  $C$ , (ver Sec. 2.4). Todas estas quantidades tendem a zero, no entanto, em AD a taxa de decaimento é mais lenta. Negligenciamos a concorrência  $E_C$  pois é nula para todo intervalo.

Ilustrando o comportamento dos *qubits* em outra perspectiva, em  $t = 0$  escolhemos um novo estado inicial  $|\phi_0\rangle = (1/2)\sum_j |j\rangle$ , e então,  $\rho(0) = |\phi_0\rangle\langle\phi_0|$ . Na Fig. 3 vemos que os elementos  $\rho_{jj}(t)$  permanecem com o valor 0,25, enquanto que os termos  $\rho_{ij}(t)$  tendem rapidamente a zero, que é esperado para o ruído PD. O valor esperado da energia começa em  $\varepsilon_s = \varepsilon_0 = 0,5$  e logo decai para zero depois de  $\omega_0 t > 10$ . Para os ruídos AD e APD, a dinâmica é parecida, de modo que o sistema retorna para o estado  $\rho_{44}(t) = 1$  com energia  $\varepsilon_s = \varepsilon_0 = -1$ . Assumindo as mesmas condições e parâmetros utilizados na Fig. 3, apresentamos a negatividade  $E_N$  e coerência  $C$  na Fig. 4, (de acordo com a Sec. 2.4). Observe que todas estas quantidades tendem a zero, entretanto, em AD a taxa de decaimento é mais lenta em comparação a PD e APD. Não expomos a concorrência  $E_C$ , pois é nula em todos os casos e para toda a evolução.

Quando inicialmente o elemento da matriz  $\rho_{44} = 1$  é não é nulo, observamos que não há emaranhamento do sistema e a energia média dos qubits é  $\varepsilon_0(0) = -\alpha = -1$  (lembre-se que este  $|\psi_0\rangle$  é o estado fundamental de  $H_0$ ). Com relação ao controle de emaranhamento, tal estado representa uma escolha desafiadora para  $\rho(0)$ , pois dependeremos exclusivamente do acoplamento externo para criar correlações quânticas no sistema e combater os efeitos do ambiente. Além disso, sendo  $|F_{\alpha\pm}\rangle$  dois dos quatro possíveis autoestados de energia dos *qubits* sob um campo externo constante e sem ruído (combinando as Eqs. (2.17) e (2.20) com a Eq. (2.21), segue que

$$|g g\rangle = \frac{1}{f} \left( (1 + \sqrt{1 + a^2}) |F_{\alpha-}\rangle + a \exp[-i\phi] |F_{\alpha+}\rangle \right). \quad (2.44)$$

Dependendo do tipo de interação com o ambiente, o estado inicial expresso pela Eq. (2.44) representaria um estado estacionário, cuja energia total permaneceria constante no valor  $\varepsilon_s(t) = -\alpha$  e a energia dos *qubits*  $\varepsilon_0(t)$  descrevendo oscilações harmônicas com amplitude  $[-\alpha, \alpha(a^2 - 1)/(a^2 + 1)]$ , conforme o exemplo apresentado na Fig. 5 (a), onde assumimos

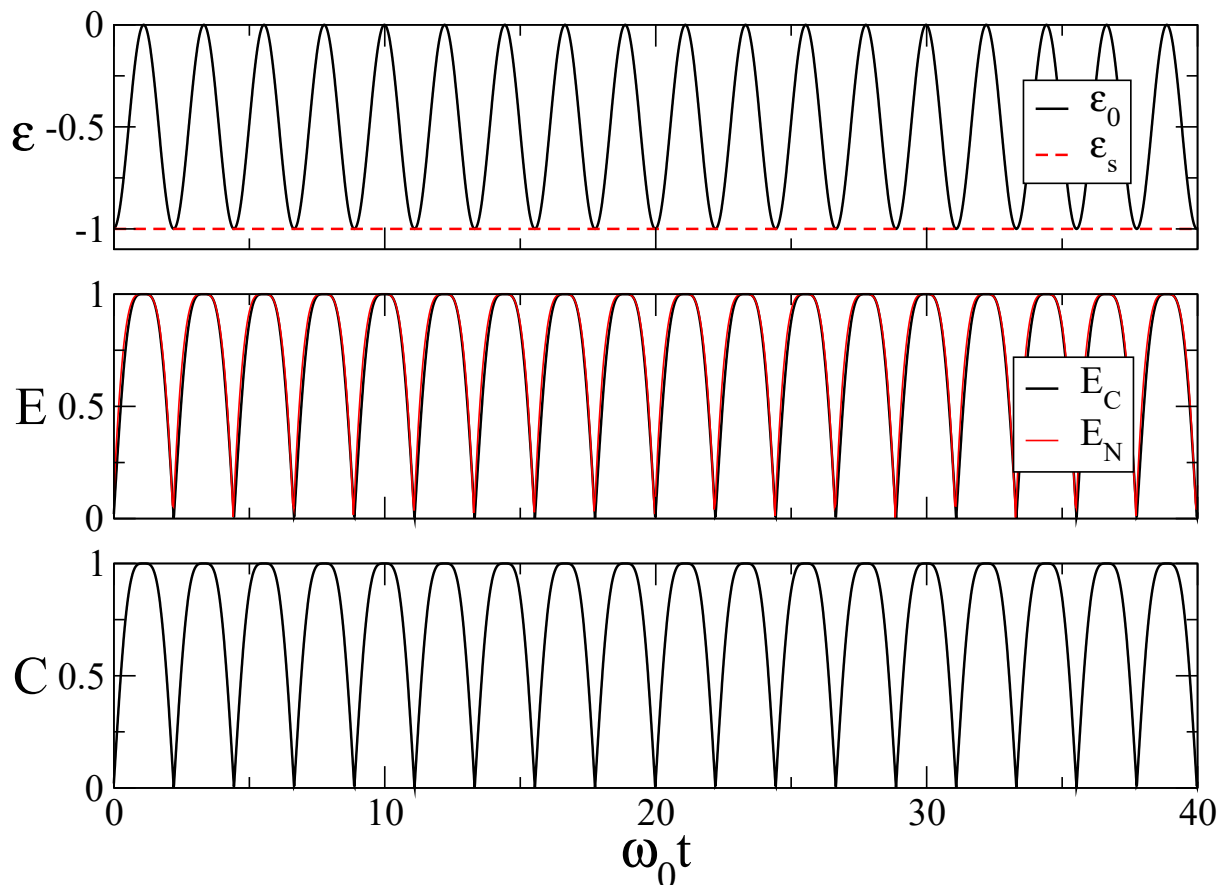


Figura 5 – Assumindo que os qubits estão acoplados entre si sob atuação de um campo externo constante e sem interação com o ambiente, em (a) estão as energias médias dos *qubits* e do sistema total,  $\varepsilon_0$  e  $\varepsilon_s$ , respectivamente, descrevem oscilações ao longo do tempo. O mesmo comportamento é observado para as medidas de concorrência  $E_C$  e negatividade  $E_N$  no painel (b). Em (c) está o perfil do quantificador de coerência do sistema. Utilizamos  $\rho_{44}(0) = |gg\rangle\langle gg| = 1$  como estado inicial.

um campo constante e sem interação com o ambiente. Note que nos painéis (b) e (c) da mesma figura, é observado o mesmo comportamento periódico para as medidas de emaranhamento.

### 2.5.2 Evolução Temporal com $\Omega_R$ Constante

Apresentaremos nesta seção a evolução do sistema considerando um potencial externo de intensidade constante, sem a intenção de realizar controle quântico. Nesse caso, os elementos da matriz densidade foram obtidos através da equação GKSL considerando  $H_c = cte$ . Logo, configuramos  $\varphi_n = \varphi = 0$  e  $\Omega_n^{(R)} = \Omega^{(R)} = \omega_0$  na Eq. (2.2) (assim, removendo termos oscilantes). Analisaremos nesta seção os resultados expostos nas Figs. 6

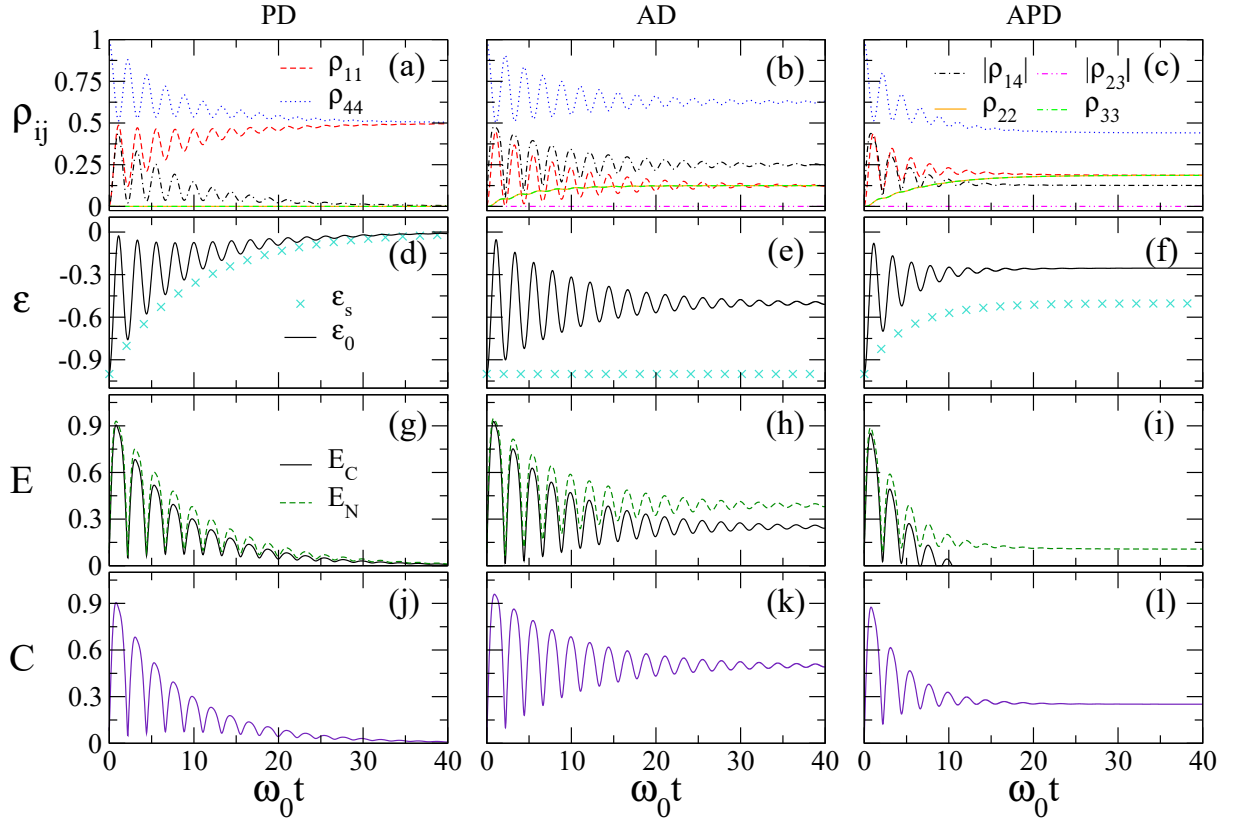


Figura 6 – Assumimos um campo de laser constante aplicado sobre o sistema sem a realização de controle com o estado inicial  $\rho_{44} = 1$ . Aqui apresentamos diferentes quantidades para avaliar como o ruído interfere na dinâmica. Na primeira, segunda e terceira colunas, respectivamente, exibimos os resultados para os ruídos PD, AD e APD. Em (a)–(c) os elementos da matriz densidade, em (d)–(f) está o valor esperado da energia dos *qubits* e do sistema, em (g)–(i) os quantificadores de emaranhamento: concorrência  $E_C$  e negatividade  $E_N$ . Por fim, na linha (j)–(l) a medida da norma  $l_1$  coerência  $C$ .

e 7 assumindo em  $t = 0$  distintos estados iniciais, respectivamente,

$$\rho(0) = |gg\rangle\langle gg| = |4\rangle\langle 4|, \quad (2.45)$$

$$= |ee\rangle\langle ee| = |1\rangle\langle 1|. \quad (2.46)$$

Iniciaremos a análise em termos do estado inicial da Eq. (2.45), em que  $\rho_{44} = 1$ . Observe na Fig. 6, primeiramente nos concentrando nos painéis (a–c) com os elementos da matriz densidade  $\rho_{ij}$ . O caso PD em (a), é o único que exhibe  $\rho_{44}(t)$  e  $\rho_{11}(t)$  convergindo para  $1/2$ , enquanto que todos os outros elementos  $\rho_{ij}(t)$  anulam-se. Esse é um típico processo de decoerência no sistema, cujo estado acaba convergindo diretamente para um estado de mistura 50%–50%. Para os casos AD e APD, respectivamente (b) e (c), os  $\rho_{ij}(t)$  evoluem para valores diferentes de  $1/2$ .

Recordamos que o valor esperado da energia dos *qubits* é dado por  $\varepsilon_0$  (linha) da Eq. (2.42), e a energia do sistema total (*qubits* mais o campo externo) é  $\varepsilon_s$  (símbolo ‘×’), expresso pela Eq. (2.43). Sabemos que na ausência de ruído, mas mantendo os mesmos

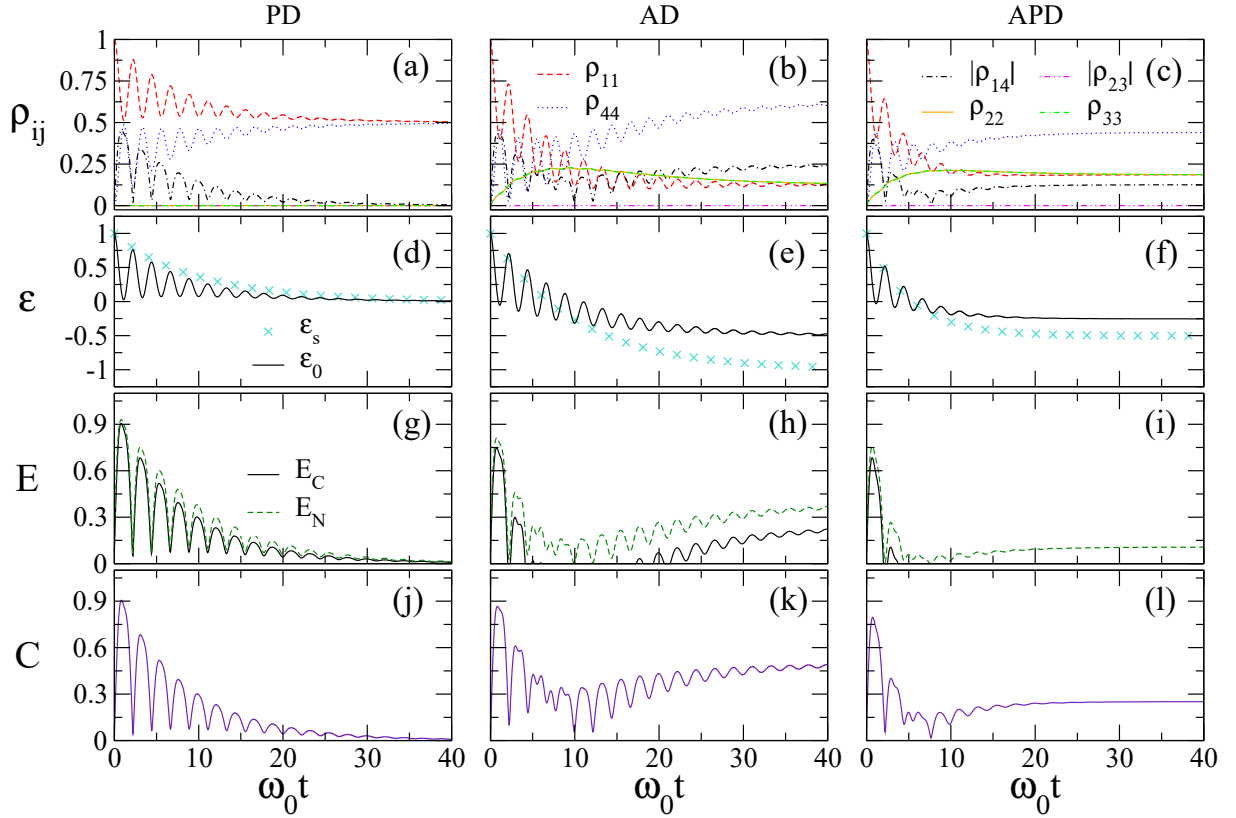


Figura 7 – Aqui analisamos as mesmas quantidades físicas apresentadas na Fig. 6, a diferença é o estado inicial  $\rho_{11} = 1$ . Note a considerável variação no perfil dos resultados AD e APD entre essas figuras.

parâmetros, a tendência natural é que a energia  $\varepsilon_0(t)$  oscile entre os valores  $-1$  e  $0$  (em média  $-0,5$ ), e que  $\varepsilon_s(t) = -1$  se mantenha constante para todo tempo, conforme o painel superior da Fig. 5. Ao observar a segunda linha da Fig. 6, apenas no caso AD (e) em que  $\varepsilon_s(t)$  atinge o valor estacionário  $\varepsilon_s(t) = -1$ . Além disso, ainda em AD  $\varepsilon_0$  tende ao valor médio  $-0,5$ , enquanto que para os outros dois ruídos os respectivos valores finais são maiores que a média, sendo  $\varepsilon_s \rightarrow \varepsilon_0 \rightarrow 0$  para PD (d) e  $\varepsilon_0 \rightarrow -0,25$ ,  $\varepsilon_s \rightarrow -0,5$  para APD (f). Outro ponto relevante para as condições observadas na Fig. 6, para todos os ruídos o termo  $\rho_{23}(t) = 0$  é nulo, logo  $\varepsilon_s(t) = \rho_{11}(t) - \rho_{44}(t) - 2\Omega_R \text{Re}[\rho_{14}(t)]$  (combinando as Eqs. (2.42) e (2.43)). Dessa expressão fica claro que em AD existe uma compensação entre a variação de  $\rho_{11}(t) - \rho_{44}(t)$  e o termo  $-2\Omega_R \text{Re}[\rho_{14}(t)]$ , pois  $\rho_{14}$  é justamente a coerência entre tais estados do sistema. Isso evidencia o fato de que o balanço energético do sistema depende do tipo de ruído existente, sendo naturalmente algo já conhecido [47], no entanto, tal fenômeno não tem sido explorado na literatura de controle.

Agora, novamente observe o comportamento da matriz densidade na primeira linha da Fig. 6. Veja como o caso PD estabiliza-se para o estado de mistura estatística  $\rho = 1/2(|1\rangle\langle 1| + |4\rangle\langle 4|)$  (decorência completa), levando ao aumento da energia do sistema  $\varepsilon_s$ . Desse modo, os *qubits* encontram-se em seus “graus de liberdade” internos, dado que  $\varepsilon_s \rightarrow \varepsilon_0$ . Em contrapartida, em AD a tendência é que o ambiente ‘drene’ a energia do

sistema, contudo, nesse exemplo o sistema já parte do seu estado fundamental (veja a Eq. (2.45)), então o que ocorre é simplesmente o amortecimento das oscilações de  $\varepsilon_0$ , que estabiliza em seu valor médio no instante final. Um comportamento semelhante é observado em APD ( $f$ ), porém as energias finais são uma média entre PD e AD.

Analisamos também as medidas de concorrência ( $E_C$ ) (linha sólida) e negatividade ( $E_N$ ) (linha tracejada) ( $g - i$ ), e na última linha, a coerência ( $C$ ) ( $j - l$ ) do sistema. De um modo geral, o comportamento é oscilatório e amortecido pelos ruídos correspondentes. Como já observado na literatura [117, 67, 68, 69], no caso PD ( $g, j$ ) todas as quantidades medidas tendem rapidamente a zero, ao passo que em AD ( $h, k$ ) é atingido assintoticamente valores finais estáveis. O maior e mais estável nível de concorrência ( $E_C$ ) no sistema é observado em AD em ( $h$ ). O resultado mais interessante é aquele em que adicionamos AD com o ruído PD (APD), pois o sistema apresenta certo grau de coerência ( $C$ ) mesmo sem a realização de controle quântico. Isto indica a existência notável de uma interferência construtiva entre os ruídos quando o campo externo é aplicado (veja, por exemplo, [117, 118]). Além disso, nos casos de AD e APD temos que  $E_N > 0$ , um bom indício da presença de correlações quânticas no sistema [119].

Com a finalidade de compararmos tais resultados de outra perspectiva, evoluímos os *qubits* usando o estado inicial diferente, mais precisamente  $\rho_{11} = 1$  (veja a Eq. (2.46)) de acordo com a Fig. 7. Aqui, a energia do sistema total oscilará entre +1 e 0 enquanto não houver acoplamento com o ambiente. Ao contrário do estado  $\rho_{44} = 1$ , o comportamento de PD implica no decréscimo da energia inicial do sistema  $\varepsilon_s$ , conforme exposto na Fig. 7 (d). Em APD e AD ocorre o análogo, de acordo com (e) e (f). Para todos os ruídos, ambas as energias finais estabilizam-se para os mesmos valores obtidos na Fig. 6, ou seja, com  $\varepsilon_s \rightarrow \varepsilon_0 \rightarrow 0$  para PD,  $\varepsilon_0 \rightarrow -0,5$  e  $\varepsilon_s \rightarrow -1$  em AD, e por fim,  $\varepsilon_0 \rightarrow -0,25$  e  $\varepsilon_s \rightarrow -0,5$  para APD. Aparentemente, esse comportamento parece estar em desacordo com o observado na Fig. 2. Contudo, naquele exemplo não havia campo externo aplicado, e é justamente a presença do campo que gera coerência entre os estados do sistema, fazendo com que o elemento  $\rho_{14}(t)$  seja não nulo. Logo, a atuação do potencial também afeta a variação das energias finais.

Finalizando a discussão dessa seção, também comparamos os resultados de emaranhamento e coerência da Fig. 7. Aqui, o caso PD exhibe o mesmo perfil observado nas Figs. 6 ( $g, j$ ). A diferença emerge em AD a partir do instante  $\omega_0 t \approx 5$ , em que a concorrência ( $E_C$ ) é praticamente destruída, assim como a negatividade ( $E_N$ ). Como o sistema parte de um estado excitado, à medida que os *qubits* evoluem o ambiente AD tende a amortecer as populações  $\rho_{ii}$  para estados menos energéticos. No entanto, o campo atua ao mesmo tempo induzindo a criação de coerência no sistema (note que  $\rho_{14}$  é não nulo em (b) e o quão estável está a coerência ( $C$ ) em (k)), de modo que após tal interferência construtiva induz correlações entre os *qubits* para  $\omega_0 t > 20$ . Em APD ( $i, l$ ) o comportamento é análogo e



ainda temos a vantagem de suprimir a forte atenuação de PD para  $\omega_0 t > 15$ . Um aspecto recorrente em APD, desde os resultados anteriores, é o fato de que os valores finais são aproximadamente uma média dos obtidos para PD e AD.

### 2.5.3 Controle de População do Estado Excitado de $Q_1$

Apresentaremos a seguir o controle de trajetória da população do primeiro *qubit* no estado excitado para diferentes probabilidades de ocupação, no intervalo de  $0 \leq t \leq 40$  com a largura do passo no valor de  $\delta t = 0,04$ . O passo temporal corresponde ao intervalo de tempo necessário para a modulação do perfil de intensidade do pulso de laser que irá interagir com o sistema de interesse. Assumindo o período de evolução total indicado acima, teremos ao todo mil intervalos. A trajetória de controle a ser estudada é definida pela função

$$S(t) = S_0 \arctan\left(\frac{\omega_0 t}{10}\right), \quad (2.47)$$

onde os valores de  $S_0$  escolhidos estão no intervalo  $S_0 = \{0,08 - 0,40\}$ , com a finalidade de estudarmos diferentes níveis de população do estado excitado e como isto influencia o emaranhamento do sistema. Tal curva já foi utilizada na literatura [100, 118] devido ao perfil suave para a transição de população e que, conseqüentemente, não exigirá variações rápidas no campo de controle.

Variamos numericamente o parâmetro  $\Omega_n$  com precisão de  $\delta\Omega_n = 10^{-5}$ , a fim de selecionar a frequência do campo externo o suficiente para tornar  $\langle \rho_{ee_1} \rangle(t)$  igual a trajetória dada pela Eq. (2.47). O sistema parte do estado fundamental  $\rho_{44} = 1$ , e as soluções adotadas em todos os casos possuem o erro numérico de  $|S(t) - \langle \rho_{ee_1} \rangle(t)| \leq 0,0001$ , indicando uma alta qualidade na busca por tais soluções. O observável deve ser escrito na forma

$$\langle \rho_{ee_1} \rangle(t) = \rho_{11}(t) + \rho_{22}(t). \quad (2.48)$$

Há duas razões por essa definição: (i) a Eq. (A.22) do Apêndice A é a expressão para  $\rho_{ee_1}$  da matriz reduzida de  $Q_1$ . (ii) a Eq. (2.5) da Seção 2.1 é o valor esperado do observável para a matriz densidade no estado  $X$ , e fazendo  $\mathcal{O}_{11} = \mathcal{O}_{22} = 1$  e todos outros termos nulos, obtemos exatamente a Eq. (2.48).

Na Fig. 8 temos o controle de  $\langle \rho_{ee_1} \rangle(t)$  para diferentes trajetórias (de acordo com a Eq. (2.47)) para as interações por (a) PD, (b) AD e (c) APD. Em todos os casos o controle é possível até o final da trajetória enquanto  $\rho_{ee_1}(t) < 0,5$ . Isto posto, perdemos o controle sobre o sistema em  $\omega_0 t \approx 30$ , pois neste instante a população atinge  $\rho_{ee_1}(t) \approx 0,5$ . Realizamos diversos testes numéricos com diferentes estados iniciais  $\rho(0)$ , e verificamos que o controle é perdido sempre que  $\rho_{ee_1}$  se aproxima de 0,5. Portanto, isso ocorre justamente para o caso em que  $S_0 = 0,4$  (estrela) nas Figs. 8 (a – c).

Para um melhor entendimento desse resultado, adicionamos os gráficos da matriz densidade total  $\rho_{ij}$  para  $S_0 = 0,32$  (triângulo) em  $(d-f)$ , e  $S_0 = 0,4$  (estrela) em  $(g-i)$ . Observe que para as três interações, enquanto há coerência no sistema e os  $\rho_{ii}$  são distintos entre si, o controle é realizado em todo o intervalo de tempo conforme  $(d-f)$ . No painel  $(d)$ , observe que em essência somente os termos  $\rho_{44}$  e  $\rho_{11}$  contribuem para a dinâmica do sistema ( $|\rho_{14}|$  é muito pequeno), onde  $\rho_{ee_1} = \rho_{11}$  em PD quando  $S_0 = 0,32$ . Agora, quando  $S_0 = 0,40$  o sistema tende ao estado de mistura  $\rho(\omega_0 t \approx 30) = (\rho_{11} + \rho_{44})/2$  em  $(g)$ . Em suma, o controle só é mantido enquanto a trajetória é menor do que  $1/2$ . Para ambos AD e APD a solução de controle encontrada para o problema resulta em  $\rho_{11}$  aproximadamente a  $\rho_{22} \approx \rho_{33}$ , e conseqüentemente, o valor esperado de  $\rho_{ee_1} \approx 2\rho_{11}$  aumentando e  $\rho_{44} \approx 1 - 3\rho_{11}$  reduzindo com o tempo  $t$ . Dessa forma, para a trajetória alvo proposta, o controle é possível enquanto  $\rho_{44} > \rho_{11}$ , de acordo com  $(e, f)$ . Caso contrário, teremos  $\rho(\omega_0 t \approx 30) = (\rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{33} + \rho_{44})/4$  em AD e APD, de acordo com  $(h, i)$ .

Ainda na Fig. 8 expomos o valor médio das energias para nos auxiliar em nossa análise. No caso PD em  $(j)$  temos  $\varepsilon_0(t) \approx \varepsilon_s(t)$  em todas as curvas, sobrepondo-se as linhas lisas e com símbolo de ‘×’. Novamente, dada a natureza desse ruído, a coincidência nos valores de energia originam da destruição dos termos  $\rho_{ij}(t)$  na expressão  $\varepsilon_s(t) = \rho_{11}(t) - \rho_{44}(t) - 2\Omega_R \text{Re}[\rho_{14}(t)]$ . No caso do ruído AD, em  $(k)$ , a proporcionalidade entre a taxa de variação de  $\rho_{14}(t)$  e o termo  $\rho_{11}(t) - \rho_{44}(t)$  torna os valores de energia do sistema  $\varepsilon_s(t)$  estacionários para todos os  $S_0$ 's. Para APD em  $(l)$ , as curvas dos valores médios das energias simplesmente representam a composição do que ocorre em PD e AD. Em geral, quando o controle é perdido, a energia dos *qubits* tende a  $\varepsilon_0 \rightarrow 0$  para todos os casos.

Na Fig. 9 analisamos a concorrência  $E_C$   $(a-c)$ , negatividade  $E_N$   $(d-f)$  e coerência  $C$   $(g-h)$  do sistema de acordo com os mesmos parâmetros da Fig. 8. Claramente vemos que PD é o pior tipo de ruído para se manter o emaranhamento e coerência no sistema. Tanto em AD quanto APD os *qubits* permanecem emaranhados e coerentes – com diferentes níveis – enquanto  $\rho_{ee_1}(t) < 0,5$ . Observe que a concorrência atinge valores maiores e mais estáveis para baixos níveis de população (ou seja, quando  $S_0$  é pequeno). Apesar das distinções entre as medidas de correlações do sistema, principalmente em AD e APD, os valores de negatividade são consideravelmente bons enquanto o controle é possível. Logo, a técnica empregada representa um método interessante na preparação de estados para a destilação de emaranhamento [119].

Na Fig. 10 exibimos os campos de controle quando a interação é  $(a, d)$  PD,  $(b, e)$  AD e  $(c, f)$  APD para o controle de população exposto na Fig. 8. As curvas  $(a)$ ,  $(b)$  e  $(c)$  revelam um perfil de campo suave e sem variações bruscas, pois correspondem a valores em que  $\rho_{ee_1} < 0,5$ . Separamos em outro gráfico os casos  $(d) - (f)$  onde  $\rho_{ee_1} \approx 0,5$ , pois são os casos onde o controle foi perdido. À medida que a evolução tende ao instante de ruptura  $\omega_0 t \approx 30$ ,  $\Omega_R$  sofre uma mudança abrupta de intensidade. O protocolo de controle

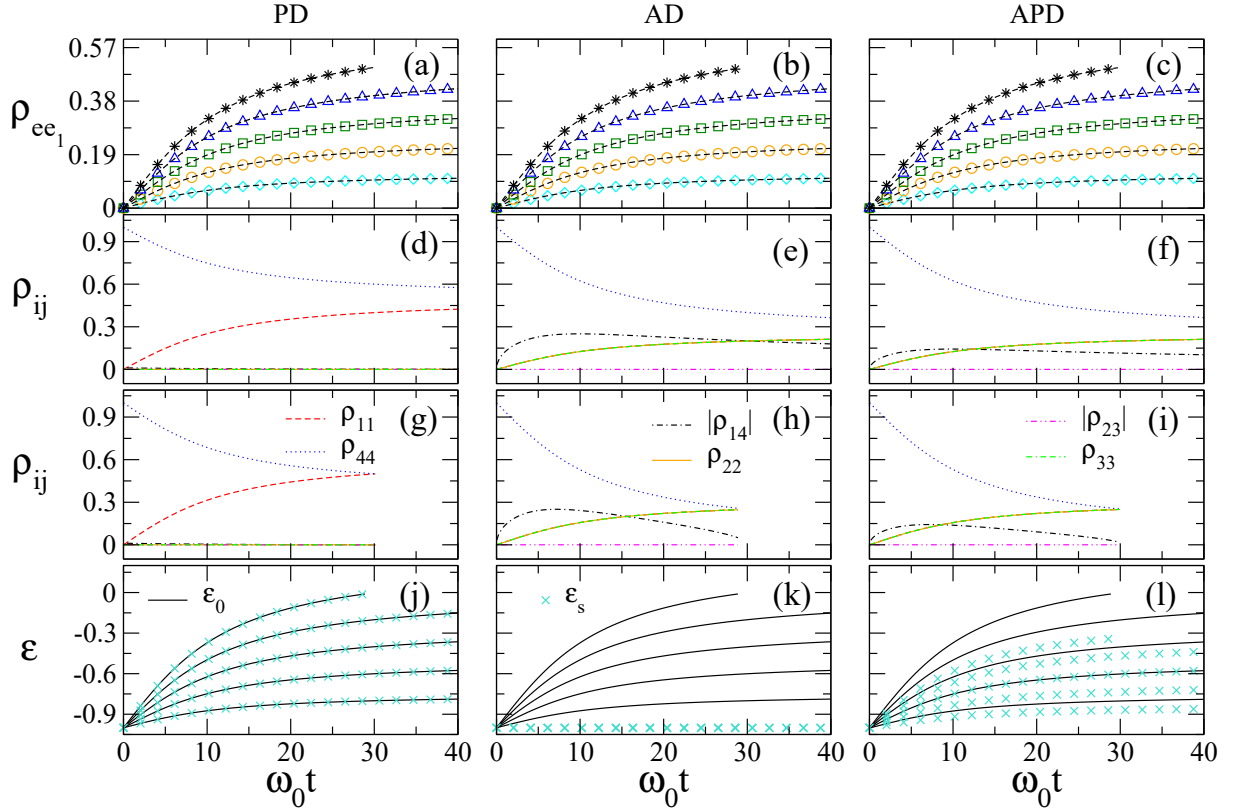


Figura 8 – Resultado do controle da trajetória em (a) – (c) para  $\rho_{ee1} = \rho_{11} + \rho_{22}$  (com símbolos) comparada com a trajetória alvo da Eq. (2.48) (curvas pontilhadas) sob três tipos de ruídos. Os valores de  $S_0$  são: 0,08 (diamante), 0,16 (círculo), 0,24 (quadrado), 0,32 (triângulo) e 0,40 (estrela). Os elementos correspondentes  $\rho_{ij}(t)$  para  $S_0 = 0,32$  estão em (d) – (f), e para  $S_0 = 0,4$  (g) – (i). Em (j) – (l) estão as energias  $\varepsilon_s$  e  $\varepsilon_0$  associadas a evolução nos painéis (a) – (c). Exatamente como  $\rho_{ee1}$ , as energias tendem a aumentar com  $S_0$  (então, a ordem relativa das curvas com relação a  $S_0$  é mesma da apresentada em (a) – (c)). Observe que em (j)  $\varepsilon_s$  sempre coincide com  $\varepsilon_0$  ao passo que em (k)  $\varepsilon_s = -1$  para todo  $S_0$ .

é encerrado após o último ponto obtido, pois não há mais a possibilidade de manter a população de  $Q_1$  seguindo a trajetória alvo, afinal, tal tarefa demandaria uma quantidade infinita de energia do potencial externo, o que na prática é inviável.

#### 2.5.4 Controle de Emaranhamento – Concorrência $E_C$

Na seção anterior discutimos os principais aspectos do controle de população de um *qubit* através da técnica proposta no início deste capítulo. Além disso, vimos que apesar da negatividade  $E_N$  ser mantida relativamente alta ao longo do controle de população, dependendo da trajetória alvo no tempo,  $E_C$  pode reduzir de modo significativo. Logo, investigamos a viabilidade em controlar a própria medida de emaranhamento do sistema.

Visando demonstrar isso, primeiro ressaltamos que  $E_C$  é o valor máximo entre  $E_{C_1}$  e  $E_{C_2}$ , e portanto, podemos selecionar previamente um deles a fim de conduzir a

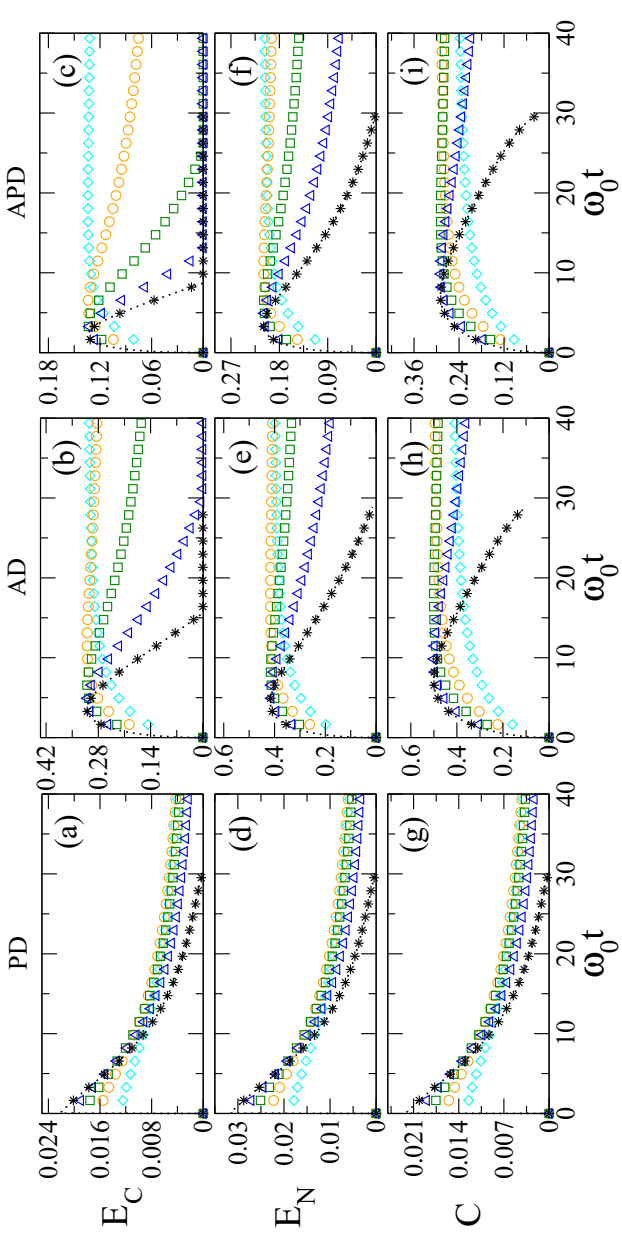


Figura 9 – Emaranhamento do sistema para o controle de  $\rho_{ee_1}$ , exposto na Fig. 8, medido por concorrência e negatividade. Os valores de  $S_0$  de tais curvas são: 0,08 (diamante), 0,16 (círculo), 0,24 (quadrado), 0,32 (triângulo) e 0,40 (estrela). Na terceira linha, a coerência do sistema para o controle de  $\rho_{ee_1}$ . Na coluna  $(a, d, g)$  estão os dados para o ruído é PD, em  $(b, e, h)$  AD e em  $(c, f, i)$  os casos APD.

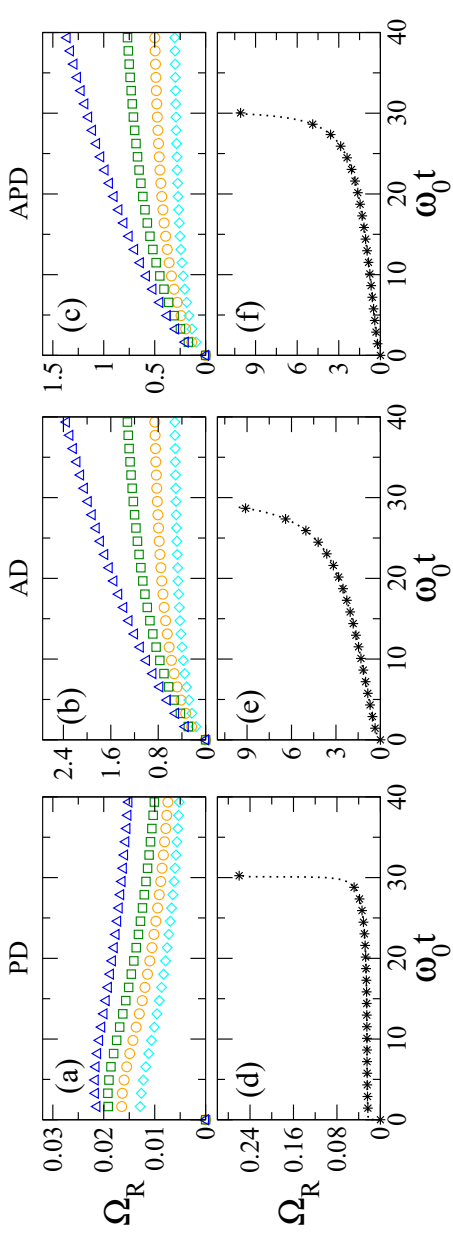


Figura 10 – Perfil do campo externo obtido via controle paramétrico de trajetória para os casos PD  $(a, d)$ , AD  $(b, e)$  e  $(c, f)$  APD associadas as funções alvo expostas na Fig. 8. Os valores de  $S_0$  de tais curvas são: 0,08 (diamante), 0,16 (círculo), 0,24 (quadrado), 0,32 (triângulo) e 0,40 (estrela).

concorrência para um valor desejado, e ao mesmo tempo, mantendo a outra pequena. Examinando a Eq. (2.36), vimos que se  $\rho_{11} + \rho_{44}$  é grande (então  $\rho_{22} + \rho_{33} \approx 0$ ), podemos manipular a dinâmica de  $E_{C_2}$  controlando  $|\rho_{14}|$ . Manipulando a Eq. (2.36), chegamos em

$$\rho_{22} \rho_{33} = \frac{E_{C_2}^2 + 4 |\rho_{14}| (|\rho_{14}| - E_{C_2})}{4}. \quad (2.49)$$

Se fizermos na equação acima  $\rho_{22} \rho_{33} \approx 0$  e  $E_{C_2}(t) = S(t)$  (exatamente a mesma trajetória de controle da Eq. (2.47)), acabamos encontrando um valor aproximado tal que  $|\rho_{14}| \approx \sqrt{|\rho_{14}|}$

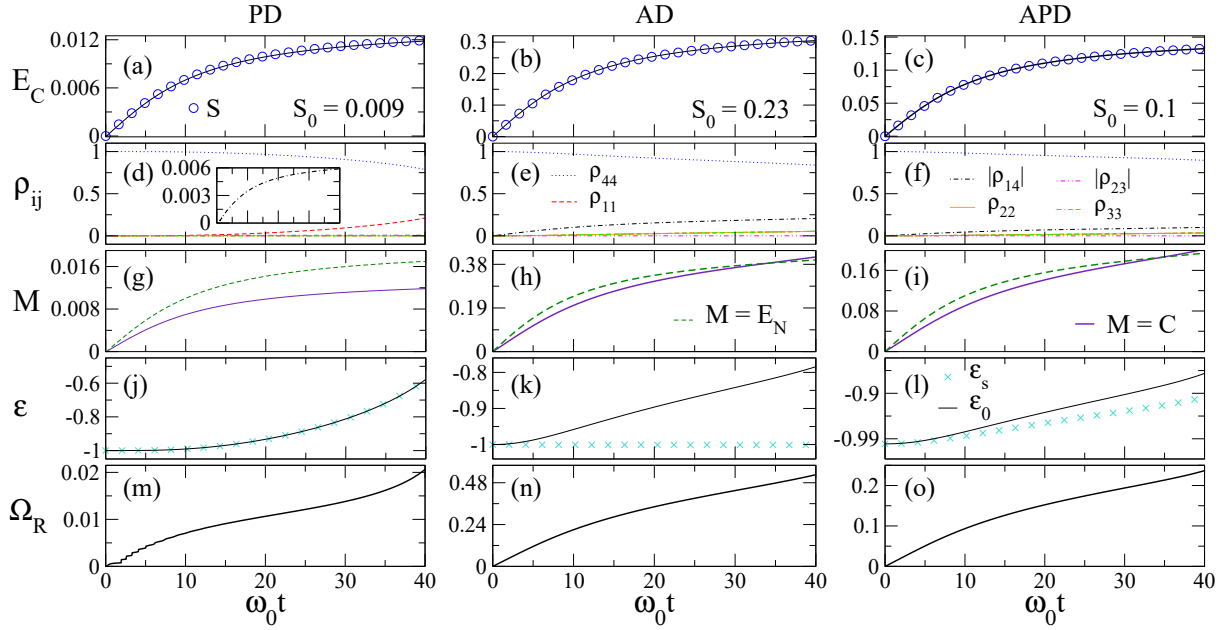


Figura 11 – Controle de emaranhamento com a trajetória alvo dada pela Eq. (2.47), quando o sistema interage com o ambiente em (a) via PD com  $S_0 = 0,009$ , (b) via AD com  $S_0 = 0,23$  e (c) via APD com  $S_0 = 0,10$ . Os elementos  $\rho_{ij}$ 's correspondentes em (d – f). Resultados de negatividade (linha tracejada) e coerência (linha sólida) em (g – i), respectivamente. Na quarta linha, a energia do sistema inicial ( $\varepsilon_0$  - linha sólida) e energia do sistema total ( $\varepsilon_s$ , símbolo  $\times$ ) nos gráficos (j – l), e na última linha as soluções de campo para cada ruído em (m – o).

(a barra acima indica o termo controlado) e levando ao controle conforme esperado. Outro ponto interessante é, se  $\rho_{11}$  ou  $\rho_{44}$  forem próximos de 1, também chegaremos ao mesmo resultado.

A estratégia mais adequada é manter  $\rho_{44} \approx 1$ , pois o estado inicial do sistema já é  $\rho_{44}(0) = 1$ . Agora, basta aplicarmos o controle quântico paramétrico de trajetória, isto é, em cada instante  $t = t_n$  buscamos um conjunto de parâmetros do potencial externo que façam  $|\rho_{14}|$  aproximadamente  $|\overline{\rho_{14}}|$ . Então, salvamos todos dados no qual a distância  $|S(t) - E_{C_2}|$  é mínima, e sempre verificando se  $E_{C_2} \geq E_{C_1}$  [118].

Antes de exibirmos os resultados, destacamos que cada ruído vai afetar o sistema de forma diferente e isso implicará em diferentes perfis de campo externo. Por exemplo, o ruído de *pure dephasing* (PD) é o mais difícil de controlar, logo a criação de emaranhamento é modesta nesse caso. Por outro lado, AD é muito mais fácil de manipular. Um resultado interessante emerge quando adicionamos AD com PD, também conhecido como ruído APD. Esta é uma maneira viável para melhorar o controle de  $E_C$  sempre que a presença de PD é inevitável [110].

Apresentamos na Fig. 11 os resultados para o controle indireto de emaranhamento quando o sistema interage com o ambiente (a) via PD com  $S_0 = 0,009$ , (b) via AD sendo

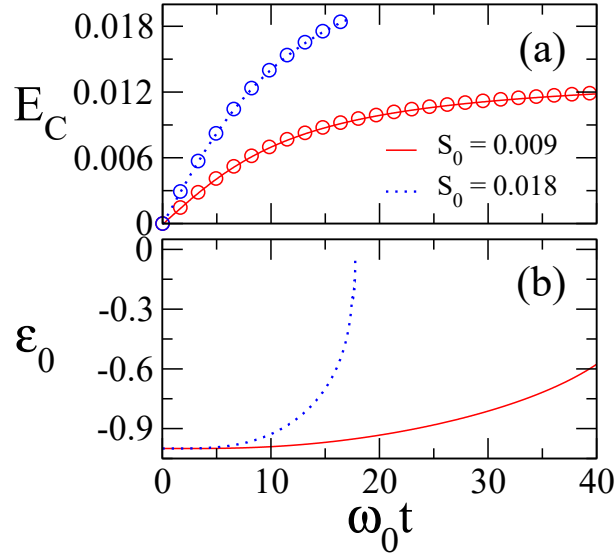


Figura 12 – Controle de emaranhamento  $E_C$  em (a) quando o sistema interage com o ambiente via PD para diferentes trajetórias,  $S_0 = 0,009$  (linha sólida) e  $S_0 = 0,018$  (linha tracejada). No painel (b) estão as curvas de energia para ambos  $S_0$ 's. Note que demandar o dobro de emaranhamento implica no aumento acentuado na medida de energia dos *qubits* para zero, assim resultando na perda do controle.

$S_0 = 0,23$  e (c) via APD onde  $S_0 = 0,10$ , sendo o maiores possíveis até  $\omega_0 t = 40$ . Em todos os casos conseguimos controlar o emaranhamento, mas em diferentes níveis ( $E_{PD} = 0,012$ ,  $E_{AD} = 0,305$ ,  $E_{APD} = 0,132$ ). O caso em que já esperávamos ser mais difícil de se gerar emaranhamento foi o PD em (a), dada a sua natureza de *pure dephasing*. Em comparação aos outros tipos de ruído, esse apresentou o menor valor. Todavia, se relembrarmos como o sistema ‘reagiu’ ao controle de população, de acordo com a Fig. 9 (c), notamos que em tempos na ordem de  $\omega_0 t \geq 8$  o emaranhamento naturalmente tendia a zero. Novamente observamos o quanto o ruído AD interage construtivamente sobre PD na geração de emaranhamento, pois de acordo com o resultado APD em (c), produzimos um acréscimo de  $\approx 11\%$  desse tipo de correlação no sistema. Entretanto, segundo a Fig. 12, se tentarmos dobrar a geração de emaranhamento diretamente (por exemplo, para PD com  $S_0 = 0,018$ ), isso acarretará na perda de controle do sistema em  $\omega_0 t \approx 18$  (com  $E_C \approx 0,02$ ). Notamos que o controle é possível enquanto a energia média dos *qubits*  $\varepsilon_0(t)$  é diferente de zero.

A dinâmica dos  $\rho_{ij}$ 's evoluem da maneira análoga aos exemplos discutidos no início desta seção, conforme exposto nas Figs. 11 (d – f). Logo,  $\rho_{11} + \rho_{44}$  é grande,  $\rho_{22} + \rho_{33}$  é pequeno e o comportamento de  $|\rho_{14}|$  é análogo a concorrência  $E_C$ , onde  $|\rho_{23}| = 0$  em todos os exemplos. Agora, avaliando as medidas de coerência (linha sólida) e negatividade (linha tracejada), apontado pela letra  $M$  na terceira linha da Fig. 11, notamos que o controle de  $E_C$  gerou um ‘efeito colateral’ positivo sobre tais medidas para todos os ruídos, pois ambos  $E_N$  e  $C$  aumentam, de acordo com (g – i). Tal comportamento tem forte contraste acerca aos resultados da evolução sob campo constante da Fig.9, e também quando controlamos

a população dos *qubits* na Fig. 6.

Estendendo nossa análise, assim como nas seções anteriores, observamos o valor médio da energia do sistema em  $(j - l)$ . No caso de PD novamente  $\varepsilon_0(t)$  coincide com  $\varepsilon_s(t)$ , ou pelo menos aparenta ser. Por exemplo, das Eqs. (2.43) e (2.42) fica evidente a relação entre a coerência do sistema, o campo externo e a energia. A forte atenuação dos elementos  $\rho_{ij}$  limitam a contribuição do campo para  $\varepsilon_s(t)$  em PD, tornando a dinâmica praticamente idêntica a  $\varepsilon_0(t)$ . Como AD afeta mais os termos  $\rho_{ii}$ , a energia dos *qubits*  $\varepsilon_0(t)$  acaba sofrendo maiores variações, de acordo com  $(k)$ . Outro aspecto fundamental a respeito da energia do sistema ser sempre  $\varepsilon_s(t) = -1$  decorre da Eq. (2.44), pois o estado  $|gg\rangle$  é uma combinação linear dos autoestados do Hamiltoniano total ( $|F_\alpha \pm\rangle$ ). A atuação de AD é dissipar energia, mas como o sistema inicia no estado fundamental  $\rho_{44} = |gg\rangle\langle gg|$ , o sistema permanecerá nesse estado estacionário ao longo da sua evolução. Note que isso não se repete em APD, pois ambos ruídos afetam todos os elementos da matriz densidade, e, portanto, o campo acaba contribuindo com o balanço energético de  $\varepsilon_s(t)$  e também desvia parcialmente a dinâmica do estado estacionário observado em AD. Finalmente, as soluções encontradas para o campo de controle estão dispostas nos painéis  $(m - o)$  da Fig. 11, exibindo um perfil suave em todos os casos.

Mencionamos ao longo da tese sobre aumentar o tempo em que o sistema permanece emaranhado, e uma questão natural surgiu ao aplicarmos a nossa técnica: É possível estabilizar a geração de emaranhamento para intervalos de tempo cada vez maiores? Basta continuar a leitura que responderemos. Primeiramente, a função proposta para a trajetória alvo assintoticamente atinge o valor  $S(t \rightarrow \infty) = \pi S_0/2$  na Eq. (2.47). Contudo, para  $\omega_0 t \approx 1000$  a função  $S(t)$  já atinge praticamente 99% desse valor máximo. Sendo assim, considerando todos os ruídos estudados até o momento, encontramos diferentes valores de  $S_0$  que sustentam o emaranhamento dos *qubits* até esse intervalo de tempo, cujo resultado está exposto nas Fig. 13  $(a - c)$ . Na prática, ainda somos capazes de manter o controle em intervalos ainda maiores do que  $\omega_0 t \approx 1000$  (não exibiremos tais resultados). Em algumas simulações, testamos que PD pode atingir  $\omega_0 t \approx 1700$ , e, AD e APD são atingidos valores acima de  $\omega_0 t \approx 3000$ . Para responder tal comportamento, observe as curvas de energia indicadas na linha  $(d - f)$  e também dos campos de controle em  $(g - h)$ . A taxa de crescimento dessas quantidades é maior do que a da trajetória alvo  $S(t)$  em PD, e novamente, a tendência é que a energia dos *qubits* se aproxime cada vez mais de zero à medida que o tempo aumenta, e além disso, a amplitude do campo acompanha esse crescimento na intensidade até o momento de ruptura. Em AD e APD tanto a energia quanto o campo variam de forma equivalente a  $S(t)$ , o que proporciona um controle quântico para intervalos de tempo consideravelmente maiores.

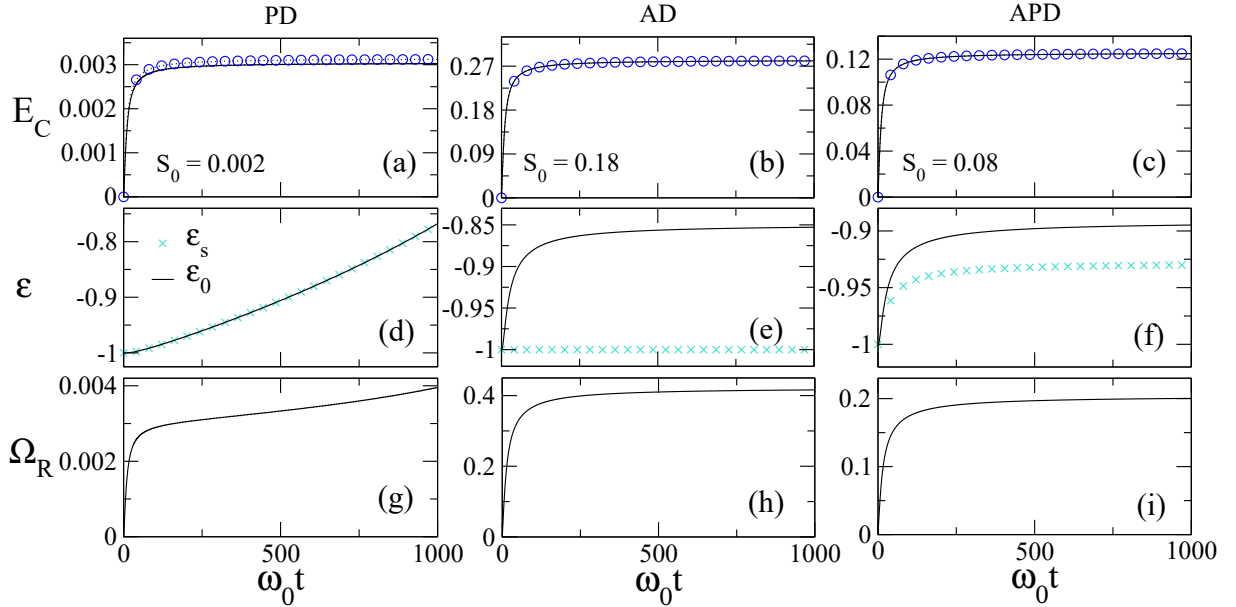


Figura 13 – Controle de emaranhamento até  $\omega_0 t = 1000$  quando o sistema interage com o ambiente por PD (a, d, g) com  $S_0 = 0,002$ , via AD (b, e, h) com  $S_0 = 0,18$  e APD em (c, f, i) com  $S_0 = 0,08$ .

### 2.5.5 Análise da Distinguilidade Durante o Controle

Assumimos ao longo do capítulo que os *qubits* são idênticos e que estão sob a mesma interação com o ambiente ( $\Gamma = \Gamma_1 = \Gamma_2$ ). Tal escolha influencia diretamente no controle quântico, pois ocasiona mudanças na medida de distinguibilidade e fidelidade do sistema (conforme a Seção 2.4.5). Embora o campo de controle atue diretamente sobre o *qubit*  $Q_1$ , para os resultados apresentados até o momento a distinguibilidade é sempre nula, com  $T_D = 0$ . Repare que de fato  $\rho_{22} = \rho_{33}$  nas Figs. 2, 3, 6–8, 11 (se necessário, revise a Eq. (2.39)). Entretanto, ao assumir interações distintas de cada  $Q_n$  com o ambiente dissipativo implica em valores não nulos de distinguibilidade  $T_D$ , isto é, fazendo  $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$ .

Antes de expor nossos resultados, vamos comentar a respeito de algumas aplicações em informação quântica que demandam alta fidelidade, ou valores de distinguibilidade iguais ou muito próximos de zero. Determinadas portas lógicas eficientes podem atingir valores maiores do que 99,99% de fidelidade [120, 121], e protocolos de confiáveis para a transmissão de informação quântica em torno de 99,9994% [122]. Contudo, notadamente controlar a dinâmica dos *qubits* mantendo-os indistinguíveis é uma tarefa desafiadora, especialmente em métodos baseado na otimização de funcionais [123].

A fim de avaliar como esquema de controle proposto neste capítulo influencia na medida de  $T_D$ , consideramos o valor de  $\Gamma_1 = 0,1$  fixo e somente variamos  $\Gamma_2$  no intervalo  $0 \leq T_D \leq 2\Gamma_1$ , enquanto os valores do campo externo são mantidos fixos em  $\varphi = 0$  e  $\Omega_R = 0,5$ . Apresentamos na Fig. 14 um mapa bidimensional da distinguibilidade (*trace distance*) para ambos os ruídos (a) AD e (b) APD. Não exibiremos os resultados de



PD, pois esse ambiente afeta somente os termos fora da diagonal, e conseqüentemente  $T_D$  é sempre nulo. Observe como  $T_D$  oscila em função de  $\Gamma_2$ , no entanto, atinge valores baixos em todo intervalo de tempo ( $T_D \approx 0,018$ ). Portanto, a fidelidade é sempre mantida consideravelmente alta ( $F \approx 0,982$ ), mesmo com a presença de um campo externo constante.

Aqui repetimos o controle de população da Fig. 8, mas alterando os valores das constantes de dissipação. Para  $Q_1$  configuramos  $\Gamma_1 = 0,1$  e  $\Gamma_2 = 0,07$  para  $Q_2$ . Essencialmente, se invertermos tais parâmetros ( $\Gamma_1 = 0,1$  e  $\Gamma_2 = 0,07$ ) o resultado será qualitativamente o mesmo. Os resultados desse controle são apresentados na Fig. 15. Destacamos primeiramente a qualidade das populações controladas  $\rho_{ee_1}$  no que tange as respectivas trajetórias alvo  $S(t)$  (tracejado) em (a) e (b), assim como o realizado anteriormente na Fig. 8. O controle ainda só é possível para todo o intervalo  $0 \leq \omega t \leq 40$  para todos os  $S_0$ , com exceção de quando  $S_0 = 0,4$  que ocorre a ruptura em  $\omega_0 t \approx 30$ . Na linha seguinte exibimos os elementos de matriz  $\rho_{ij}$  para  $S_0 = 0,32$  (c – d), e para  $S_0 = 0,40$  (e – f). A diferença começa a surgir nesses gráficos, onde visivelmente os elementos da diagonal  $\rho_{ii}$  exibem alguns picos mais acentuados em  $\omega_0 t \approx 8,5$ . Note que tais variações também se manifestam nas energias  $\varepsilon_0(t)$  e  $\varepsilon_s(t)$ , de acordo com (g – h).

As medidas de emaranhamento  $E_C$ , distinguibilidade  $T_D$  e as soluções de campo  $\Omega_R$  estão organizadas na Fig. 16. Em geral, a evolução de  $E_C$  em (a – b) tende aos mesmos valores da Fig. 8 (b – c) para ambos os ruídos. Acerca da medida de  $T_D$ , as variações mais proeminentes ocorrem para os três maiores valores de  $S_0$  para AD (e), sendo mais acentuado em APD (f). No que diz respeito aos perfis do campo  $\Omega_R$ , indicamos por setas (e ampliações) nos painéis (e – h). Aqui demonstramos o quanto as soluções de campo influenciam na dinâmica das quantidades aqui analisadas, pois as variações na amplitude do campo que originam os picos observados na Fig. 15.

A fim de remover tais picos e obter resultados de controle melhores para o caso heterogêneo, decidimos incluir o parâmetro de fase  $\phi$  do laser que atua sobre  $Q_1$ . Note que em todos os exemplos expostos no capítulo consideramos essa fase nula, pois apenas a amplitude do campo  $\Omega_R$  era suficiente para controlar a população ou emaranhamento do sistema. No entanto, ao depararmos com o caso dos *qubits* interagindo de forma heterogênea com o ambiente, conseguimos no máximo os resultados expostos na Fig. 16 (conforme discutido no parágrafo anterior). Apresentamos na Fig. 17 as mesmas medidas de emaranhamento  $E_C$  (a)-(b), distinguibilidade  $T_D$  (c)-(d) e as soluções de campo  $\Omega_R$  (e)-(f) e (g)-(h). Observe a redução considerável dos valores de  $T_D$  em relação ao exemplo anterior, e também o fato do campo não apresentar ‘saltos’ na sua intensidade, pois nessa situação mantemos a fase constante no valor  $\varphi = 3\pi/2$  (determinada numericamente). Para evitar a repetição dos mesmos resultados, não vamos expor os dados de população, matriz densidade e energia, pois eles são idênticos ao caso homogêneo. Isso significa que

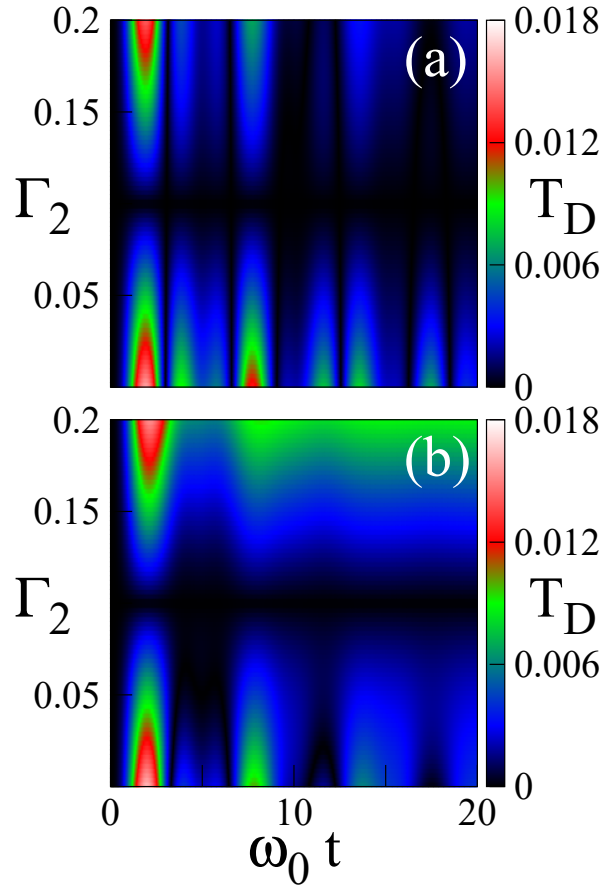


Figura 14 – Resultados para distinguibilidade quando  $\Gamma_1 = 0,1$  permanece fixo e  $\Gamma_2$  variando entre  $0, 1 \leq \Gamma_2 \leq 0,2$ . Apresentamos AD em (a) e APD em (b), onde negligenciamos o resultado PD por não sofrer nenhuma variação.

não há nenhum salto nos elementos  $\rho_{ii}$  (veja a Fig. 9). Na prática, a inclusão do parâmetro da fase do laser forneceu a coerência necessária para reduzir os efeitos do acoplamento distinto de cada um dos  $Q_n$ 's com o ambiente.

Encerramos esta seção confrontando esses últimos resultados com os exemplos anteriores. Primeiramente, o controle de trajetória dos *qubits* interagindo de forma heterogênea com o ambiente é mais difícil. Conforme mencionado ao longo do texto, estamos lidando com um problema inverso, e naturalmente podem existir muitas soluções distintas para  $\Omega_R(t)$  que satisfaçam a mesma trajetória  $S(t)$ . Nesse sistema identificamos regiões que existem poucas centenas de soluções, no entanto, um número que pode variar dependendo dos valores dos parâmetros, de poucas dezenas a poucos milhares. Nos cálculos, priorizamos as amplitudes de campo menores, bem como perfis mais suaves. Para  $\Gamma_1 = \Gamma_2$  normalmente encontramos soluções apropriadas mais rapidamente, no entanto, quando  $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$ , a busca numérica é relativamente mais dispendiosa. Não obstante, um mesmo campo que simultaneamente controle dois *qubits* sob diferentes taxas de dissipação de energia com o ambiente reduz o número soluções que atendam a todos os requisitos impostos. As curvas apresentadas nas Figs. 15 e 16 ainda são consideradas bons resultados, contudo, podemos

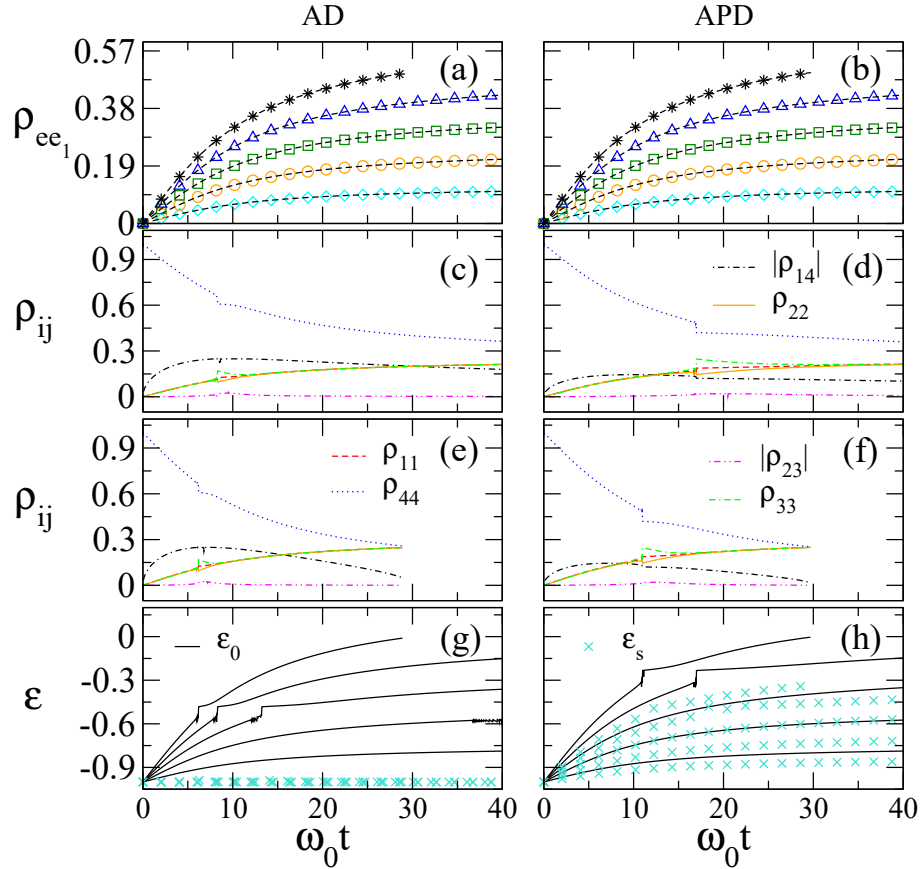


Figura 15 – Resultados para o mesmo controle de trajetória e condições utilizadas na Fig. 8, mas considerando um acoplamento heterogêneo dos *qubits* com o ambiente, no qual  $\Gamma_1 = 0,07$  e  $\Gamma_2 = 0,1$  (na Fig. 8 usamos  $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,1$ ).

observar na Fig. 17 como vasculhar o espaço de múltiplas soluções pode fornecer um resultado mais satisfatório.

## 2.6 DISCUSSÃO E CONSIDERAÇÕES FINAIS

No presente capítulo consideramos um novo método de controle particularmente simples, mas de efetividade notável, no controle de trajetória de dois qubits acoplados ( $Q_1$  e  $Q_2$ ) sob a influência de um ambiente markoviano. Implementamos numericamente a evolução temporal do sistema quântico em estado  $X$ , cujo controle, através de campos com perfil independente do tempo por partes, foi apropriadamente realizado em cada janela temporal  $\delta t$ .

Durante o controle, analisamos as medidas de energia dos *qubits* ( $\epsilon_0$ ) e a energia do sistema total (com o campo) ( $\epsilon_s$ ), assim como a concorrência, negatividade e distinguibilidade (e indiretamente a fidelidade, que é seu inverso). No que se refere aos ruídos, examinamos o amortecimento de fase (PD), que destrói os termos de coerência de  $\rho$ ; o amortecimento de amplitude (AD), que afeta o fluxo de energia do sistema com o meio, e atua principalmente nos termos diagonais de  $\rho$ , e a mistura de ambos os ambientes (APD),

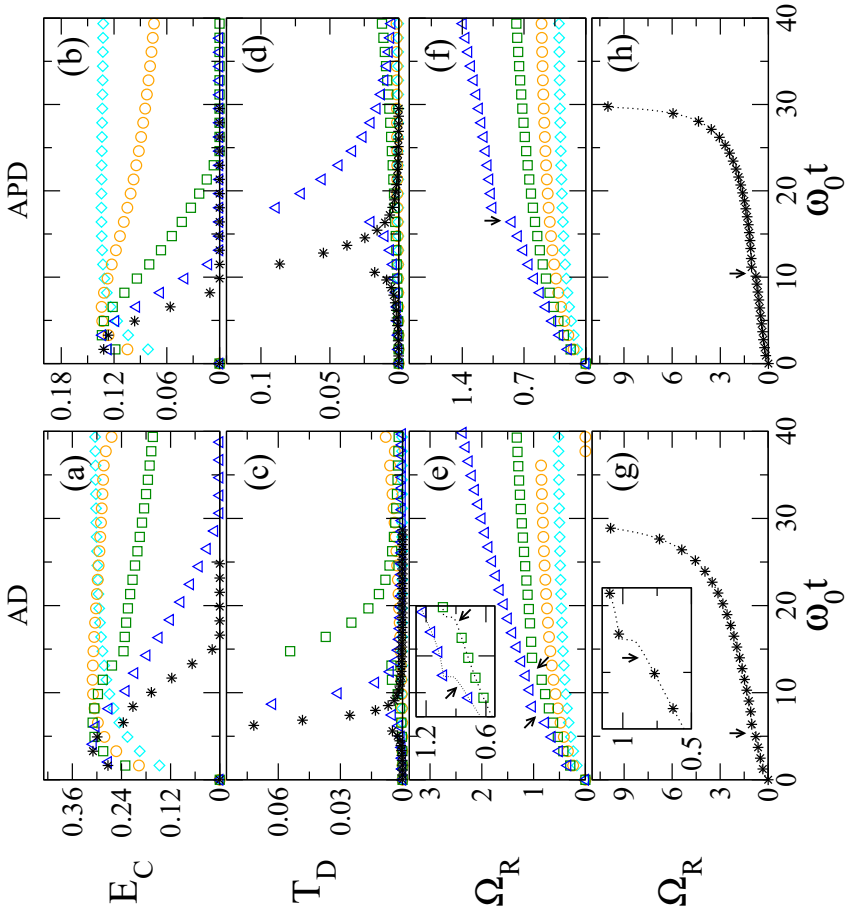


Figura 16 – Gráficos de concorrência  $E_C$  (a)–(b), distinguibilidade  $T_D$  (c)–(d) e os perfis de campo externo necessários (e)–(h) para o controle da Fig. 15. Os símbolos correspondem aos valores de  $S_0$ : 0,08 (diamante), 0,16 (círculo), 0,24 (quadrado), 0,32 (triângulo) e 0,40 (estrela). De modo análogo ao da Fig. 8, novamente para  $S_0 = 0,4$  o controle é permitido somente até  $\omega_0 t = 30$ . Os diferentes picos em  $T_D$  (também nos termos  $\rho_{jj}$  e energia  $\epsilon_0$  da Fig. 15) correspondem aos intervalos em que o controle  $\Omega_R$  sofre uma variação pequena, porém mais acentuada, em um curto intervalo de tempo. Eles são marcados por setas em (e)–(h) (e destacados como inserções em (e) e (g)).

que denominamos amortecimento de amplitude e fase.

Apesar de PD estar frequentemente ligado a perda de coerência, indiretamente ele também pode causar a perda, ou até mesmo ganho de energia, se um campo externo é aplicado (para uma discussão mais detalhada ver [118, 124]). Devido a sua capacidade de destruir termos fora da diagonal da matriz densidade, o ruído PD representa um tipo desafiador de interação para a geração de fontes de informação quântica: tais como emaranhamento e coerência. Em contrapartida, a energia é drenada mais intensamente para AD. Não obstante, se um simples campo de controle é aplicado, ao menos uma parcela de emaranhamento e coerência é preservada no sistema (de acordo com as Figs. 6 e 7).

Ao implementarmos o controle de população (na Fig. 8), vimos que as medidas de  $E$  e  $C$  tendem rapidamente a zero com o tempo em PD. Em AD isso é diferente, pois tais quantidades são mantidas relativamente altas (principalmente enquanto  $S_0$  é

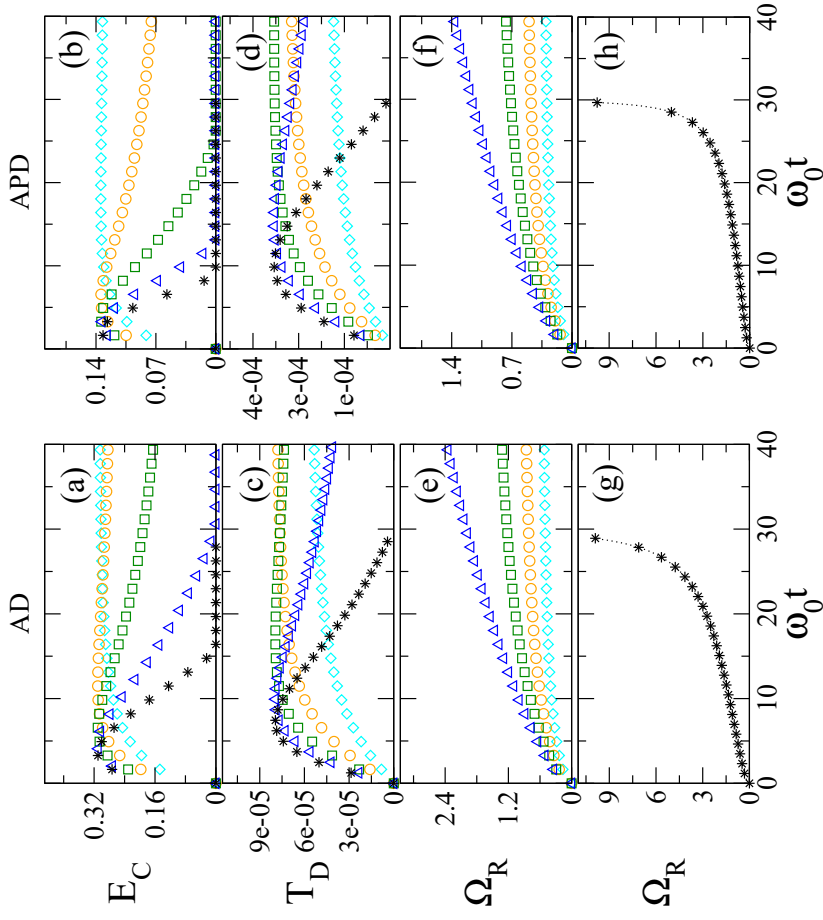


Figura 17 – Gráficos de concorrência  $E_C$  (a)–(b), distinguibilidade  $T_D$  (c)–(d) e os perfis de campo externo necessários (e)–(f) e (g)–(h) para os mesmos objetivos de controle da Fig. 8. Os símbolos correspondem aos valores de  $S_0$ : 0,08 (diamante), 0,16 (círculo), 0,24 (quadrado), 0,32 (triângulo) e 0,40 (estrela). De modo análogo ao resultados expostos nas Figs. 8 e 16, novamente para  $S_0 = 0,4$  o controle é permitido somente até  $\omega_0 t = 30$ . Observe que os valores de  $T_D$  não ultrapassam a ordem de  $10^{-4}$  para AD e  $4 \times 10^{-4}$  para APD. A fase do laser foi mantida em  $\varphi = 3\pi/2$  durante toda a evolução.

baixo) na Fig. 9. Curiosamente, a combinação de AD com PD (o APD) produz valores em níveis equivalentes a AD. O ‘preço’ pago por esse feito é que as soluções de campo são relativamente maiores quando comparada ao PD, conforme a Fig. 10. Tais resultados estão em consonância com a ideia de combater ruído com ruído (*fighting noise with noise*) [110], aplicado a um estudo de teletransporte quântico. Se por alguma razão o meio em particular se comportar intrinsecamente como PD, como por exemplo, em realizações experimentais de memórias (*quantum memories*) e redes quânticas (*quantum networks*) [65, 125, 126], então a adição de AD pode ser benéfica para a manutenção de emaranhamento por intermédio do controle aqui proposto (compare os painéis (a, d, g) com (c, f, i) na Fig. 9).

Outra realização relevante envolve o controle do emaranhamento, ou a medida de concorrência  $E_C$  na Fig. 11. Os valores máximos atingidos são notadamente distintos, onde PD é menor de todos os ambientes. Algo inesperado emergiu desse controle, em especial a negatividade  $E_N$  e coerência  $C$  aumentam no sistema. Além disso, conseguimos estabilizar  $E_C$  para intervalos de tempo dezenas de vezes maiores, na Fig. 13. Preservar

emaranhamento é essencial para a confiabilidade de dispositivos úteis para a informação quântica [54], ou para garantir a segurança na distribuição de chaves quânticas, comunicação quântica e armazenamento robusto de estados quânticos [70, 127]. Vale mencionar que o controle quântico do emaranhamento forneceu valores de amplitudes  $\Omega_R$  menores em comparação ao controle de população, segundo as Figs. 10, 11 e 13.

Valores negligenciáveis de distinguibilidade  $T_D$  (equivalente a alta fidelidade) é necessário em diversas aplicações que utilizam emaranhamento como um recurso para o processamento de informação quântica. Ilustrando com poucos exemplos, em memórias e sensores quânticos [128] e dispositivos de comunicação quântica [129]. Tal condição foi perfeitamente satisfeita para todos os exemplos quando  $\Gamma_1 = \Gamma_2$  durante todo o procedimento de controle. Agora, para os casos em que  $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$  (conforme discutido nas Figs. 15, 16) o controle foi realizado com ótima precisão. No entanto, as soluções de campo obtidas  $\Omega_R$  geraram picos na medida de  $T_D$  em alguns intervalos de tempo, mas ainda resultou em valores relativamente baixos de distinguibilidade (principalmente para AD). Conseguimos resultados da mesma qualidade que o controle dos *qubits* (interagindo de forma idêntica com o ambiente) quando incluímos o parâmetro da fase do laser, assim gerando a coerência necessária para reduzir drasticamente a medida de distinguibilidade, ou ainda, aumentando a fidelidade dos *qubits*.

### 3 CONTROLE PARAMÉTRICO DIRETO E MÍNIMA DISPERSÃO

---

*Apresentaremos neste capítulo o Controle Paramétrico Direto (CPD), demonstrando as particularidades matemáticas do método com uma série de exemplos de sistemas quânticos de múltiplos níveis. Por fim, discutiremos uma maneira de restringir o espaço de soluções minimizando a dispersão da trajetória no valor esperado do observável.*

---

#### 3.1 FUNDAMENTOS DA TÉCNICA

Há diferentes maneiras de lidar matematicamente com o Controle Quântico (CQ), considerando as principais abordagens apresentadas na introdução desta tese. Geralmente, sistemas de equações diferenciais não-lineares acopladas são utilizados, necessitando de procedimentos analíticos e numéricos distintos para serem resolvidos. Em tal contexto, foi proposto o método paramétrico independente do tempo (MPIT) [24], um protocolo conceitualmente simples, mas computacionalmente robusto, sendo capaz de enfrentar problemas arbitrários de  $N$ -níveis [25], onde  $N$  é definido de acordo com o sistema estudado. Além disso, sua versatilidade também tem sido demonstrada no controle de sistemas quânticos abertos [130, 131].

A implementação do MPIT é discutida em detalhes no artigo [25], portanto, aqui iremos apenas esboçar os principais passos. Suponha que durante um certo intervalo de tempo  $(0, T)$ , desejássemos que o valor esperado de um observável  $\mathcal{O}$  (representado pelo operador hermitiano  $\hat{\mathcal{O}}$ ) siga o comportamento de uma trajetória pré-determinada  $S(t)$ , conforme ilustrada na Fig. 18. Geralmente, escolhemos  $S(t)$  pensando em como o sistema deve se comportar quando aplicado um campo externo de controle. Em outras palavras, queremos um  $|\psi(t)\rangle$  tal que  $\langle \mathcal{O} \rangle(t) = \langle \psi(t) | \hat{\mathcal{O}} | \psi(t) \rangle = S(t)$ . Assim, resumizamos da seguinte forma o procedimento a ser seguido:

- (a) Dividimos toda a faixa de tempo integral  $T$  em pequenos intervalos  $\Delta t_j = t_j - t_{j-1}$  ( $j = 1, 2, 3, \dots$ ), onde  $t_0 = 0$ .
- (b) Dentro de cada  $\Delta t_j$ , consideramos a aplicação de um potencial externo independente do tempo  $\hat{V}_n(\lambda)$  em função de  $M$  parâmetros sintonizáveis  $\lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M\}$  (para saber como o potencial se relaciona com um campo elétrico externo real, ver abaixo).
- (c) Para cada  $j$ , selecionamos um instante de  $\tilde{t}_j$  dentro de  $\Delta t_j$  e definimos  $S_j = S(\tilde{t}_j)$ . Os valores exatos de  $\tilde{t}_j$ 's não são criticamente importantes desde que os  $\Delta t_j$ 's sejam pequenos o suficiente [24] (em todos os cálculos nas próximas seções escolhemos  $\tilde{t}_j = t_{j-1} + \Delta t_j/2$ ).
- (d) Para o intervalo  $j$ , procuramos valores apropriados para o conjunto dos parâmetros  $\{\lambda^{(j)}\}$  de  $\hat{V}_j$  resultando em  $\langle \mathcal{O} \rangle(\tilde{t}_j) = S_j$ . Esta etapa crucial (que chamamos de controle de intervalo de tempo único) do MPIT é totalmente explorada em Sec. 3.2.
- (e) Presumimos que próximo de  $t_j$  o potencial pode ser trocado muito rapidamente, mudando de  $\hat{V}_j$  para  $\hat{V}_{j+1}$ . Assim, a súbita aproximação na mecânica quântica (para um bom tratamento sobre este tópico ver, por exemplo, as refs. [132, 133]) é válida e a partir daí  $\psi(t_j) \approx \psi(t_{j+1})$  (ou seja, o estado final da janela anterior é aproximadamente o estado inicial da próxima janela).

O CQ é, portanto, finalizado ao conhecermos o conjunto de  $\{\lambda^{(j)}\}$ 's. Tais parâmetros nos levam a um potencial independente do tempo a ser aplicado ao sistema durante todo o intervalo de tempo  $(0, T)$ . Por isso é um método inverso, pois sabemos onde queremos chegar com a trajetória alvo e determinamos numericamente o perfil do campo externo que conduzirá o sistema para o alvo de interesse.

Devemos mencionar que, de um ponto de vista prático, duas questões naturais podem surgir em relação aos itens (c) e (e). De fato, assumimos que o modulador óptico é capaz de adaptar pulsos relativamente curtos dos campos laser, bem como mudar muito rapidamente suas configurações. Entretanto, isto é completamente viável com as atuais tecnologias de campo a laser (para uma discussão mais aprofundada, veja [24, 25] e as referências nela contidas).

### 3.2 IMPLEMENTANDO O CONTROLE PARA UM ÚNICO INTERVALO DE TEMPO

Considere um Hamiltoniano arbitrário  $\hat{H}_0$  “não-perturbado” de um sistema quântico de  $N$ -níveis cujo conjunto de autovetores e autovalores são, respectivamente,  $\{|\varepsilon_n\rangle\}$  e  $\{\varepsilon_n\}$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$ . Agora, somando um potencial externo independente do tempo  $\hat{V}$  (atuando durante o intervalo  $0 \leq t < \Delta t$ ), o problema com o Hamiltoniano completo corresponde a



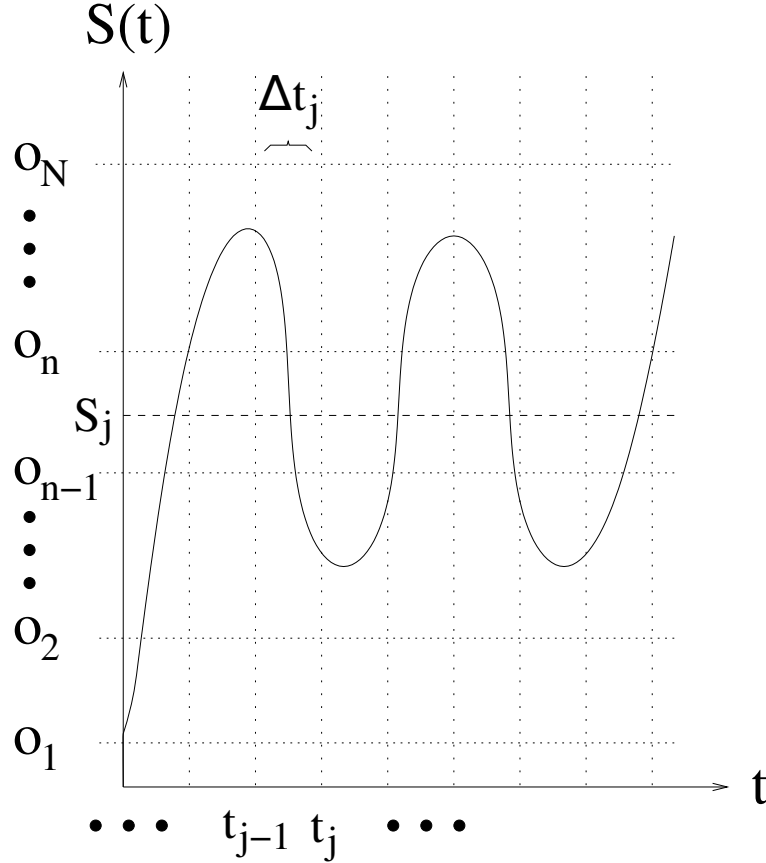


Figura 18 – Ilustração de uma trajetória alvo  $S(t)$  para  $\langle \mathcal{O} \rangle(t)$ . Para o MPIT, o intervalo de tempo completo é dividido em intervalos  $\Delta t_j$ . Em cada  $\Delta t_j$ , um potencial independente do tempo  $\hat{V}_j$  é procurado para levar a  $\langle \mathcal{O} \rangle(\tilde{t}_j) = S(\tilde{t}_j) = S_j$  ( $\tilde{t}_j \in \Delta t_j$ ). Os autovalores de  $\hat{\mathcal{O}}$  são indicados no eixo vertical.

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ . Se inicialmente o estado do sistema é  $|\psi_i\rangle = |\psi(t=0)\rangle$ , então para qualquer instante arbitrário  $t < \Delta t$  nós temos  $|\psi(t)\rangle = \exp[-i\hat{H}t/\hbar] |\psi(0)\rangle$ .

Conforme abordado anteriormente, nossa atenção é direcionada ao observável descrito pelo operador hermitiano  $\hat{\mathcal{O}}$ . Salientamos que sua representação matricial é sempre conhecida na base de  $\hat{H}_0$ . Assim, podemos calcular o auto-sistema correspondente para  $\hat{\mathcal{O}}$  (diagonalizando-o), obtendo  $\{|o_n\rangle\}$  e  $\{o_n\}$ , com  $n = 1, 2, \dots, N$  e por conveniência assumimos o ordenamento  $o_1 \leq o_2 \leq \dots \leq o_N$ . Os  $o_n$ 's degenerados não alteram nossa análise, apenas restringem a faixa de valores possíveis para a trajetória alvo  $S(t)$ . Note que o valor esperado no tempo está limitado a  $\min(\mathcal{O}) \leq S(t) \leq \max(\mathcal{O})$  (veja a Fig. 18 novamente, lá temos  $o_1 \leq S(t) \leq o_N$ ).

É de interesse para o método conhecer os elementos de matriz que conectam os autoestados  $\{|\varepsilon_n\rangle\} \rightarrow \{|o_n\rangle\}$ . Portanto, a matriz unitária  $\Lambda$  que opera tal mudança de base é dada por

$$|\varepsilon_n\rangle = \sum_m \Lambda_{mn} |o_m\rangle, \quad |o_n\rangle = \sum_m (\Lambda^\dagger)_{mn} |\varepsilon_m\rangle. \quad (3.1)$$

A partir daí, no intuito de generalizar nossa notação, para todo um operador  $\hat{A}$  escreveremos  $A^{(g)}$  indicando sua representação matricial na base de  $\{|g_n\rangle\}$ . Desta forma

$$H^{(o)} = \Lambda (H_0^{(\varepsilon)} + V^{(\varepsilon)}) \Lambda^\dagger. \quad (3.2)$$

Suponha que nos é dado  $|\psi_i\rangle = |\psi(t=0)\rangle = \sum_n \tilde{c}_n^{(i)} |\varepsilon_n\rangle$ . Partindo da matrix  $\Lambda$  podemos facilmente definir  $|\psi_i\rangle$  na base de  $\hat{O}$ , ou simplesmente  $|\psi_i\rangle = \sum_n c_n^{(i)} |o_n\rangle$ .

Retomando que  $\hat{V}(\lambda)$  é um operador que está em função dos  $M$  parâmetros livres  $\lambda = \{\lambda_1, \dots, \lambda_M\}$ , nosso objetivo é encontrar conjuntos de  $\{\lambda\}$  de modo que no instante  $t = \tau$  (geralmente  $\tau = \Delta t/2$ ) o vetor de estado  $|\psi_f\rangle = |\psi(\tau)\rangle$  forneça

$$\langle \psi_f | \hat{O} | \psi_f \rangle = S, \quad (3.3)$$

em que  $o_1 \leq S \leq o_N$  possui um valor conhecido, sendo basicamente um ponto da trajetória alvo nesse instante.

Agora, para um conjunto de parâmetros qualquer  $\{\lambda\}$  nós diagonalizamos  $H^{(o)}$  na Eq. (3.2), determinando os vetores próprios  $\{|e_n\rangle\}$  e valores próprios  $\{e_n\}$  de  $H^{(o)}$ , bem como a matriz unitária  $\Gamma$  que permite a transformação da base

$$|o_n\rangle = \sum_m \Gamma_{mn} |e_m\rangle, \quad |e_n\rangle = \sum_m (\Gamma^\dagger)_{mn} |o_m\rangle. \quad (3.4)$$

Nosso objetivo é escrever o vetor de estado final da janela  $|\psi_f\rangle$  em termos da base  $\{|o_n\rangle\}$  para que a igualdade da Eq. (3.3) seja válida. No entanto, a evolução de tal estado é operada pelo Hamiltoniano  $H^{(o)}$ . Então, escrevemos o estado inicial como

$$|\psi_i\rangle = \sum_m c_m^{(i)} |o_m\rangle = \sum_{n,m} \Gamma_{nm} c_m^{(i)} |e_n\rangle \quad (3.5)$$

Atuando o operador de evolução temporal em  $|\psi_i\rangle$  obtemos

$$|\psi_f\rangle = \sum_{n,m} \Gamma_{nm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_n\tau] |e_n\rangle, \quad (3.6)$$

onde definimos a frequência ( $e_n/\hbar = \omega_n$ ). Para retornar à base  $\{|o_n\rangle\}$  combinamos a primeira relação da Eq. (3.4), o que fornece

$$|\psi_f\rangle = \sum_n \left( \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] \right) |o_n\rangle. \quad (3.7)$$

Nesse ponto, podemos seguir duas estratégias diferentes dependendo de como devemos explorar o espaço de soluções. Mencionemos primeiro o caso irrestrito, ou seja, apenas para buscar possíveis soluções para o CQ, sem impor quaisquer restrições adicionais ao problema.

Inserindo a Eq. (3.7) em (3.3) e conhecendo o autovalor do observável  $\mathcal{O}|o_n\rangle = o_n|o_n\rangle$ , obtemos

$$S = \sum_n o_n \left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] \right|^2, \quad (3.8)$$

ou mais precisamente na perspectiva numérica

$$\left| S - \sum_n o_n \left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] \right|^2 \right| \leq \epsilon_S, \quad (3.9)$$

sendo  $\epsilon_S$  a precisão da equação, e naturalmente, é esperado que seja um número pequeno.

Observe que  $\Gamma$  e os  $\omega_n$ 's são funções dos parâmetros livres  $\{\lambda\}$ . Logo, para alcançarmos o controle precisamos olhar para os  $\{\lambda\}$ 's que verificam a relação acima. Suponha, portanto, o potencial aplicado expresso como um simples campo laser na condição dipolar. Nesse caso,  $V$  seria parametrizado apenas por uma amplitude e fase (com  $M = 2$  e  $V(u, \phi)$ , por exemplo), que de acordo com o formalismo aqui empregado seriam  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$ . Nesse contexto, a busca numérica das soluções de controle são estritamente diretas, mesmo por poucas dezenas de níveis. De fato, estabelece-se limites superiores e inferiores adequados e espaçamento  $\Delta\lambda$  para ambos  $\lambda$ 's, gerando assim uma malha discreta de valores. Ao 'caminhar' sobre tal malha, diagonalizamos matrizes de ordem  $N \times N$  e testando a Eq. (3.9). Mesmo para os exemplos deste capítulo com  $N = 20$  que serão apresentados na seção de resultados, tal processo é extremamente rápido e fornece boas soluções demandando o mínimo de esforço computacional (fizemos alguns testes numéricos usando até  $N = 64$  com um sistema fictício, mas não colocaremos aqui por não contribuir com a análise).

### 3.2.1 Seleção de características específicas para as soluções de controle

Dando continuidade ao raciocínio sobre estratégias de como explorar o espaço de soluções, a segunda possibilidade é que, além de verificar o objetivo do CQ, as soluções também devem apresentar certas características específicas. Para ver como selecioná-las, primeiro nós genericamente escrevemos  $|\psi_f\rangle$  na base  $\{o_n\}$  como

$$|\psi_f\rangle = \sum_n \sqrt{p_n} \exp[i\varphi_n] |o_n\rangle, \quad (3.10)$$

para qualquer  $n$ , a probabilidade está entre  $0 \leq p_n \leq 1$  e a fase  $0 \leq \varphi_n < 2\pi$ . A normalização de  $|\psi_f\rangle$  obviamente leva a

$$\sum_n p_n = 1. \quad (3.11)$$

O conjunto  $\{p_n\}$  na Eq. (3.10) constitui um espaço de coeficientes, esquematicamente descrito na Fig. 19. Todos os  $p_n$ 's possíveis devem ocupar apenas o primeiro ortante<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Em um espaço bidimensional ( $N=2$ ) chamamos de quadrante as regiões formadas por um par de abscissas  $x$  e  $(-x)$  e ordenadas  $y$  e  $(-y)$ . Um ortante é basicamente cada uma dessas regiões. Se  $N=3$ , haverá oito ortantes ou um octante.

neste espaço  $N$  dimensional. De fato, ainda mais restritivamente, eles devem pertencer ao hiperplano finito indicado em Fig. 19 (azul), determinado pela condição de normalização em Eq. (3.11)

Desde que o objetivo de controle quântico seja dado pela Eq. (3.3), e assumindo o estado da Eq. (3.10) (que está em termos de  $p_n$ ), obtemos

$$\sum_n s_n p_n = 1 \quad , \quad (3.12)$$

$$s_n = o_n/S \quad \text{se} \quad (S \neq 0) \quad , \quad (3.13)$$

$$s_n = o_n + 1 \quad \text{se} \quad (S = 0) \quad . \quad (3.14)$$

A lógica para tal definição é muito simples, considere a situação em que  $S = 0$ . A Eq. (3.13) seria simplesmente  $\sum p_n o_n = 0$ , contudo, utilizando a condição de normalização da Eq. (3.11) como uma soma em ambos os lados da igualdade, obtemos  $\sum_n p_n o_n + \sum_n p_n = 0 + 1$ , e agora basta colocar  $p_n$  em evidência com  $\sum_n p_n (o_n + 1) = 1$  para então chegarmos na expressão  $s_n = o_n + 1$ .

A equação acima também define um hiperplano no espaço de coeficientes, conforme ilustrado na Fig. 19 (vermelho). A interseção geométrica dos dois hiperplanos, Eqs. (3.11) e (3.13), representam a coleção completa de  $\{p_n\}$  permitindo o controle: o subespaço de soluções destacado na Fig. 19 (verde). Observe que, na construção atual, o conjunto  $\{\varphi_n\}$  é completamente arbitrário. Portanto, essas fases podem ser usadas como graus de liberdade extras, úteis até mesmo para melhorar a qualidade de CQ.

A descrição acima revela uma grande diversidade de soluções possíveis para um único intervalo de tempo no MPIT. De fato, em princípio, todas elas podem ser acessadas através da variação de  $\Gamma$  na Eq. (3.8), mas podemos restringir ainda mais os  $p_n$ 's (e  $\varphi_n$ 's), de modo a atribuir propriedades particulares ao propagador do estado  $|\psi_f\rangle$ , e conseqüentemente às características do controle, ao considerar diferentes condições ao subespaço de soluções.

Suponha que estamos considerando  $\{p_n\}$  pertencente ao subespaço das soluções existentes (verde), mas que também satisfaçam uma restrição genérica denotada por  $F(\{p_n\}, \{\varphi_n\}) = 0$ . Para determinar tais soluções, lembramos que  $|\psi_f\rangle$  na Eq. (3.7) é naturalmente igual a  $|\psi_f\rangle$  na Eq. (3.10). Assim, ao equacionarmos estas duas expressões, devemos ter

$$\sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i \omega_l \tau] = \sqrt{p_n} \exp[i \varphi_n]. \quad (3.15)$$

A fim de satisfazer *simultaneamente* as relações acima para todos os  $n$ , devemos impor

$$0 = \sum_n \left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i \omega_l \tau] - \sqrt{p_n} \exp[i \varphi_n] \right|^2. \quad (3.16)$$

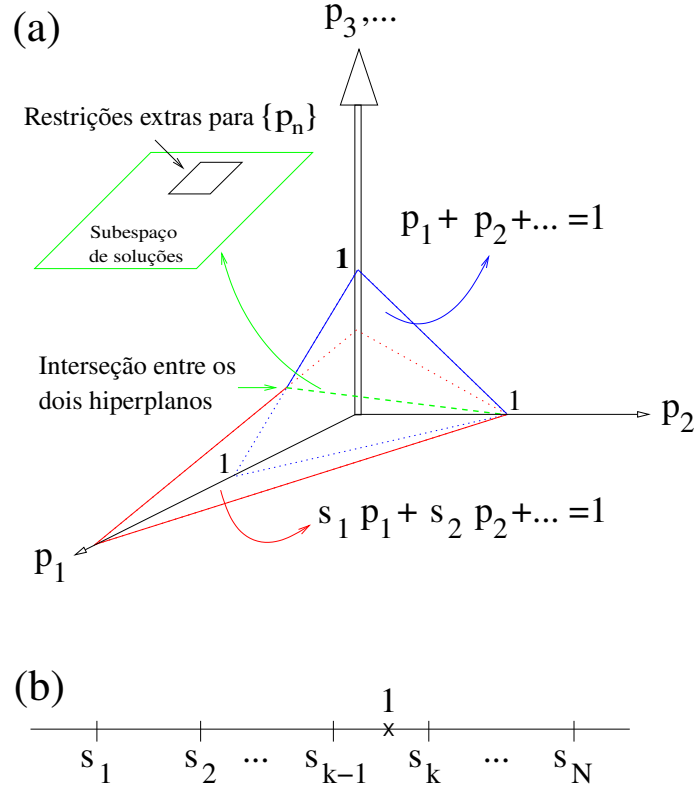


Figura 19 – (a) Esquemas do espaço  $N$ -dimensional de coeficientes reais do estado quântico  $|\psi_f\rangle$  na Eq. (3.10). A interseção dos hiperplanos representam a condição de normalização da Eq. (3.11) - (azul) e a trajetória alvo (3.13) - (vermelho), formando o conjunto completo de soluções possíveis para o problema de controle - (verde), onde condições *extras* podem ser aplicadas. O pontilhado é apenas a continuidade dos planos sobrepostos. (b) Os valores próprios renormalizados do observável  $\mathcal{O}$  são  $s_{k-1}$  e  $s_k$ , correspondendo a dois valores mais próximos de 1, ou mais rigorosamente,  $s_{k-1} < 1 < s_k$ .

Portanto, nossa tarefa consiste em procurar os parâmetros  $\{\lambda\}$  tais que validem a Eq. (3.16), e além disso, obedeçam a restrição adicional  $F(\{p_n\}, \{\varphi_n\}) = 0$ . Um exemplo concreto para esse procedimento será numericamente explorado na Sec. 3.3.

### 3.2.2 Especificando a população de $H_0$ no controle de trajetória

Considere o seguinte caso: suponha que em uma dada aplicação desejamos que a distribuição da população de certos níveis de energia de um sistema arbitrário  $H_0$  sejam ocupados por somente uma fração no estado  $|\psi_f\rangle$ . Em outras palavras, os valores  $P_k = |\tilde{c}_k^{(f)}|^2$  para determinados  $k$ 's devem ser previamente conhecidos, onde  $|\psi_f\rangle = \sum_k \tilde{c}_k^{(f)} |\varepsilon_k\rangle$ . Agora, a partir da Eq. (3.7) e a transformação de base expressa na Eq. (3.4), chegamos em

$$\sum_k \tilde{c}_k^{(f)} |\varepsilon_k\rangle = \sum_k \left( \sum_{n,l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] (\Lambda^\dagger)_{kn} \right) |\varepsilon_k\rangle, \quad (3.17)$$

então para os valores especiais de  $k$ 's, obtém-se

$$\left| \sum_{n,l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l \mathcal{T}] (\Lambda^\dagger)_{kn} \right|^2 - P_k = 0. \quad (3.18)$$

Logo, para tal conjunto de relações constitutivas é possível impor a restrição previamente mencionada  $F(\{p_n\}, \{\varphi_n\}) = 0$  e implementar o CQ de trajetória.

### 3.2.3 Minimizando a dispersão de $\langle \mathcal{O} \rangle(t)$

Considere o valor esperado de um observável qualquer definido a partir da Eq. (3.13), além da imposição de uma restrição sobre  $\{p_n\}$ 's e  $\{\varphi_n\}$ 's. O objetivo agora é selecionar apenas as soluções que minimizem a variância do valor esperado  $\sigma_{\mathcal{O}} = \sqrt{\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2} \geq 0$ . Assumindo que os autovalores do observável  $\mathcal{O}$  são discretos, nós temos

$$\sigma_{\mathcal{O}} = \left( |S| + \frac{(1 + (-1)^{\text{sgn}(S)})}{2} \right) \sigma_{\{p_n\}}, \quad (3.19)$$

para a função sinal  $\text{sgn}(x)$  sendo  $+1$ ,  $-1$  ou  $0$ , respectivamente, para  $x > 0$ ,  $x < 0$ , ou  $x = 0$ . O termo  $\sigma_{\{p_n\}}$  corresponde a

$$\sigma_{\{p_n\}} = \sqrt{\sum_n p_n s_n (s_n - 1)}. \quad (3.20)$$

Desse modo, a minimização de  $\sigma_{\mathcal{O}}$  resume-se a minimização de  $\sigma_{\{p_n\}}$ .

#### DEMONSTRAÇÃO

Considere a relação fundamental que determina a variância associada a medida de um observável  $\sigma_{\mathcal{O}} = \sqrt{\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2}$ , em que pretendemos calcular os termos  $\langle \mathcal{O}^2 \rangle$  e  $\langle \mathcal{O} \rangle^2$  a seguir. Primeiramente, tomaremos o estado final  $|\psi_f\rangle = \sum_n \sqrt{p_n} \exp[i\varphi_n] |o_n\rangle$  e o valor esperado de um observável  $\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_n p_n o_n$ , onde tais relações já foram previamente apresentadas no texto.

Começaremos com  $\langle \mathcal{O} \rangle^2$ , que é simplesmente  $\langle \mathcal{O} \rangle^2 = \langle \mathcal{O} \rangle \langle \mathcal{O} \rangle$ , fazendo

$$\langle \mathcal{O} \rangle \langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{klmn} \left( \langle o_m | \sqrt{p_m} e^{-i\varphi_m} \mathcal{O} \sqrt{p_n} e^{i\varphi_n} | o_n \rangle \right) \left( \langle o_k | \sqrt{p_k} e^{-i\varphi_k} \mathcal{O} \sqrt{p_l} e^{i\varphi_l} | o_l \rangle \right) \quad (3.21)$$

reagrupando e distribuindo, além de aplicar a relação de autovalor  $\mathcal{O}|o_n\rangle = o_n|o_n\rangle$ , chega-se a

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle \langle \mathcal{O} \rangle &= \sum_{klmn} \sqrt{p_k} \sqrt{p_l} \sqrt{p_m} \sqrt{p_n} \exp[-i(\varphi_k - \varphi_l + \varphi_m - \varphi_n)] o_n o_l \langle o_m | o_n \rangle \langle o_k | o_l \rangle, \\ &= \sum_{kn} \sqrt{p_k p_l} \sqrt{p_m p_n} \exp[-i(\varphi_k - \varphi_l + \varphi_m - \varphi_n)] o_n o_l \sum_m \delta_{m,n} \sum_l \delta_{k,l}, \\ &= \sum_{kn} \sqrt{p_k^2} \sqrt{p_n^2} o_n o_k, \\ &= \left( \sum_k p_k o_k \right) \left( \sum_n p_n o_n \right), \end{aligned} \quad (3.22)$$

em que utilizamos a definição da delta de kronecker  $\delta_{uv} = \langle o_u | o_v \rangle$ , e o somatório correspondente,  $1 = \sum_u \delta_{uv}$  que filtra os elementos de índice  $u$  para  $v$ .

Agora, expandindo de modo análogo o termo  $\langle \mathcal{O}^2 \rangle$ , ou melhor,  $\langle \mathcal{O}^2 \rangle = \langle \mathcal{O}\mathcal{O} \rangle$ , obtém-se

$$\langle \mathcal{O}\mathcal{O} \rangle = \sum_{kn} \langle o_k | \sqrt{p_k} e^{-i\varphi_k} \mathcal{O} \mathcal{O} \sqrt{p_n} e^{i\varphi_n} | o_n \rangle \quad (3.23)$$

e novamente da relação de autovalor, mas aplicando duas vezes, tem-se  $\mathcal{O}(\mathcal{O}|o_n) = o_n^2|o_n\rangle$ , onde

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}\mathcal{O} \rangle &= \sum_{kn} \sqrt{p_k} \sqrt{p_n} \exp[-i(\varphi_k - \varphi_n)] o_n^2 \langle o_k | o_n \rangle, \\ &= \sum_n \sqrt{p_k p_n} \exp[-i(\varphi_k - \varphi_n)] o_n^2 \sum_k \delta_{kn}, \\ &= \sum_n p_n o_n^2. \end{aligned} \quad (3.24)$$

A partir de tais ingredientes podemos construir a variância na medida do observável como

$$\sqrt{\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2} = \left\{ \sum_n p_n o_n^2 - \left( \sum_k p_k o_k \right) \left( \sum_n p_n o_n \right) \right\}^{1/2}, \quad (3.25)$$

se evidenciarmos o termo dependente de  $n$ , ocorre

$$\sqrt{\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2} = \left\{ \sum_n p_n o_n \left( o_n - \sum_k p_k o_k \right) \right\}^{1/2}, \quad (3.26)$$

devemos nos recordar que a trajetória alvo é exatamente o valor esperado do observável, ou seja

$$\sigma_{\mathcal{O}} = \sqrt{\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2} = \left\{ \sum_n p_n o_n \left( o_n - S \right) \right\}^{1/2}, \quad (3.27)$$

com  $S = \sum_k p_k o_k$ . Agora precisamos analisar duas situações distintas – quando a trajetória assume valores em que  $S \neq 0$  ou  $S = 0$ .

**Caso em que  $S \neq 0$ :** Primeiramente colocaremos  $S$  em evidência na Eq. (3.27), chegando em

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathcal{O}} &= \left\{ S \sum_n p_n \frac{o_n}{S} \left( \frac{o_n}{S} - 1 \right) \right\}^{1/2}, \\ &= |S| \left\{ \sum_n p_n s_n \left( s_n - 1 \right) \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

sendo invocada a quantidade  $s_n = o_n/S$  que foi definida no texto logo abaixo da Eq. (3.13), lembrando que a relação  $1 = \sum_n p_n s_n$  é sempre válida.

**Caso em que  $S = 0$ :** Agora, aplicando apropriadamente a relação  $o_n = s_n - 1$  (veja a Eq. 3.14, com  $s_n = o_n + 1$ ) na Eq. (3.27), obtemos

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathcal{O}} &= \left\{ \sum_n p_n (s_n - 1)(s_n - 1 - 0) \right\}^{1/2}, \\ &= \left\{ \sum_n p_n s_n (s_n - 1) - \sum_n p_n (s_n - 1) \right\}^{1/2}, \\ &= \left\{ \sum_n p_n s_n (s_n - 1) - \underbrace{\sum_n p_n s_n + \sum_n p_n}_{-1+1=0} \right\}^{1/2}, \\ &= \left\{ \sum_n p_n s_n (s_n - 1) \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Por fim, escrevendo uma relação geral para a dispersão sobre o valor esperado do observável e válida para todo  $S$ , tem-se

$$\sigma_{\mathcal{O}} = \left( |S| + \frac{1 + (-1)^{\text{sgn}(S)}}{2} \right) \sqrt{\sum_n p_n s_n (s_n - 1)}, \quad (3.30)$$

exatamente o que desejávamos demonstrar, a expressão correspondente a Eq. (3.19).

A determinação do conjunto  $\{p_n\}$  que minimiza a Eq. (3.31) será apresentada logo a seguir. Ficará evidente que tal conjunto é muito simples de intuir a partir de um raciocínio direto. Em primeiro lugar, para diminuir a dispersão de uma determinada média, é natural tentar reduzir o número de termos em sua construção (aqui temos em mente a forma em que foi escrita a Eq. (3.13)). Desta forma, ao excluir o caso trivial em que um dos  $s_n$  é exatamente a unidade, o número mínimo possível de termos na Eq. (3.13) são dois, diga-se,  $s_{n'}$  e  $s_{n''}$ , onde necessariamente  $s_{n'} < 1 < s_{n''}$ . Então, os valores explícitos de  $p_{n'}$  e  $p_{n''}$  são determinados a partir da Eqs. (3.11) e (3.13). Nesse caso segue diretamente que  $\sigma_{\{p_n\}}^2 = (s_{n''} - 1)(1 - s_{n'})$ . Finalmente, é fácil perceber que para minimizar esta expressão nós precisamos levar o valores de  $s_{n''}$  e  $s_{n'}$  cada vez mais próximos de 1 (veja a Fig. 19 (b)). Portanto

$$\begin{aligned} \sigma_{\{p_n\}}|_{\min} &= \sqrt{(s_k - 1)(1 - s_{k-1})} \quad , \\ p_{k-1} &= \frac{s_k - 1}{s_k - s_{k-1}}, \quad p_k = \frac{1 - s_{k-1}}{s_k - s_{k-1}} \quad . \end{aligned} \quad (3.31)$$

A interpretação física de tais expressões é muito simples. Se o experimentador fizer uma medida do observável  $\mathcal{O}$  para o estado  $|\psi_f\rangle$ , os resultados possíveis são apenas os dois autovalores mais próximos,  $o_{k-1}$  ou  $o_k$ , de  $S$ . Obviamente, os menores desvios possíveis em relação ao valor esperado é o próprio  $S$ , isto é, quando ocorre em particular  $S = o_k$  ou  $S = o_{k-1}$ .

Finalmente, considerando os resultados acima na expressão na Eq. (3.16), descobrimos que as soluções de controle que produzem uma dispersão mínima sobre o valor médio do observável deve obedecer a

$$\begin{aligned} 0 &= \left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{k-1l} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] - \sqrt{\frac{s_k - 1}{s_k - s_{k-1}}} \exp[i\varphi_{k-1}] \right|^2 \\ &+ \left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{kl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] - \sqrt{\frac{1 - s_{k-1}}{s_k - s_{k-1}}} \exp[i\varphi_k] \right|^2 \\ &+ \sum_{n \neq k, k-1} \left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] \right|^2 . \end{aligned} \quad (3.32)$$

Como resultado, selecionaremos sempre as probabilidades associadas aos dois autovalores consecutivos  $\{o_{k-1}, o_k\}$  ao valor de  $S$ , ou seja,  $\{p_{k-1}, p_k\}$ . Note que  $s_{k-1}$  e  $s_k$  são fixos (ou conhecidos para todo  $t$ ), no entanto,  $\varphi_{k-1}$  e  $\varphi_k$  podem assumir qualquer valor, portanto, desempenham o papel de parâmetros livres que ajudam na determinação dos valores possíveis para  $\{\lambda\}$ , e assim, permitindo o controle.



Apresentaremos agora como chegar no resultado exposto na Eq. (3.31) referente a minimização da dispersão  $\sigma_{\{p_n\}}|_{\min}$  do observável alvo. De acordo com os parágrafos anteriores, existe uma maneira simples de se calcular essa expressão.

Primeiramente considere a relação  $\sum_n^N s_n p_n = 1$ , que representa a fórmula geral do valor esperado da trajetória  $S$  na base do observável (com  $s_n = S/o_n$  para  $S \neq 0$  e  $s_n = o_{n+1}$  se  $S = 0$ ). O somário leva em conta as probabilidades de todos os estados do sistema, e que multiplicado pelo respectivo autovalor do observável  $o_n$  resulta em um certo valor para  $S$ . Repare que poderíamos obter o mesmo  $S$  se considerássemos menos termos, como por exemplo, as probabilidades correspondentes aos autovalores consecutivos inferiores e superiores à quantidade  $S$ , algo do tipo  $o_{k-1} \leq S \leq o_k$ .

Nessa condição apontada acima, é fácil concluir que a soma sobre  $N$  termos resultará numa dispersão maior do que apenas dois termos na Eq. (3.19). Obviamente, se o valor de  $S$  for exatamente o do autovalor  $o_n$  apenas um termo é suficiente, porém tal situação é a mais trivial de todas. Assim, nosso objetivo é determinar a dispersão mínima usando o menor número de estados possíveis – ou mais precisamente dois estados.

Partindo das Eqs. (3.11) e (3.13), escrevemos os termos consecutivos como

$$\sum_n p_n = 1, \quad \rightarrow \quad p_{k-1} + p_k = 1, \quad (3.33)$$

$$\sum_n s_n p_n = 1, \quad \rightarrow \quad s_{k-1} p_{k-1} + s_k p_k = 1, \quad (3.34)$$

da Eq. (3.33) podemos definir

$$p_{k-1} = 1 - p_k, \quad (3.35)$$

ao combinar com a Eq. (3.34) e resolvendo para  $p_k$ , obtemos

$$p_k = \frac{1 - s_{k-1}}{s_k - s_{k-1}}, \quad (3.36)$$

e substituindo essa expressão na Eq. (3.35), encontramos  $p_{k-1}$

$$p_{k-1} = \frac{s_k - 1}{s_k - s_{k-1}}, \quad (3.37)$$

Para os dois únicos termos consecutivos  $\{p_{k-1}, p_k\}$  a Eq. (3.31) torna-se

$$\sigma_{\{p_n\}} = \sqrt{\sum_n p_n s_n (s_n - 1)}, \quad \rightarrow \quad \sqrt{p_{k-1} s_{k-1} (s_{k-1} - 1) + p_k s_k (s_k - 1)}, \quad (3.38)$$

tal que (utilizando as relações (3.37) e (3.38))

$$\sigma_{\{p_n\}} = \sqrt{\left(\frac{s_k - 1}{s_k - s_{k-1}}\right) s_{k-1} (s_{k-1} - 1) + \left(\frac{1 - s_{k-1}}{s_k - s_{k-1}}\right) s_k (s_k - 1)}, \quad (3.39)$$

$$= \sqrt{(s_{k-1} (s_{k-1} - 1) + (1 - s_{k-1}) s_k) \left(\frac{s_k - 1}{s_k - s_{k-1}}\right)}, \quad (3.40)$$

$$= \sqrt{(-s_{k-1} + s_k) \frac{(s_k - 1)(1 - s_{k-1})}{s_k - s_{k-1}}}, \quad (3.41)$$

$$(3.42)$$

cuja simplificação algébrica fornece diretamente a dispersão mínima

$$\sigma_{\{p_n\}}|_{\min} = \sqrt{(s_k - 1)(1 - s_{k-1})}, \quad (3.43)$$

$$\sigma_{\mathcal{O}}|_{\min} = \left(|S| + \frac{1 + (-1)^{\text{sgn}(S)}}{2}\right) \sqrt{(s_k - 1)(1 - s_{k-1})}. \quad (3.44)$$

### 3.3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados que serão apresentados nas próximas seções foram obtidos assumindo dois parâmetros: a amplitude do campo elétrico  $\mathcal{E}$  e a fase  $\phi$  desse campo (nas seções anteriores, tais parâmetros eram representados por  $\{\lambda\}$ ). Visando determinar tais parâmetros de controle quântico, comparamos o potencial externo  $|\bar{\mu}|\mathcal{E}$  com a maior diferença de energia do sistema  $\Delta E = E_N - E_1$ . O termo  $\mathcal{E}$  é a amplitude do campo elétrico e  $\bar{\mu}$  é um termo associado ao momento de dipolo elétrico do sistema<sup>2</sup>. Em todos os resultados empregaremos a quantidade adimensional  $\tilde{\mathcal{E}} = |\bar{\mu}|\mathcal{E}/\Delta E$  onde buscamos valores de amplitude do campo elétrico tais que  $0,1 \leq \tilde{\mathcal{E}} \leq 0,7$ . No entanto, há exemplos que demandam mais energia dependendo da complexidade do procedimento. A justificativa fundamental para a escolha de tais valores está no fato de que  $\tilde{\mathcal{E}} = 1$  indica que a energia do campo externo deve ser equivalente a energia total do sistema que está sendo controlado, e nosso objetivo é não atingir esse patamar. Os valores médios do dipolo elétrico para o oscilador harmônico, considerando desde 3 a 20 níveis, é de  $1 \leq |\bar{\mu}| \leq 2,65$ , e no caso da molécula de OH com  $N = 22$  tem-se  $|\bar{\mu}| = 0,06078$ . É razoável considerar este procedimento do ponto de vista prático, pois não queremos perturbar muito o sistema para controlar a trajetória alvo.

Outra questão envolve a largura da janela temporal de controle  $\Delta t$ , onde impomos que deve ser menor do que o tempo de transição mínimo do sistema ( $\tau_{nm}$ ), que é justamente o tempo associado à maior diferença de energia  $\Delta E$ . Se a frequência  $\omega_{nm}$  é diretamente proporcional à energia, logo, podemos escrever  $\tau_{nm} = 2\pi/\omega_{nm}$  ou simplesmente  $\tau_{nm} = 2\pi/\Delta E_{nm}$  (com  $\hbar = 1$ ). Um valor razoável para a largura da janela temporal é  $\Delta t \approx 1/\Delta E$ . Ao satisfazer tal condição, obtemos uma melhor concordância entre as trajetórias alvo e controlada, como observado nos dois primeiros artigos do método paramétrico por partes [24] e [25].

#### 3.3.1 Controle sem restrição de $\langle x \rangle(t)$ pra dez e vinte níveis do OHQ

Analisamos nesta seção o controle quântico de trajetória sem impor restrições extras sobre a trajetória alvo, apenas selecionando os menores valores dos parâmetros da amplitude e fase do campo. Aqui controlamos o operador posição  $\hat{x}$ , onde analisamos diferentes exemplos com no máximo os vinte primeiros níveis do oscilador harmônico quântico unidimensional, e também os vinte dois níveis do radical OH, com ambos os Hamiltonianos definidos em detalhes no Apêndice B. As rotinas numéricas elaboradas para este estudo foram executadas nos servidores do departamento de Pós-Graduação em Física da UFPR (hoggar) na máquina de cálculo *Mojava* (capacidade 16 ram(GB), 4.0 clock(Hz), 8 núcleos). Utilizamos a função de onda inicial  $|\psi_0\rangle = |1\rangle$ , que corresponde

<sup>2</sup> Selecionamos todos os elementos de matriz não nulos do operador de dipolo elétrico a fim de obter  $|\bar{\mu}| = \sum_N |\mu_{nm}|/N$

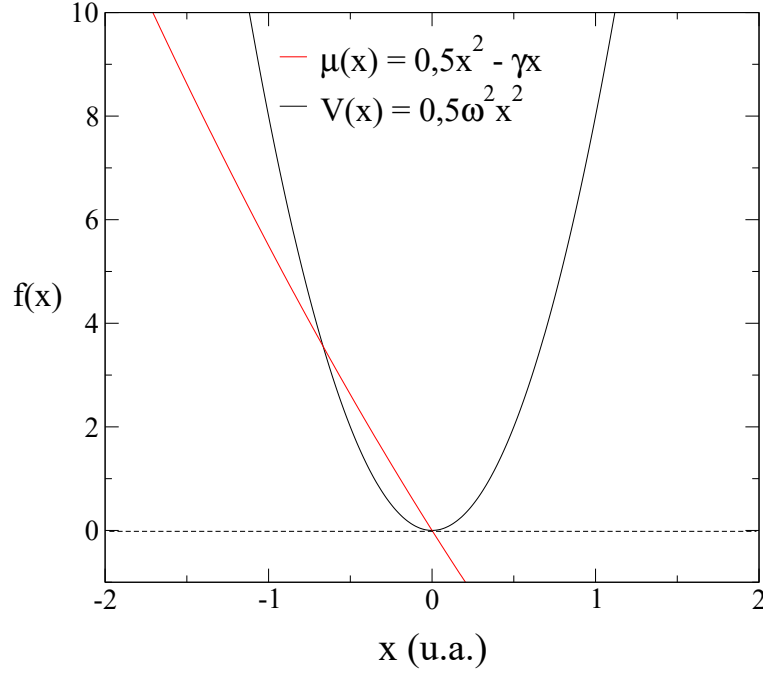


Figura 20 – Curvas de momento dipolo elétrico e de energia potencial, cujos parâmetros estão descritos na Tab. 1 e valores dos parâmetros obtidos a partir de [23]. Ambas as curvas representam um modelo empírico para um sistema oscilatório a nível quântico.

Tabela 1 – Parâmetros do oscilador harmônico quântico.

Fonte: [23]	Oscilador	u.a.
Massa do oscilador	$m$	1
Frequência Angular	$\omega_x$	4
Amplitude do dipolo	$\gamma$	5

ao primeiro autoestado de  $\hat{x}$  no espaço de Hilbert<sup>3</sup>. Na Fig. 20 expomos as curvas de energia potencial e momento de dipolo correspondentes ao oscilador harmônico, e na Tab. 1 dispomos os parâmetros utilizados.

O controle paramétrico é efetuado conhecendo-se *a priori* o comportamento dinâmico do valor esperado do observável de interesse em cada janela de controle, expresso pela trajetória  $S(t) = \langle \mathcal{O} \rangle(t)$ . A função temporal selecionada nessa seção, em termos de parâmetros ajustáveis, é definida por

$$S(t) = s_0 + (s_1 t \sin(\omega t) - s_2 t - s_3) \exp(-s_4 t). \quad (3.45)$$

onde definimos em cada objetivo de controle os valores das constantes  $s_0, s_1, s_2, s_3, s_4$  e  $\omega$ , de modo que inversamente determinamos múltiplas soluções para os parâmetros do potencial externo que satisfazem tal trajetória. Escolhemos tal trajetória com o propósito

<sup>3</sup> Assumiremos ao longo da seção de resultados que a contagem dos níveis se dá a partir de  $n = 1, 2, \dots, N$  e não a sequência usual teórica com  $n = 0, 1, 2, \dots, N$ .

de induzir um comportamento oscilatório na posição do oscilador e estabilizar sua dinâmica no final do processo. Note que inicialmente temos  $\langle \psi(0)|x|\psi(0) \rangle = s_0 - s_3$ .

Na Fig. 21 dispomos os resultados obtidos para  $N = 10$  níveis. A precisão de controle da trajetória é de  $\delta\epsilon_{S(t)} = 5 \times 10^{-3}$ , janela temporal de controle  $\omega_0\Delta t = 1,5$ , menor tempo de transição  $\tau_{10,1} = 0,1745$ , maior diferença de energia do sistema  $\Delta E = 36$  u.a., precisões do campo  $\delta\mathcal{E} = 0,5 \times 10^{-4}$  e fase  $\delta\phi = 1,25 \times 10^{-1}$ , cujo valor máximo da busca é de  $\mathcal{E}_{max} = 6$  u.a. (para que  $\tilde{\mathcal{E}} < 30\%$  usando  $|\bar{\mu}| = 1,8062$ ). Para todos os exemplos de controle desse capítulo, o valor máximo da fase sempre será  $\phi_{max} = 2\pi$  u.a.

No painel (a) da Fig. 21 expomos o perfil de intensidade do campo (adimensional) e em (b) a sua respectiva fase. Aqui utilizaremos o fator de escala  $\omega_0 = 36$  no eixo do tempo para  $N = 10$  e  $N = 20$  níveis. Escolhemos dezenas de níveis do oscilador para demonstrar a viabilidade do método no controle de sistemas de tamanho arbitrariamente grande. Observe que a amplitude do campo elétrico reduz-se gradualmente até  $\omega_0 t \approx 150$  e mantém-se oscilando com baixa amplitude até o final do controle, região em que as menores oscilações da posição do oscilador. Além disso, a variação da fase é mais significativa no intervalo  $50 \sim 80$  atingindo um máximo de  $1,273\pi$  rad. O padrão de campo obtido se justifica pela taxa de variação acentuada da trajetória  $S(t)$ , principalmente no intervalo  $0 \leq \omega_0 t \leq 180$ , devido ao comportamento oscilatório da posição do oscilador passando por todos os autovalores desse operador.

Os dados de intensidade do campo estão normalizados pela maior diferença de energia do sistema, indicando que o máximo de energia fornecida ao oscilador é de aproximadamente 18%. Em (c) estão as trajetórias alvo e controlada sobrepostas considerando todos os 10 níveis do sistema. Para construir  $S(t)$ , primeiramente, determinamos os elementos de matriz do operador posição e calculamos os respectivos autovalores, obtendo os extremos  $[-o_x^{(10)}, o_x^{(10)}]$  onde  $o_x^{(10)} = 1,71808$ . Em seguida, escolhemos os coeficientes da Eq. (3.45) para que  $S(t)$  esteja no intervalo  $-o_x^{(10)} \leq S(t) \leq o_x^{(10)}$ , e assim definimos  $s_0 = 1,1$ ,  $s_1 = 4$ ,  $s_2 = 0,8$ ,  $s_3 = 2,8$ ,  $s_4 = s_2$  e  $\omega = \pi$  nessa função.

Dando continuidade ao problema de muitos níveis, aplicamos o método paramétrico para o dobro de níveis do caso anterior onde controlamos os 20 primeiros estados do oscilador harmônico, conforme a Fig. 22. Nesse exemplo, utilizamos os mesmos parâmetros da trajetória alvo controlada para  $N = 10$ , contudo, alteramos o estado inicial para  $|\psi(0)\rangle = \sqrt{0,05}|1\rangle + \sqrt{0,1}\exp(0,2407i)|2\rangle + \sqrt{0,05}\exp(0,2053i)|3\rangle + \sqrt{0,6}\exp(0,9868i)|4\rangle + \sqrt{0,2}\exp(0,626i)|5\rangle$  para que os valores de  $s_0$  e  $s_3$  sejam os mesmos.

A precisão definida para a trajetória é de  $\delta\epsilon_{S(t)} = 5,0 \times 10^{-3}$ . Aqui escolhemos a janela temporal de controle  $\omega_0\Delta t = 0,36$ , menor tempo de transição  $\tau_{20,1} = 0,08267$ , maior diferença de energia do sistema  $\Delta E = 76$  u.a., precisões do campo  $\delta\mathcal{E} = 1,0 \times 10^{-2}$  e fase  $\delta\phi = 1,25 \times 10^{-1}$ , cujo valor máximo da busca era de  $\mathcal{E}_{max} = 6$  u.a. (para que  $\tilde{\mathcal{E}} < 20\%$  usando  $|\bar{\mu}| = 2,65$ ). Repare que a janela temporal de controle é quatro vezes menor do

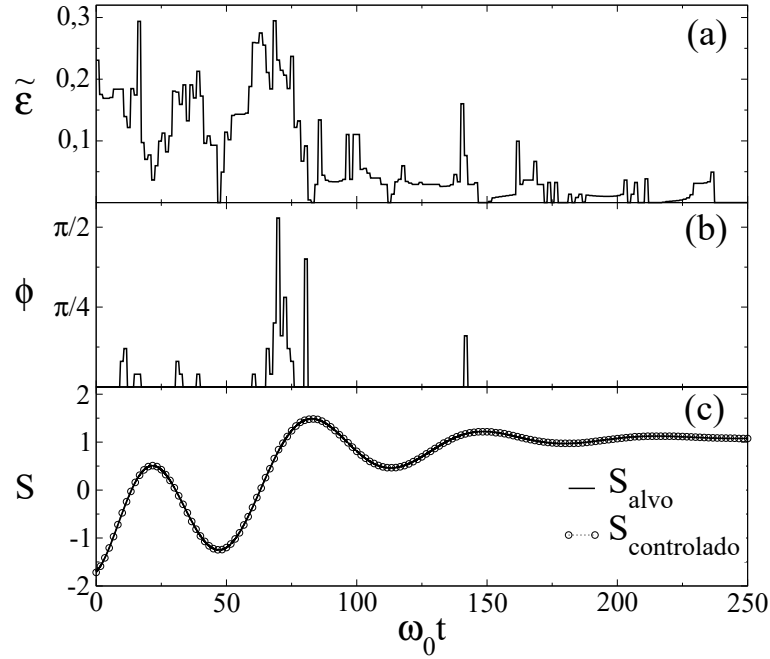


Figura 21 – Controle de 10 estados do oscilador harmônico. No painel (a) temos o campo dividido por  $\Delta E = 36$  u.a. e (b) a fase do potencial externo, onde definimos  $\omega_0 = \Delta E$ . Na figura (c) está a trajetória alvo ( $S_{alvo}$ ) e controlada ( $S_{controlado}$ ) sobrepostas oscilando 10 níveis. Definimos para  $S(t)$  as constantes  $s_0 = 1, 1$ ,  $s_1 = 4$ ,  $s_2 = 0, 8$ ,  $s_3 = 2, 8$ ,  $s_4 = s_2$  e  $\omega = \pi$ .

que a utilizada para 10 níveis. Isso ocorre pelo fato do tempo de transição  $\tau_{20,1}$  ser menor, e precisamos respeitar a condição  $\Delta t < \tau_{20,1}$ .

De acordo com as partes (a) e (b) da Fig. 22, temos o campo paramétrico e fase, respectivamente, que controlam a trajetória alvo apresentada em (c). O perfil do potencial externo é semelhante ao obtido na Fig. 21 (a) (no sentido de diminuir gradualmente a amplitude), mas isso se deve ao comportamento oscilatório análogo das trajetórias alvo. Note também que a amplitude do campo é menor quando comparada ao caso  $N = 10$ , e isso se justifica pelo maior número de estados excitados no sistema e a trajetória alvo não cruzar tais níveis.

É conhecido que em quaisquer problemas inversos podem existir múltiplas soluções, principalmente quando consideramos equações não-lineares [134, 135]. O controle paramétrico é um método inverso e conseqüentemente fornece múltiplas soluções de campo, mesmo com a propriedade de ser independente do tempo. Tal característica foi observada inicialmente no trabalho [24], e posteriormente em [136]. Em ambos os estudos conclui-se que diferentes funções de onda, propagadas por potenciais de controle distintos, podem satisfazer a mesma trajetória alvo  $S(t)$ . Tendo em vista tal cenário, determinamos o número total de soluções existentes em um domínio numérico – ou seja, impondo valores máximos para os parâmetros do campo – em cada passo temporal.

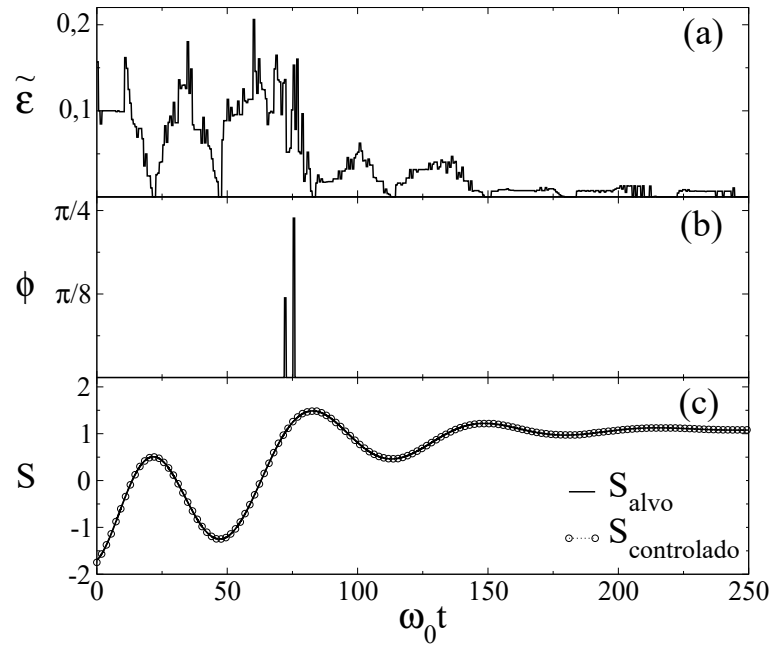


Figura 22 – Controle de 20 estados do oscilador harmônico. Em (a) apresentamos a amplitude do campo dividido por  $\Delta E = 76$  u.a. e em (b) a respectiva fase, onde definimos  $\omega_0 = 36$ . Na parte (c) está a mesma trajetória controlada na Fig. 21. Note como a amplitude do campo e a dependência da fase são menores nesse caso.

Na Fig. 23 apresentamos o número de soluções em cada janela temporal quando  $N = 10$  níveis. Construímos tal gráfico selecionando as cinco primeiras soluções de cada passo  $\Delta t$ , e em seguida, propagamos a função de onda sucessivamente seguindo a mesma ordem da respectiva solução (propaga-se o vetor de estado usando a primeira solução ao longo de toda a trajetória, repetindo o processo para a segunda solução, sucessivamente). Observe que existem milhares de soluções em determinadas regiões, ao passo que em outros pontos temos algumas dezenas, revelando um amplo espaço de soluções disponíveis através do método.

Outra questão pode surgir quando investigamos problemas inversos: Sempre haverá soluções? A resposta é não. Embora o espaço seja consideravelmente grande, o controle pode ser perdido em um ponto arbitrário no tempo. Inicialmente os autores Rabitz, Smit e Zhu [23] identificaram singularidades no controle da posição do oscilador, perdendo completamente o controle depois desse ‘ponto singular’. Devemos nos atentar ao fato de que a técnica de controle proposta pelos autores assume que o tempo é contínuo, aliado a sofisticados algoritmos de otimização (apesar do propagador ser discreto, do ponto de vista numérico os passos temporais são consideravelmente menores). Nos anos seguintes, H. Rabitz e W. Zhu [37] desenvolveram um procedimento no qual é tomada a derivada de segunda ordem da equação que descreve a evolução temporal do observável na representação de Heisenberg, combinando com a imposição de uma função auxiliar

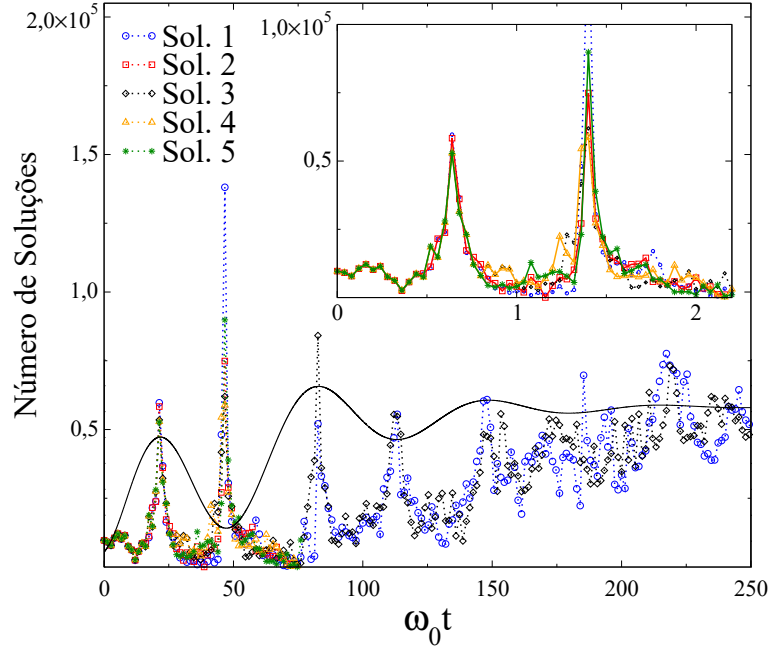


Figura 23 – Número de soluções para cada janela temporal considerando 10 níveis. Note que os picos com maior quantidade de soluções ocorrem quando  $dS(t)/dt \approx cte$  (compare com o painel (c) da Fig. 21), ou seja, nas regiões de máximos e mínimos da função. Se a trajetória  $S$  sofrer grandes variações, observamos que as soluções disponíveis para controlar a dinâmica ficam cada vez mais escassas.

que adapta a trajetória alvo visando contornar os pontos singulares. Apesar de existirem observáveis livres de singularidades (como rotores quânticos [137]), é evidente o quão desafiador pode ser controlar observáveis dependentes da posição.

Um exemplo do contexto mencionado no parágrafo anterior está apresentado na ampliação presente na Fig. 23, em que exibimos a ampliação do número de soluções até  $\omega_0 t \approx 80$  para 10 níveis. Como medida de comparação, para  $\omega_0 t > 80$  não há controle se utilizarmos a segunda (2), a quarta (4) ou a quinta (5) solução de cada janela. Interpretamos que dependendo da escolha do propagador em uma dada janela  $\Delta t$  – associado a algum valor de campo – não haverá um vetor de estado que conduzirá a dinâmica do sistema conforme a trajetória  $S(t)$ .

A fim de aumentar o espaço de soluções em regiões de ruptura (perda do controle), aplicamos um artifício numérico que amplia substancialmente a chance de encontrarmos uma ou mais soluções caso a busca seja interrompida. Primeiramente, definimos um valor inicial de precisão para os parâmetros de campo e fase,  $\delta\mathcal{E}$  e  $\delta\phi$ , respectivamente. Vasculhamos completamente o espaço até atingirmos os valores máximos de cada parâmetro. Se eventualmente não for encontrada nenhuma solução que satisfaça a métrica  $|S(t_j) - \langle \vec{X} \rangle(t_j)| \leq \epsilon_{S(t)}$ , dividimos por 10 os valores da precisão e reiniciamos o algoritmo de busca. Assim, através de um procedimento com precisão dinâmica, ampliamos em 100

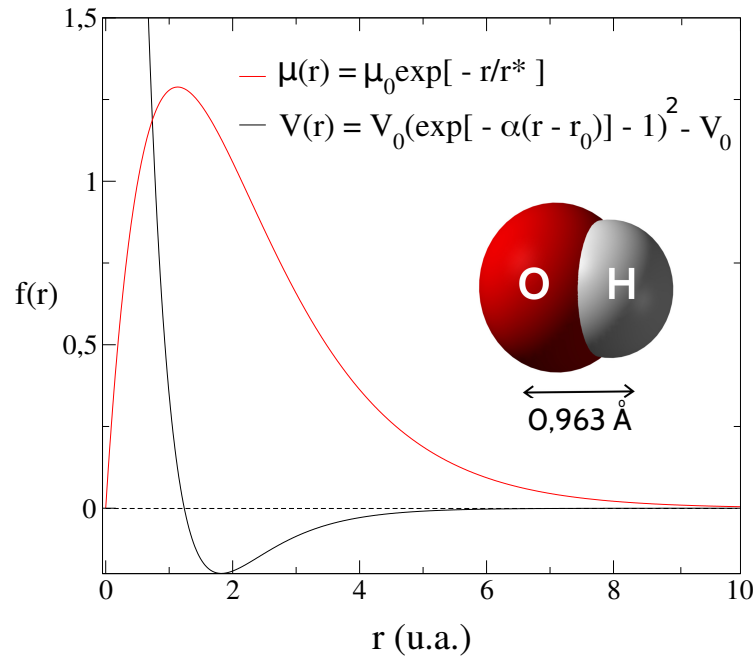


Figura 24 – Curvas de momento dipolo elétrico e de energia potencial, cujos parâmetros estão descritos na Tab. 2, onde foram extraídos de [138]. Observe o grande pico do momento dipolo na região da distância de equilíbrio. Além disso, o dipolo estende-se com valores positivos ao longo de toda a ligação OH.

Tabela 2 – Parâmetros do Potencial Morse para o radical OH.

Fonte: [138]	OH	u.a.
Constante Mecânica	$\alpha_0$	1,189
Posição de Equilíbrio	$r_0$	1,821
Energia de Dissociação	$V_0$	0,1994
Massa Reduzida	$m_\mu$	1728
Amplitude do dipolo	$\mu_0$	3,0886
Alcance do dipolo	$r^*$	1,1338

vezes a dimensão do espaço de soluções dos parâmetros para o campo externo.

### 3.3.2 Controlando a Molécula de OH

Moléculas diatômicas são estruturas moleculares muito simples, justamente por sua composição conter somente dois átomos. Esse sistema quântico é explorado com frequência devido a acessível solução analítica graças a contribuição de Phillip Morse [139]. Selecionamos a molécula de OH (radical hidróxido) tendo em vista suas aplicações e propriedades químicas já investigadas [138, 140]. Apresentaremos a seguir os resultados obtidos para o controle dos 22 estados vibracionais do radical OH, cujo Hamiltoniano está exposto em detalhes no Apêndice B, onde substituímos os parâmetros da Tab. 2.

Ilustramos as curvas de energia potencial e momento de dipolo elétrico do radical



OH na Fig. 24, em que indicamos na legenda as respectivas funções. Observe como o momento de dipolo se estende até regiões  $r \approx 10$  u.a., mas seu valor máximo está localizado um pouco antes da distância de equilíbrio do radical OH. A diferença de eletronegatividade entre os átomos constituintes justifica tal variação de intensidade no momento de dipolo, bem como sua distribuição de cargas [141].

Na Fig. 25 exibimos em (a) o campo paramétrico de controle, em (b) a fase em (c) a evolução temporal do valor esperado da posição (ou distância intermolecular dos átomos  $O - H$ )  $\langle \vec{R} \rangle(t)$ . As principais variáveis utilizadas para controlar o radical OH estão indicados a seguir: precisão de  $\delta\epsilon_{S(t)} = 5,0 \times 10^{-4}$  oscilando dentro da janela  $1,3922 \leq \langle \vec{R} \rangle \leq 7,4445$  u.a.. A janela temporal de controle  $\omega_0\Delta t = 3,2$ , menor tempo de transição  $\tau_{22,1} = 33,0114$ , maior diferença de energia do sistema  $\Delta E = 0,19033$  u.a., precisões do campo  $\delta\mathcal{E} = 1,0 \times 10^{-3}$  e fase  $\delta\phi = 1,25 \times 10^{-2}$ , cujo valor máximo da busca era de  $\mathcal{E}_{max} = 1,6$  u.a. e  $\phi_{max} = 2\pi$  u.a., respectivamente. Por fim, determinamos o valor do parâmetro  $|\bar{\mu}| = 0,06078$ .

A função escolhida para representar o valor esperado da posição  $\langle \vec{R} \rangle(t)$  é expressa como

$$\langle \vec{R} \rangle(t) = S(t) = R_0 + r_3t + r_1 \sin^2(\pi r_2t) \exp(r_3t), \quad (3.46)$$

no qual definimos as constantes  $R_0 = 1,392174$  u.a.,  $r_1 = 0,8$  u.a.,  $r_2 = 7,5 \times 10^{-4}$  u.a. e  $r_3 = 4,0 \times 10^{-4}$  u.a., sendo  $r_0$  o menor autovalor do operador posição.

Seguindo o mesmo procedimento das seções anteriores, no painel (a) da Fig. 25 dividimos a amplitude pela maior diferença de energia  $\Delta E = 0,19033$  u.a., que nos indicou a necessidade de 48% de energia para controlar as oscilações do radical OH. Expomos no painel (c) a trajetória alvo sobreposta ao resultado do seu controle, onde induzimos variações da distância internuclear entre os átomos de Oxigênio e Hidrogênio. Nos cálculos, consideramos o momento de dipolo permanente do radical OH no Hamiltoniano total e calculamos os elementos de matriz do operador de dipolo elétrico com a função de Mecke [142]. Ainda na parte (a), observe o comportamento oscilatório do campo, exibindo variações em sua amplitude principalmente nas regiões em que  $dS(t)/dt$  (regiões entre os extremos de  $S$ ), e também acompanhando os pontos de máximo e mínimo de  $S(t)$ . Note também que existem soluções para a fase do laser durante toda a dinâmica, mas ela contribui mais significativamente no intervalo  $80 \leq \omega_0t \leq 228$  e também em torno de  $\omega_0t \approx 476$ .

Para finalizar a discussão, falaremos brevemente de alguns trabalhos que nos motivaram o estudo da molécula de OH. Ao analisar em uma gama de artigos publicados nos últimos anos, Keefer e Vivie-Riedle [143] observaram novas perspectivas de aplicações na área de controle quântico. Um dos exemplos citados foi o controle seletivo de transições vibracionais da ligação OH de um reagente alcoólico, proporcionando um aumento de 24% na taxa de formação de uretano e poliuretano (polimerização) [144]. Um procedimento

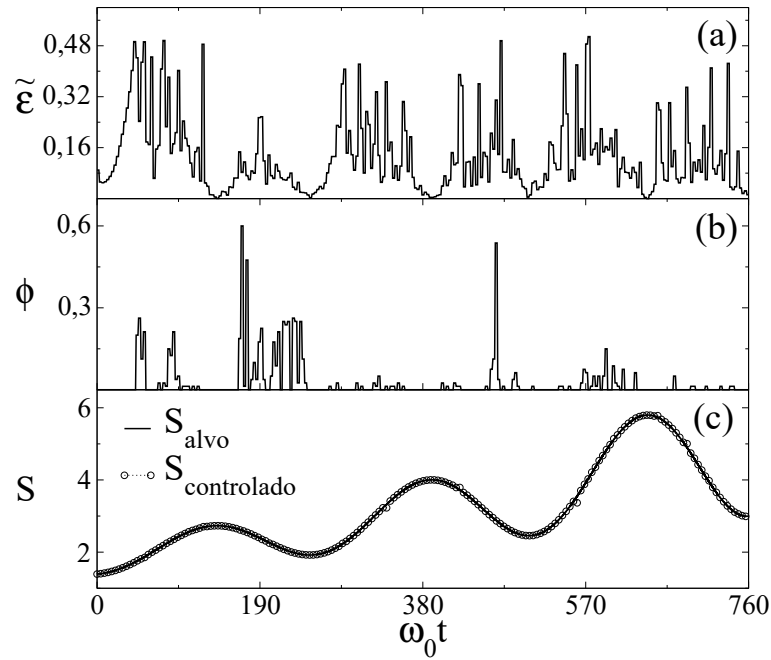


Figura 25 – No painel (a) dispomos o perfil do campo elétrico dividido por  $\Delta E = 0,19033$  u.a., na parte (b) apresentamos a fase. No terceiro painel (c) temos o controle do movimento vibracional da molécula de OH, correspondente a distância interatômica entre os átomos de Oxigênio e Hidrogênio, seguindo a função da Eq. (3.46), onde definimos  $\omega_0 = 0,19033$ . Note que o potencial externo não precisa fornecer mais do que 50% de energia para o oscilador descrever a trajetória  $S(t)$ .

semelhante poderia ser implementado através do controle paramétrico por partes visando aprimorar a taxa de formação molecular. Para esse caso particular seria necessário determinar as curvas de estrutura eletrônica das moléculas de interesse e impor uma nova trajetória alvo para a distância entre os átomos de Oxigênio e Hidrogênio - ou um outro observável do sistema - a ponto de induzir a reação de polimerização, por exemplo.

### 3.3.3 Controle Restrito de População

O controle populacional é amplamente explorado em aplicações na área da física atômica e molecular, principalmente através de técnicas espectroscópicas, onde é possível prever, manipular e induzir transições ópticas (assim, variando a população) entre os autoestados do sistema. Além do mais, existem determinadas aplicações em que é necessário impor um comportamento específico não somente para um certo observável  $\langle \mathcal{O} \rangle(t)$ , mas para dois ou até múltiplos observáveis alvo. Em aplicações na área de computação quântica isso é muito frequente, por exemplo, ao implementar determinada porta lógica, são definidos dois observáveis alvo: excitar a população de um *qubit*  $\langle \rho^{(1)} \rangle$  e manter a população do outro *qubit* inalterada  $\langle \rho^{(2)} \rangle$  [145].

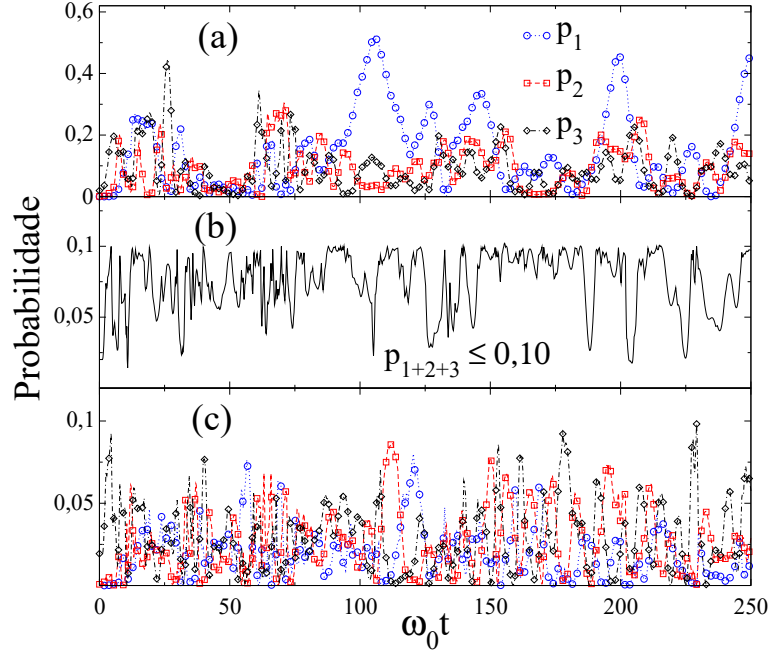


Figura 26 – Em (a) apresentamos as populações dos três primeiros estados do oscilador harmônico usando a mesma trajetória controlada na Fig. 21. No painel (b) é o resultado da restrição sobre a soma dessas três populações, com  $P_1 + P_2 + P_3 \leq 0,10$ . No terceiro painel (c) estão as populações controladas  $p_1$  (círculo),  $p_2$  (quadrado),  $p_3$  (diamante) com a restrição presente antes em (b). Repare que antes da restrição os  $p_n$ 's chegavam até  $\approx 0,55$  de ocupação.

Já em outras aplicações o objetivo é transferir a população de um nível para o maior estado excitado sem popular os estados intermediários. A técnica mais utilizada para reproduzir esse tipo de comportamento é conhecida como STIRAP (*Stimulated Raman Adiabatic Passage*) [146]. Basicamente, considerando  $N = 3$  níveis, dois campos de laser são lançados sobre o sistema com um ordenamento específico, ou ‘contra-intuitivo’, em que o primeiro feixe excita somente estados excitados ( $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ ) e o segundo feixe acopla os estados menos energéticos do sistema ( $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ ) [147]. Nessas condições, toda a população inicial que estava no estado  $|1\rangle$  tende a ser transferida diretamente para o estado  $|3\rangle$ , enquanto que o nível  $|2\rangle$  fica praticamente inacessível no processo. Geralmente esse estado não populado é chamado de *dark state* [148].

Logo, restringir a população de determinados níveis pode ser útil dependendo da aplicação de interesse. Sendo assim, a fim de demonstrar um resultado análogo aos exemplos citados, escolhemos o mesmo objetivo de controle  $S(t) = \langle x \rangle(t)$  exposto na Fig. 21 para  $N = 10$  níveis, impondo restrições sobre os três primeiros níveis de energia. A justificativa é que lá fizemos o controle direto da posição do oscilador sem impor nenhuma restrição ou condição adicional, ao contrário do que apresentamos na Fig. 26. Antes, elencamos algumas informações técnicas: A precisão definida para a trajetória é de  $\delta\epsilon_{S(t)} = 5,0 \times 10^{-3}$ , janela temporal de controle  $\omega_0\Delta t = 0,72$ , precisões do campo  $\delta\mathcal{E} = 1,0 \times 10^{-4}$  e fase

$\delta\phi = 1,25 \times 10^{-2}$ , cujo valor máximo da busca era de  $\mathcal{E}_{max} = 9$  u.a. e  $\phi_{max} = 2\pi$  u.a., respectivamente. Perceba que a janela temporal é menor do que a utilizada na Fig. 21, além disso, demandou-se mais energia do campo externo (algo em torno de 45% da energia do sistema) para tal finalidade.

Aplicando a restrição de população da Seção 3.2.2, torna-se

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{n,l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] (\Lambda^\dagger)_{1n} \right|^2 - P_1 + \\ & \left| \sum_{n,l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] (\Lambda^\dagger)_{2n} \right|^2 - P_2 + \\ & \left| \sum_{n,l,m} (\Gamma^\dagger)_{nl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i\omega_l\tau] (\Lambda^\dagger)_{3n} \right|^2 - P_3 \leq 10^{-2}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

onde  $P_1 + P_2 + P_3 \leq 0,10$  ( $P_k = |\langle \varepsilon_k | \psi_f \rangle|^2$ ). Seguimos exatamente todos os passos descritos na Sec. 3.1, com exceção do item (d), pois temos que garantir que a Eq. 3.48 também seja satisfeita para todo o tempo juntamente à trajetória  $\langle \mathcal{O} \rangle(\tilde{t}_j) = S_j$ .

Os resultados obtidos estão na Fig. 26. No painel (a) estão expostas as primeiras três populações sem nenhuma restrição (as mesmas da Fig. 21). Observe como todos os  $p_n$ 's variam na ordem de 0,55 ( $p_1$  - círculo) ou em média oscilando na faixa dos 0,30 ( $p_2$  - quadrado,  $p_3$  - diamante). Apresentamos no painel (b) a restrição da soma dessas populações (não expomos  $S(t)$ , mas a trajetória alvo foi perfeitamente controlada). Em nenhum instante ultrapassamos o limiar de 0,10 (com erro de  $10^{-2}$ ) em todo o intervalo considerado. Em (c) estão as populações de cada nível sob a restrição da parte (b). Apesar das rápidas variações, os  $p_n$ 's se alternam entre máximos e mínimos sem nenhuma componente ultrapassar o limite de 0,10. Optamos por não exibir os gráficos de amplitude e fase pelo fato do perfil qualitativo do campo ser análogo aos anteriores.

### 3.3.4 Controle Restrito da Probabilidade na Base do Observável

Novamente consideramos o problema de  $N = 10$  níveis, mas com uma análise diferente da seção anterior. Acabamos de ver uma forma de limitar a probabilidade de ocupação de certos níveis de energia. No entanto, levantamos o seguinte questionamento: É possível limitar a probabilidade de determinado autoestado na base de posição? E ainda conseguirmos controlar  $S(t)$ ? E de forma surpreendente a resposta é sim, de acordo com os resultados que seguem.

Antes de exibirmos os exemplos desta seção, seguem algumas informações técnicas. A precisão definida para a trajetória é de  $\delta\epsilon_{S(t)} = 5 \times 10^{-3}$ , janela temporal de controle  $\omega_0\Delta t = 0,36$ , precisões do campo  $\delta\mathcal{E} = 1,0 \times 10^{-4}$  e fase  $\delta\phi = 7,85 \times 10^{-2}$ , cujo valor máximo da busca era de  $\mathcal{E}_{max} = 13,5$  u.a. e  $\phi_{max} = 2\pi$  u.a., respectivamente. Assim como

no exemplo anterior, observamos uma mudança na largura da janela temporal e do campo máximo também (aqui usamos aproximadamente 65% da energia do sistema).

Se tomarmos a Eq. 3.15 da 3.2.1, que já está escrita na base do observável, temos

$$\left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{sl} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i \omega_l \tau] \right|^2 - p_8 \leq 10^{-2}. \quad (3.48)$$

com algumas manipulações simples. Implementamos o primeiro teste impondo  $p_8 \leq 0,02$  ( $p_k = |\langle o_k | \psi_f \rangle|^2$ ).

Os resultados estão expostos na Fig. 27. A escolha do autoestado  $n = 8$  foi baseada no comportamento do sistema sem restrição do painel (a), onde expomos somente as probabilidades que mais contribuem para a dinâmica da posição do oscilador no tempo. Note que praticamente os termos  $p_8$  ( $o_x^{(8)} = 0,878$ ) e  $p_{10}$  ( $o_x^{(10)} = 1,718$ ) (autovalor de posição  $o_x^{(n)}$  na base discreta) é que ‘controlam’ a trajetória alvo (sempre vamos no referir a curva (c) da Fig. 21). A proposta foi devidamente satisfeita em (b), e as outras probabilidades estão no painel (c). Aqui já surge um comportamento diferente do sistema irrestrito, pois  $p_9$  ( $o_x^{(9)} = 1,266$ ) passa a oscilar assumindo valores cada vez maiores (em  $\omega_0 t \approx 100$  atinge quase 0,90) e ainda se alterna com  $p_{10}$  até o término da evolução. Naturalmente, esperávamos que outros autoestados assumissem a dinâmica dado que  $p_8$  tornou-se ‘invisível’ ou inacessível ao sistema. Para aumentar sua intuição sobre a situação, imagine que a posição do oscilador possa oscilar normalmente de acordo com a trajetória  $S(t)$ , no entanto, a probabilidade de encontrar o sistema em distâncias na ordem de  $\langle x \rangle(t) \approx 0,878$  nunca será maior do que 2%.

No intuito de explorar uma situação diferente, também restringimos os termos  $p_3$ ,  $p_5$  e  $p_8$ , onde fizemos  $p_3 + p_5 + p_8 \leq 0,10$ , conforme a Fig. 27 (d), e em (e) expomos as probabilidades correspondentes (após o controle). A principal justificativa para a escolha desses  $p_n$ 's é que no painel (a) dessa mesma figura tais termos praticamente não contribuem com a dinâmica do sistema (com exceção de  $p_8$ ). A expressão utilizada em tal exemplo está indicada a seguir

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{3l} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i \omega_l \tau] \right|^2 - p_3 + \\ & \left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{5l} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i \omega_l \tau] \right|^2 - p_5 + \\ & \left| \sum_{l,m} (\Gamma^\dagger)_{8l} \Gamma_{lm} c_m^{(i)} \exp[-i \omega_l \tau] \right|^2 - p_8 \leq 10^{-2}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Finalizando a discussão, pretendemos buscar uma aplicação prática desse tipo de abordagem. É comum a manipulação das populações do sistema, mas geralmente as probabilidades na base de posição podem exibir qualquer comportamento. Uma análise complementar poderia ser estendida para outros observáveis em sistemas com mais graus

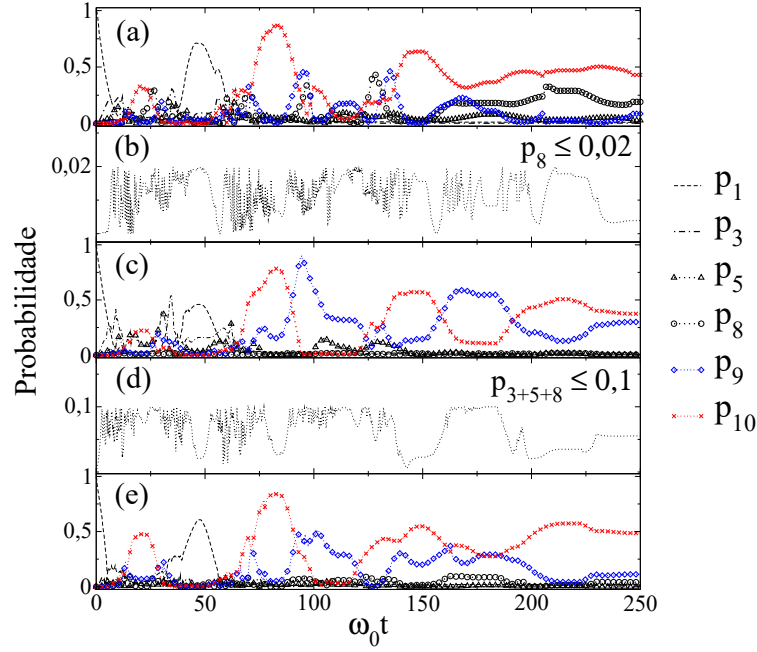


Figura 27 – Em (a) temos as probabilidades do sistema  $N = 10$  níveis correspondente ao controle irrestrito da Fig. 21. Em (b) apresentamos o resultado para a restrição autoestado  $p_8 \leq 0,02$ . Em (c) estão os outros  $p_n$ 's correspondentes ao item (b). No painel (d) expomos o controle restrito de  $p_3 + p_5 + p_8 \leq 0,10$ , seguido das respectivas probabilidades em (e). Temos  $p_1$  (traço),  $p_3$  (traço-ponto),  $p_5$  (triangulo),  $p_8$  (círculo),  $p_9$  (diamante) e  $p_{10}$  (estrela). Removemos os termos  $p_n$ 's excedentes para melhor visualização.

de liberdade, ou simplesmente controlando o mesmo observável de posição e restringindo as probabilidades na base de outro observável (como momento  $\vec{P}$ , momento angular  $\vec{L}$ , entre outros). Isso pode ser explorado em trabalhos futuros.

### 3.3.5 Controle de Mínima Dispersão

Vimos até o momento diferentes formas de controlar o valor esperado de um observável no tempo, seja de forma irrestrita ou adicionando determinadas condições extras no problema. Nesta seção discutiremos o controle de mínima dispersão aplicado a um *qutrit* (sistema com  $N = 3$ ) modelado por três níveis do oscilador harmônico. Antes de discutir os dados obtidos, definiremos o Hamiltoniano do sistema total com dois campos de laser, sendo

$$H^{(E)} = \begin{pmatrix} E_1 & -\Omega_{12}e^{-i\phi_{12}} & 0 \\ -\Omega_{12}e^{i\phi_{12}} & E_2 & -\Omega_{23}e^{-i\phi_{23}} \\ 0 & -\Omega_{23}e^{i\phi_{23}} & E_3 \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

onde  $\Omega_{nm} = \mu_{nm}\mathcal{E}_{nm}$  e assumimos que os termos diagonais do momento de dipolo são nulos  $\mu_{nn} = 0$ , além de desprezar o termo  $|\mu_{13}| \approx 0$ . A função que descreve a trajetória

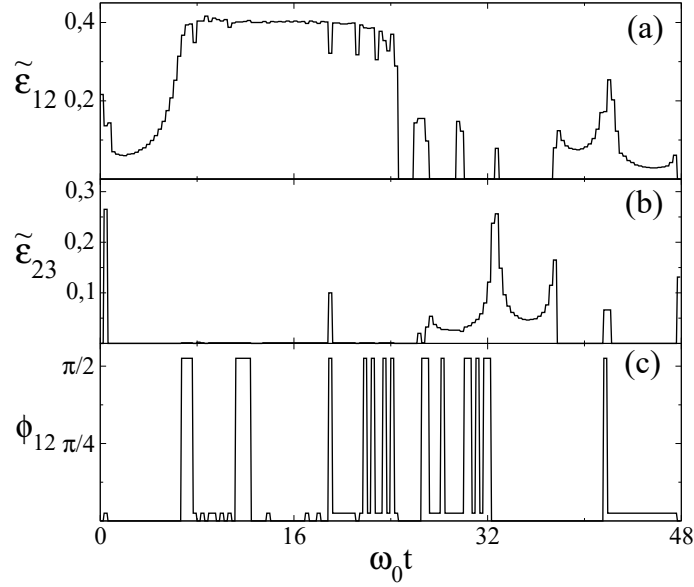


Figura 28 – Parâmetros do campo externo obtidos no controle de mínima dispersão com a amplitude dividida por  $\Delta E = 8$ . Nos painéis (a) e (b) estão as amplitudes  $\{\tilde{\mathcal{E}}_{12}, \tilde{\mathcal{E}}_{23}\}$  e nos painéis da parte inferior temos as fases  $\{\phi_{12}, \phi_{23}\}$  em (c) e (d). Não exibiremos a fase  $\phi_{23}$  pois ela não contribui para a evolução do sistema. Por fim, utilizamos  $\omega_0 = 8$ .

$S(t)$  é expressa por

$$S(t) = s_0 \sin(\omega t + \alpha) \exp(-s_1 t) \quad (3.51)$$

usando as constantes  $\omega = 1,0$ ,  $s_0 = -0,6$ ,  $s_1 = 0,05$  e  $\alpha = 0,5\pi$ .

Seguindo o padrão adotado nas seções anteriores, seguem as principais informações técnicas. A precisão definida para a trajetória é de  $\delta\epsilon_{S(t)} = 5 \times 10^{-3}$ , janela temporal de controle  $\omega_0 \Delta t = 0,32$ , precisões do campo  $\delta\mathcal{E} = 1,0 \times 10^{-2}$  e fase  $\delta\phi = 1,047 \times 10^{-2}$ , cujo valor máximo da busca dos campos foram  $\mathcal{E}_{max}^{(12)} = 2,5$  u.a. (31% da energia) e  $\mathcal{E}_{max}^{(23)} = 3,5$  u.a. (44% da energia), e das respectivas fases  $\phi_{max}^{(12)} = 2\pi$  u.a. e  $\phi_{max}^{(23)} = \pi$  u.a.. Definimos a dispersão numérica mínima do valor esperado do observável o valor  $\sigma_{\mathcal{O}} = 5 \times 10^{-2}$  para toda a trajetória, com exceção dos pontos críticos de controle (regiões onde não há concordância para os  $p_n$ 's na Fig. 28).

Os perfis do campo e fase estão na Fig. 28, com os parâmetros  $\{\mathcal{E}_{12}, \mathcal{E}_{23}\}$  em (a) e (b), e abaixo a fase  $\phi_{12}$  em (c). De acordo com (a) o campo varia suavemente até  $\omega_0 t \approx 24$ , sofrendo algumas variações de intensidade à medida que a presença do segundo campo (b) se torna necessária. Na realidade, o segundo campo é mais requisitado no intervalo  $25 \leq \omega_0 t \leq 40$ , pois fora dessa região existem apenas alguns picos separadamente. A fase é relevante ao longo de toda a dinâmica, mas oscila sistematicamente entre  $20 \leq \omega_0 t \leq 32$ , que seria a ‘interface’ de atuação de ambos os campos de controle.

Com relação o procedimento de minimização da dispersão no valor esperado, utilizamos a Eq. (3.32) como condição extra para o espaço de soluções e ainda atendendo os

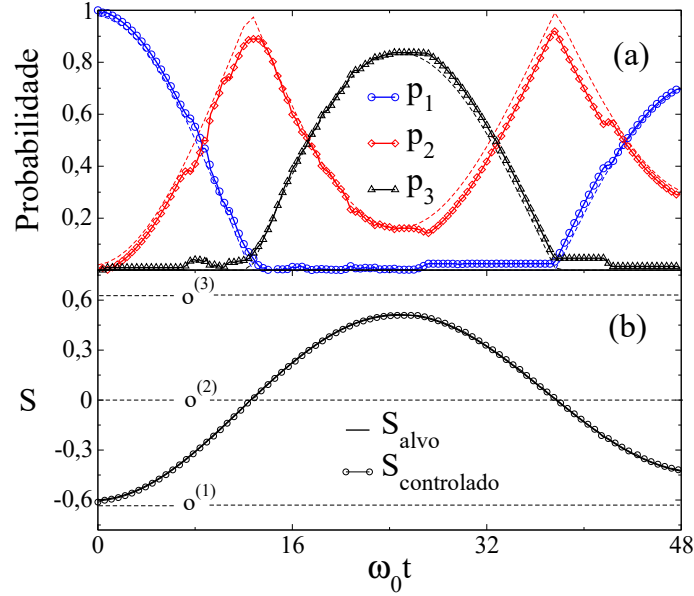


Figura 29 – Em (a) estão a probabilidade de ocupação de cada um dos três níveis do sistema com dispersão nula (linha tracejada) com a probabilidade obtida no controle. Foram aplicados dois campos simultaneamente, onde impomos o valor da dispersão sendo  $\sigma_O = 0,05$ . No segundo painel (b) a trajetória alvo é controlada com os três autovalores do observável indicados nas linhas tracejadas.

requisitos de  $S(t)$ . Na Sec. 3.2.3 provamos que para minimizar a dispersão, a probabilidade na base de posição precisa fazer com que  $S(t)$  fique sempre restrito a dois autovalores consecutivos, e para o *qutrit* temos  $o^{(1)} = -0,61237$ ,  $o^{(2)} = 0$  e  $o^{(3)} = -o^{(0)}$ . Portanto, buscamos por um conjunto de parâmetros  $\mathcal{E}_{nm+1}$ ,  $\phi_{nm+1}$  ( $n, m = 1, 2$  onde  $n < m$ ) para cada  $\Delta t_j$  tal que  $o^{(i)} \leq S(t_j) \leq o^{(i+1)}$  (índice dos autovalores do sistema  $i = 1, 2$ ), exatamente o mesmo obtido na Fig. 28. Vemos explicitamente na Fig. 29 as probabilidades (a), a função da trajetória alvo ( $S_{alvo}$ ) da Eq. (3.51) e controlada ( $S_{controlado}$ ) em (b) e as fases auxiliares  $\phi_k$  e  $\phi_{k-1}$  da Eq. (3.32) (c).

A fim de comparação, colocamos em tracejado as probabilidades com dispersão nula juntamente as probabilidade obtidas pelo método de minimização da dispersão. Antes de tudo, concentre sua atenção até o instante  $\omega_0 t < 16$ . Existem três linhas indicando os autovalores de posição, então visualmente percebemos que em toda a evolução somente duas componentes estão presentes, seja  $p_1$  e  $p_2$  ou  $p_2$  e  $p_3$ . Esse é o estado da arte para o controle de mínima dispersão, contudo, ainda é necessário refinar os algoritmos de busca para alcançar soluções melhores.

### 3.3.6 Síntese do Capítulo

Nesse capítulo apresentamos alguns exemplos de aplicações do controle direto a sistemas com diferentes valores de  $N$ , o que nunca havia sido investigado até então. Fizemos



uma breve verificação do número de soluções em cada janela temporal e sua conexão com o comportamento da trajetória alvo. Em seguida, controlamos a distância intermolecular do radical OH, simulando que os átomos constituintes se afastavam gradualmente no tempo. Aplicamos ao mesmo sistema de dez níveis do oscilador harmônico o controle de restrição de população, limitando a soma dos três primeiros níveis a 10%. Realizamos um protocolo análogo para as probabilidades em termos da base do observável de posição, ainda mantendo a soma em 10%. Encerramos o capítulo com o controle de mínima dispersão de um *qutrit* fornecendo resultados satisfatórios. Futuramente podemos aprimorar os resultados através de algoritmos mais refinados de busca por melhores soluções.

## 4 CONTROLE PARAMÉTRICO MISTO

---

*Este capítulo em um primeiro momento descreverá sucessivos aperfeiçoamentos do método misto de controle quântico. Duas propostas matemáticas serão apresentadas nas próximas seções, sendo a primeira relacionada à independência das variáveis oriundas do controle de 2-níveis efetivos e o uso do dispositivo de ortonormalização de Gram-Schmidt modificado (na forma explícita). Ao final do capítulo discutiremos os resultados parciais obtidos para três níveis, onde confrontaremos as múltiplas soluções encontradas graficamente.*

---

### 4.1 MODIFICAÇÕES PROPOSTAS

Na presente tese a proposta é mudarmos o método misto para explorarmos problemas físicos multiníveis e também para aprimorarmos duas etapas do protocolo, a saber: (i) tornar os parâmetros do problema de 2-níveis efetivos algebricamente independentes entre si (com solução analítica), ao contrário do apresentado anteriormente em [40] onde havia somente uma expressão de controle principal com as variáveis correlacionadas; (ii) construir as matrizes de transformação do Hamiltoniano do hiperplano  $2D$  efetivo para o espaço de Hilbert com a dimensão original  $N$  através da ortonormalização de Gram-Schmidt na forma explícita. Anteriormente, os autores calculavam os estados ortogonais numericamente (por exemplo, via eliminação gaussiana), mas agora faremos tal processo com as equações originais da técnica, como veremos nas próximas seções.

### 4.2 ORTONORMALIZAÇÃO DE GRAM-SCHMIDT

Introduziremos nesta seção um processo amplamente conhecido no campo da álgebra linear, denominado de ortonormalização de Gram-Schmidt. Apesar dos sobrenomes do atuariário<sup>1</sup> dinamarquês Jørgen Pederson Gram e do matemático alemão Erhard Schmidt

---

<sup>1</sup> É o profissional que usa recursos estatísticos para prever o comportamento do mercado financeiro.

constarem na definição do método, nenhum deles contribuiu diretamente na criação da técnica de ortonormalização de vetores. O primeiro utilizou tal método para resolver problemas de mínimos quadrados em sua tese, o segundo estudou determinadas classes de espaços vetoriais relacionadas a subespaços ortonormais [149, 150].

Poderíamos elencar inúmeras aplicações na física ou matemática do protocolo de Gram-Schmidt, contudo, um exemplo é suficiente para demonstrar os benefícios teóricos que tal método pode proporcionar. No estudo do transporte de excitação coerente em caminhantes quânticos de tempo contínuo (*CTQWs*)<sup>2</sup>, Xin-Ping Xu [151] determinou as probabilidades de transição via ortonormalização dos autoestados do Hamiltoniano. Basicamente através do método de Gram-Schmidt foi possível obter a primeira solução analítica envolvendo grafos do tipo estrela, que é de interesse na geração de *revivals* perfeitos dos caminhantes.

#### 4.2.1 Gram-Schmidt Clássico e Modificado

Considere o caso onde transformaremos uma base arbitrária  $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots, \mathbf{v}_n\}$  linearmente independente, que pertence a um subespaço vetorial no  $R^n$ , em uma base ortogonal  $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_n\}$  do referido subespaço [149]. Para construir tal conjunto ortogonal, precisamos subtrair de cada base a projeção dos vetores  $\{\mathbf{v}_n\}$  sobre  $\{\mathbf{u}_n\}$ , e repetimos esse processo para todas as outras bases do conjunto [152, 153]. Podemos expressar da seguinte forma

$$|u_1\rangle = |v_1\rangle, \quad (4.1)$$

$$|u_2\rangle = |v_2\rangle - \frac{\langle u_1 | v_2 \rangle}{\|u_1\|} |u_1\rangle, \quad (4.2)$$

$$|u_3\rangle = |v_3\rangle - \frac{\langle u_1 | v_3 \rangle}{\|u_1\|} |u_1\rangle - \frac{\langle u_2 | v_3 \rangle}{\|u_2\|} |u_2\rangle, \quad (4.3)$$

⋮

$$|u_n\rangle = |v_n\rangle - \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\langle u_j | v_n \rangle}{\|u_j\|} |u_j\rangle. \quad (4.4)$$

sendo a norma  $\|u_n\| = \sqrt{\langle u_n | u_n \rangle}$ . Após determinarmos o conjunto ortogonal  $\{\mathbf{u}_n\}$ , podemos obter o conjunto ortonormal fazendo  $|e_n\rangle = \frac{|u_n\rangle}{\|u_n\|}$ . Por inspeção visual das expressões acima conclui-se que  $\langle u_1 | u_2 \rangle = \langle u_2 | u_3 \rangle = \langle u_3 | u_1 \rangle = 0$ , refletindo a ortogonalidade das bases geradas.

Do ponto de vista algébrico, a ortogonalidade é trivialmente satisfeita, conforme citado no parágrafo anterior. No entanto, quando implementamos tal algoritmo em um computador, os vetores  $\{\mathbf{u}_n\}$  não saem perfeitamente ortogonais devido aos sucessivos

<sup>2</sup> Em inglês Continuous-Time Quantum Walks.

erros de arredondamento à medida que a dimensão dos vetores aumenta ( $R^n$  com  $n \rightarrow$  grande). Por esse motivo o denominamos método de Gram-Schmidt Clássico [152, 154].

Para remover os erros de arredondamento é necessário uma alteração no algoritmo, adicionando sucessivas atualizações para cada nova base ortogonalizada. Esse problema tem sido extensivamente explorado no campo da álgebra linear numérica [155], dada a sua importância prática. Agora, temos definitivamente o método de Gram-Schmidt Modificado, introduzindo resultados com menores erros oriundos da aritmética de precisão finita [156]. Em essência temos os mesmos vetores, sobretudo, com a ortogonalidade corrigida. A modificação consiste em produzir conjuntos intermediários  $\{\mathbf{u}_{j+1}^{(j)}, \mathbf{u}_{j+2}^{(j)}, \mathbf{u}_{j+3}^{(j)}, \dots, \mathbf{u}_n^{(j)}\}$ , onde cada vetor remanescente é corrigido e usado no próximo membro até o final do conjunto  $\mathbf{u}_j$ , como vemos a seguir

$$|u_1\rangle = |v_1\rangle, \quad \text{e} \quad |u_1\rangle = \frac{|u_1\rangle}{\|u_1\|}, \quad (4.5)$$

a primeira base continua intacta e já está normalizada nesse passo, a seguinte torna-se

$$|u_2^{(1)}\rangle = |u_2^{(0)}\rangle - \langle u_1 | u_2^{(0)} \rangle |u_1\rangle, \quad \text{e} \quad |u_2\rangle = \frac{|u_2^{(1)}\rangle}{\|u_2^{(1)}\|}, \quad (4.6)$$

onde  $|u_2^{(0)}\rangle = |v_2\rangle$ . A partir desse ponto o protocolo fica evidente, pois

$$\begin{aligned} |u_3^{(1)}\rangle &= |u_3^{(0)}\rangle - \langle u_1 | u_3^{(0)} \rangle |u_1\rangle, \\ |u_3^{(2)}\rangle &= |u_3^{(1)}\rangle - \langle u_2 | u_3^{(1)} \rangle |u_2\rangle, \\ &= |u_3^{(0)}\rangle - \langle u_1 | u_3^{(0)} \rangle |u_1\rangle - \langle u_2 | \left[ |u_3^{(0)}\rangle - \langle u_1 | u_3^{(0)} \rangle |u_1\rangle \right] |u_2\rangle, \\ |u_3\rangle &= \frac{|u_3^{(2)}\rangle}{\|u_3^{(2)}\|}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

de modo análogo, temos  $|u_3^{(0)}\rangle = |v_3\rangle$  e também podemos observar que o algoritmo modificado já fornece os vetores normalizados. Portanto, a fórmula geral do dispositivo de Gram-Schmidt modificado é expresso por

$$|u_j^{(k)}\rangle = |u_j^{(k-1)}\rangle - \langle u_k | u_j^{(k-1)} \rangle |u_k\rangle, \quad \text{com} \quad |u_k\rangle = \frac{|u_k^{(k-1)}\rangle}{\|u_k^{(k-1)}\|}, \quad (4.8)$$

válido para  $j = 2, 3, \dots, n$  e  $k = j - 1, \dots, n - 1$ , ou seja, o índice  $k$  pode assumir todos os valores inteiros para  $k < j$ . O custo computacional desse algoritmo cresce na ordem  $O(nk^2)$  de operações de ponto flutuante, sendo  $n$  a dimensionalidade dos vetores [157].

Além do processo de ortonormalização apresentado nos parágrafos anteriores, existem outros procedimentos que fornecem de maneira equivalente os mesmos resultados. Uma técnica simples e amplamente utilizada para tal propósito é aplicando a eliminação gaussiana [152]. Considere uma matriz  $M$  cujas linhas são os vetores  $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots, \mathbf{v}_n\}$ . Se prepararmos a matriz aumentada  $[M^\dagger M | M]$  e transformarmos o produto  $M^\dagger M$

em uma matriz triangular superior, no lugar de  $M$  teremos as respectivas linhas com os vetores ortogonais. Em resumo, a ortonormalização pode ser feita via reflexões de Householder [154], decomposição de Cholesky [157], etc. Enfim, existe uma gama de artifícios matemáticos na literatura disponíveis com essa finalidade. Após apresentarmos aqui os principais recursos da álgebra linear voltadas para a ortogonalização, iremos empregar o método de Gram-Schmidt no método misto de controle quântico.

### 4.3 ASPECTOS TEÓRICOS DO MÉTODO MISTO

Considere o Hamiltoniano  $H_0^{(\varepsilon)}$  de um sistema quântico arbitrário descrito no espaço de Hilbert com  $N$  níveis de energia, em termos da base  $\{|\varepsilon_n\rangle\}$  com  $n = 1, 2, \dots, N$  e autovalores  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$ , tal que  $H_0^{(\varepsilon)}|\varepsilon_n\rangle = \varepsilon_n|\varepsilon_n\rangle$ , portanto

$$|\varepsilon_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varepsilon_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad |\varepsilon_{n-1}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varepsilon_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Assumindo que um potencial externo  $V^{(\varepsilon)}$  atua em um sistema inicialmente não perturbado, definimos o Hamiltoniano total  $H^{(\varepsilon)} = H_0^{(\varepsilon)} + V^{(\varepsilon)}$ , tal que

$$\langle \varepsilon_n | H^{(\varepsilon)} | \varepsilon_m \rangle = \varepsilon_n \delta_{nm} + (1 - \delta_{nm}) v_{nm} e^{i \operatorname{sgn}(n-m) \phi_{nm}}, \quad (4.10)$$

com  $v_{nm} = v_{mn} \geq 0$ ,  $\operatorname{sgn}(n - m)$  o sinal de  $n - m$  se  $n \neq m$  e 0 se  $n = m$ , onde  $0 \leq \phi_{nm} = \phi_{mn} < 2\pi$ . Agora, na forma matricial,

$$H^{(\varepsilon)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & v_{12} e^{-i\phi_{12}} & v_{13} e^{-i\phi_{13}} & \dots & v_{1N} e^{-i\phi_{1N}} \\ v_{12} e^{i\phi_{12}} & \varepsilon_2 & v_{23} e^{-i\phi_{23}} & \dots & v_{2N} e^{-i\phi_{2N}} \\ v_{13} e^{i\phi_{13}} & v_{23} e^{i\phi_{23}} & \varepsilon_3 & \dots & v_{3N} e^{-i\phi_{3N}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ v_{1N} e^{i\phi_{1N}} & v_{2N} e^{i\phi_{2N}} & v_{3N} e^{i\phi_{3N}} & \dots & \varepsilon_N \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Os termos  $v_{nn}$  podem ser ou não nulos dependendo das características do sistema físico de interesse.

#### 4.3.1 Selecionando o Estado Alvo

Determinar os coeficientes que auxiliam no controle do valor esperado é uma das tarefas de maior importância nos métodos paramétricos inversos. Nesta seção discutiremos duas formas de se obter os coeficientes aos quais temos interesse. O primeiro procedimento é mais genérico e tem sido explorado desde os primórdios do método indireto, onde

analisamos geometricamente as probabilidades que constituem a trajetória alvo  $S(t)$ . Outra abordagem é mais restritiva, onde selecionamos o estado do sistema que satisfaça a relação  $o_{n-1} \leq \tilde{S} \leq o_n$ , ou seja, o valor esperado do observável deve estar entre dois autovalores consecutivos em cada instante. Veremos, a seguir, os detalhes de cada um dos protocolos citados.

### 4.3.2 Trajetória $S(t)$ Para Qualquer Autovalor $\{o_n\}$

Vamos introduzir um operador Hermitiano  $\mathcal{O}$  que será o observável que controlaremos no tempo. Os autovetores  $|o_n\rangle$  e os autovalores  $\{o_n\}$  são calculados pela diagonalização direta de  $\mathcal{O}$ . Suponha que o valor esperado desse observável possa ser expresso por uma função  $S(t)$ , no qual

$$S(t) = \langle \mathcal{O} \rangle (t) = \langle \psi(t) | \mathcal{O} | \psi(t) \rangle, \quad (4.12)$$

Se expandirmos o estado  $|\psi(t)\rangle$  na base do próprio observável, obtém-se

$$S(t) = \sum_n \rho_n(t) o_n, \quad (4.13)$$

com  $\rho_n(t) = |\langle o_n | \psi(t) \rangle|^2$ . Além disso, reduziremos um grau de liberdade sem perda de generalidade, com  $\rho_2(t) = 1 - \rho_1(t) - \sum_{k=3}^N \rho_k(t)$  ( $k = 3, 4, \dots, N$ ). Vamos denominar os  $\rho$ 's de probabilidades do observável e qualquer uma dessas componentes está apropriadamente normalizada em  $0 \leq \rho_n(t) \leq 1$ . Vamos reescrever a Eq. (4.13) como

$$S(t) = \rho_1(t) o_1 + \left[ 1 - \rho_1(t) - \sum_{k=3}^N \rho_k(t) \right] o_2 + \sum_{k=3}^N \rho_k(t) o_k. \quad (4.14)$$

A partir de agora iniciaremos o procedimento independente do tempo por partes. Propomos que em cada instante de tempo  $\tilde{t}$  conhecemos o valor da função  $S(\tilde{t}) = \tilde{S}$ . Logo, sempre existirá um  $\rho_n(\tilde{t}) = \rho_n$  que vai satisfazer  $\tilde{S} = \langle \mathcal{O} \rangle (\tilde{t})$ . Seguindo tal raciocínio,

$$\tilde{S} = \rho_1 o_1 + \left[ 1 - \rho_1 - \sum_{k=3}^N \rho_k \right] o_2 + \sum_{k=3}^N \rho_k o_k. \quad (4.15)$$

As múltiplas soluções que mencionamos nas seções introdutórias deste capítulo emergem ao selecionarmos o conjunto  $\{\rho_n\}$  que resulta em  $\tilde{S}$ . Uma forma conveniente de acessarmos tais soluções é imaginarmos um hiperespaço de parâmetros em termos de  $\{\rho_n\}$ . A princípio, o conceito de hiperespaço pode levar a suposição de que existem infinitas soluções de controle em cada instante  $t = \tilde{t}$ , no entanto, demonstramos graficamente na Fig. 30 que há uma região finita de soluções com dimensão  $(N - 1)$  [40]. Para ilustrarmos como representamos as probabilidades  $\{\rho_n\}$  do observável em um espaço multidimensional euclidiano, isolamos  $\{\rho_1\}$  na Eq. (4.15), sendo

$$\rho_1 = \sum_{k=3}^N \frac{o_k - o_2}{o_2 - o_1} \rho_k + \frac{o_2 - \tilde{S}}{o_2 - o_1}. \quad (4.16)$$

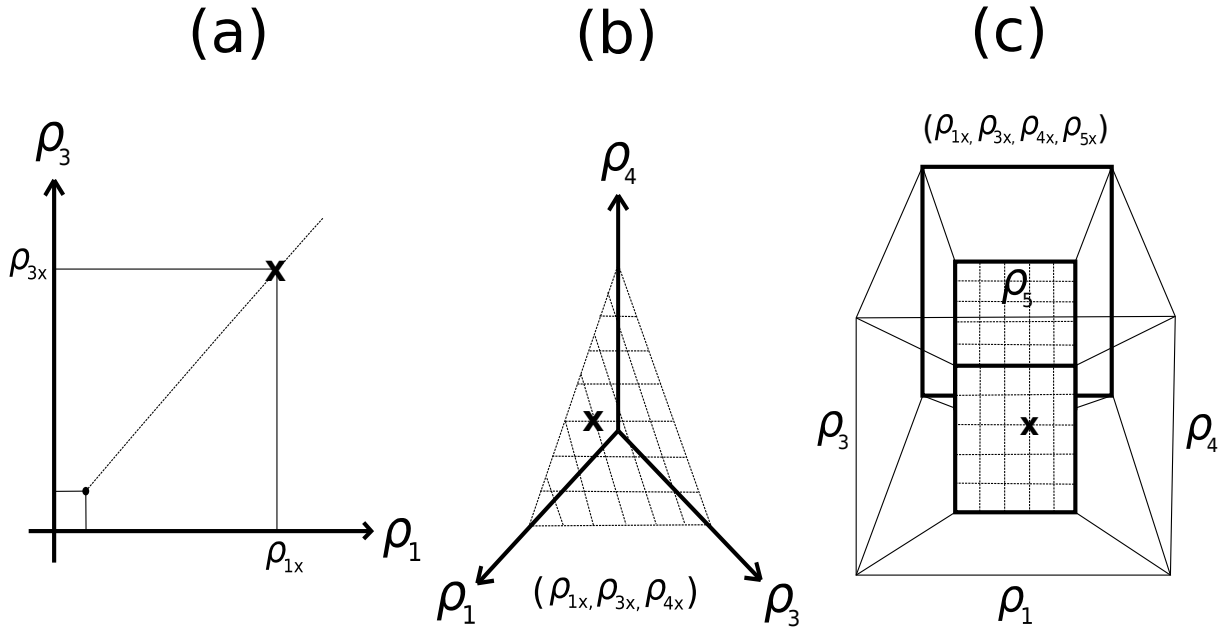


Figura 30 – Representação gráfica do espaço de parâmetros no controle da trajetória  $\tilde{S}$ . Em ‘ $x$ ’ estão as coordenadas do conjunto  $\{\rho_n\}$  considerando uma solução arbitrária para um sistema de (a) três, (b) quatro e (c) cinco níveis de energia. Note que para cada situação temos uma coordenada a menos, devido a parametrização  $\rho_2 = 1 - \rho_1 - \dots - \rho_N$ . Em (a) podemos observar que para três níveis as soluções encontram-se numa reta dada pelas coordenadas do ponto  $(\rho_{1x}, \rho_{3x})$ . Em (b), quando existem quatro níveis é formado um plano em um sistema tridimensional com uma solução qualquer na coordenada  $(\rho_{1x}, \rho_{3x}, \rho_{4x})$ . Por fim, em (c), fizemos uma extrapolação para cinco níveis onde constitui-se um hipercubo no espaço quadridimensional de soluções numa região qualquer dada por  $(\rho_{1x}, \rho_{3x}, \rho_{4x}, \rho_{5x})$ .

Assumindo que  $N = 3$  na Eq. (4.16) e que  $(\rho_1 + \rho_2 + \rho_3 = 1)$ , temos

$$\rho_1 = \frac{o_3 - o_2}{o_2 - o_1} \rho_3 + \frac{o_2 - \tilde{S}}{o_2 - o_1}, \quad (4.17)$$

que é explicitamente uma equação da reta cujo coeficiente linear está vinculado ao valor de  $\tilde{S}$  [40] e corresponde exatamente à Fig. 30 (a). Uma solução qualquer está representada no ponto ‘ $x$ ’ pelo par ordenado  $(\rho_{1x}, \rho_{3x})$  no instante  $t = \tilde{t}$ .

Se escolhermos  $N = 4$  na Eq. (4.16) e usando  $(\rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \rho_4 = 1)$ , assim expressamos,

$$\rho_1 = \frac{o_4 - o_2}{o_2 - o_1} \rho_4 + \frac{o_3 - o_2}{o_2 - o_1} \rho_3 + \frac{o_2 - \tilde{S}}{o_2 - o_1}, \quad (4.18)$$

no qual podemos representar através da equação do plano uma família de soluções para cada  $\tilde{S}$ , conforme à Fig. 30 (b). Na posição ‘ $x$ ’ estão as coordenadas  $(\rho_{1x}, \rho_{3x}, \rho_{4x})$  de uma solução possível obtida no tempo  $t = \tilde{t}$  para evoluir o vetor de estado  $|\psi(\tilde{t})\rangle$ , e assim, satisfazer a trajetória do observável  $\tilde{S} = \langle \psi(\tilde{t}) | \mathcal{O} | \psi(\tilde{t}) \rangle$  da Eq. (4.12).

No caso de  $N = 5$  com  $(\rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \rho_4 + \rho_5 = 1)$ , resulta em

$$\rho_1 = \frac{o_5 - o_2}{o_2 - o_1} \rho_4 + \frac{o_4 - o_2}{o_2 - o_1} \rho_3 + \frac{o_3 - o_2}{o_2 - o_1} \rho_2 + \frac{o_2 - \tilde{S}}{o_2 - o_1}, \quad (4.19)$$

nessa situação em particular é necessário analisarmos um hipercubo de soluções, sendo uma delas as coordenadas do ponto  $(\rho_{1x}, \rho_{3x}, \rho_{4x}, \rho_{5x})$  na Fig. 30 (c). Os exemplos gráficos mostrados são apenas um recurso didático para exemplificarmos o espaço de soluções. Quando aumentamos o número de níveis do sistema, fica difícil utilizar tal artifício do ponto de vista prático. Felizmente, procedimentos algébricos podem ser usados para tal construção.

A fórmula geral que descreve o estado  $|\psi(\tilde{t})\rangle$  em função do conjunto  $\{\rho_n\}$ , é definido como

$$|\psi(\tilde{t})\rangle = \sqrt{\rho_1} \exp[i\theta_{\rho_1}] |o_1\rangle + \sqrt{1 - \rho_1 - \sum_{k=3}^N \rho_k} |o_2\rangle + \sum_{k=3}^N \sqrt{\rho_k} \exp[i\theta_{\rho_k}] |o_k\rangle. \quad (4.20)$$

sendo  $\theta_{\rho_1}, \theta_{\rho_3}, \dots, \theta_{\rho_k}$  fases arbitrárias a serem escolhidas *a posteriori*. A Eq. (4.20) é portanto o estado alvo a ser considerado no método misto.

### 4.3.3 Trajetória $S(t)$ no Intervalo $o_{n-1} \leq \tilde{S} \leq o_n$

A parte inicial é semelhante ao proposto no início desta seção, onde definimos os autovalores  $\{o_n\}$  e autovetores  $|o_n\rangle$  provenientes de  $\mathcal{O}$ , sendo quantidades sempre conhecidas. No entanto, considerando a Eq. (4.12) para  $S(t)$ , podemos escrever o valor esperado como

$$S(t) = \rho(t) o_{n-1} + (1 - \rho(t)) o_n, \quad (4.21)$$

sabendo que  $0 \leq \rho(t) \leq 1$ , podemos determinar um  $\rho(t) \rightarrow \rho$  que satisfaz a trajetória  $\tilde{S}$  da janela de controle no instante  $t = \tilde{t}$ , tal que

$$\rho = \frac{o_n - \tilde{S}}{o_n - o_{n-1}}. \quad (4.22)$$

A partir desse ponto, não é necessário explorar espaços multidimensionais, pois já temos o peso probabilístico que garante a trajetória  $\tilde{S}$  entre dois autovalores consecutivos em  $\tilde{t}$ . Logo, podemos escrever vetor de estado alvo que forneça um  $\tilde{S} = \langle \psi(\tilde{t}) | \mathcal{O} | \psi(\tilde{t}) \rangle$  através da relação

$$|\psi(\tilde{t})\rangle = \sqrt{\rho} \exp[i\theta_1] |o_{n-1}\rangle + \sqrt{1 - \rho} \exp[i\theta_2] |o_n\rangle. \quad (4.23)$$

com as fases arbitrárias  $\theta_1$  e  $\theta_2$ .

É de interesse para o método misto que o vetor de estado final esteja escrito em termos das bases do Hamiltoniano não perturbado, tal que  $H_0^{(\varepsilon)} |\varepsilon_n\rangle = \varepsilon_n |\varepsilon_n\rangle$ . Sabemos



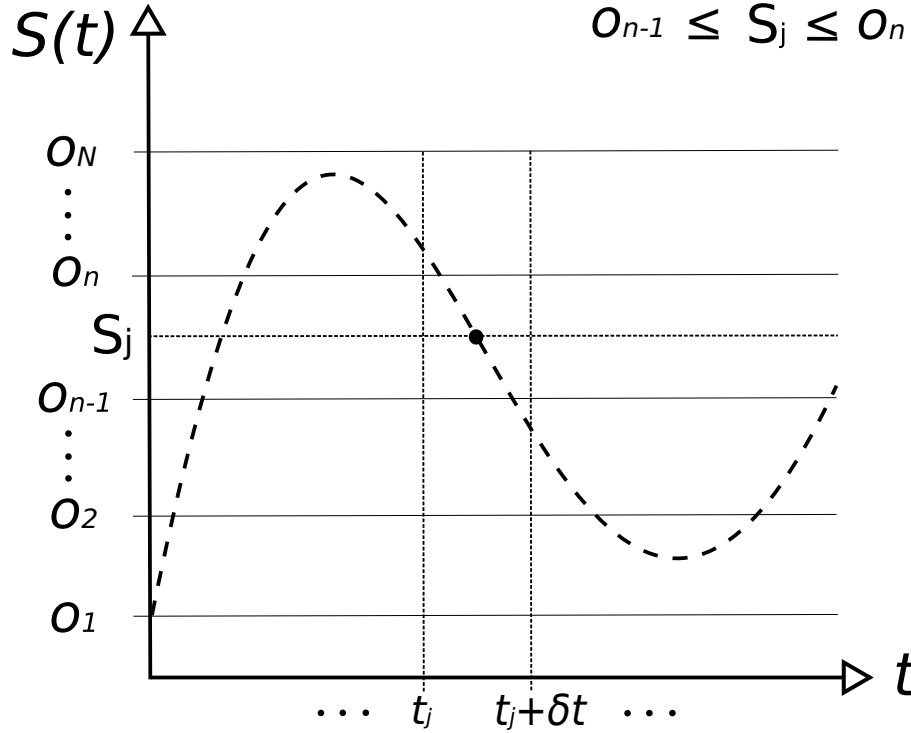


Figura 31 – Trajetória  $S(t)$  que descreve o valor esperado de um observável  $\langle \mathcal{O} \rangle$ . Observe que a curva passa por todos os autovalores do observável, mas sempre estará restrita à dois autovalores consecutivos. Se compararmos aos elementos  $\{\rho_n\}$  e os respectivos espaços de soluções da seção anterior, agora simplesmente teremos que escolher um único  $\rho$  que satisfaça o intervalo  $o_{n-1} \leq \tilde{S} \leq o_n$ , considerando a janela temporal  $t_j \leq \tilde{t} \leq t_j + \delta t$ .

que as bases do observável  $\mathcal{O}$ , onde  $\mathcal{O} |o_n\rangle = o_n |o_n\rangle$ , da Eq. (4.23) podem ser escritas como

$$|o_{n-1}\rangle = \sum_{m=1}^N a_m^{(n-1)} |\varepsilon_m\rangle \quad \text{e} \quad |o_n\rangle = \sum_{m=1}^N a_m^{(n)} |\varepsilon_m\rangle, \quad (4.24)$$

se substituirmos tais expressões na Eq. (4.23), e rearranjarmos o somatório para ambas as bases, obtemos o vetor de estado alvo

$$|\psi(\tilde{t})\rangle = \sum_{m=1}^N \left\{ a_m^{(n-1)} \exp[i\theta_1] \sqrt{\rho} + a_m^{(n)} \exp[i\theta_2] \sqrt{1-\rho} \right\} |\varepsilon_m\rangle. \quad (4.25)$$

A fim de detalhar melhor os passos teóricos desenvolvidos nesta seção, apresentamos as principais informações do procedimento na Fig. 31. Observe que a trajetória  $S(t)$  pode assumir qualquer valor entre  $o_1 \leq \tilde{S} \leq o_N$  para todo  $t$ . Ou seja, a curva pode passar por todos os autovalores do observável, contudo, é evidente na mecânica quântica que o valor esperado de qualquer operador sempre estará restrito à dois autovalores consecutivos, como destacado para  $\tilde{S}$  na parte central do gráfico. Aliado à discretização temporal imposta pelo método de controle misto, calculamos um  $\{\rho\}$  apropriado que satisfaça a condição  $o_{n-1} \leq \tilde{S}_j \leq o_n$  na janela temporal  $t_n \leq \tilde{t} \leq t_n + \delta t$ .

Eventualmente, pode surgir certo estranhamento a respeito da ausência do típico operador de evolução temporal  $U(t) = \exp[-iHt/\hbar]$  atuando sobre um vetor de estado, porém, antes destacaremos o ponto chave do que os autores propuseram em [24, 40, 41]. Apresentamos até o momento um procedimento pelo qual descobrimos a superposição do vetor de estado que conduz a dinâmica do sistema de interesse (veja as Eqs. (4.20) e (4.25)). O próximo passo seria determinar o perfil do potencial externo em um protocolo de controle inverso usual. Para tal, consideramos o estado da arte do método misto: o controle de dois níveis efetivos. Ainda que um problema de  $N$  níveis seja difícil de ser controlado, discutiremos nas próximas seções a transformação de  $N$  para dois níveis efetivos. Não se trata exatamente de dois níveis como se fossem autoestados de um Hamiltoniano de spin  $1/2$ , por exemplo. Na verdade olhamos para um subespaço bidimensional (um “plano”) do espaço de Hilbert do sistema. Tal plano (2-níveis) é composto pelos estados inicial  $|\psi_i\rangle$  e final  $|\psi_f\rangle$  da janela de controle. Isso significa que se evoluirmos o sistema a partir de uma janela temporal para a próxima dentro desse subespaço, seremos capazes de gerar uma combinação linear de todos os  $N$  níveis de energia do sistema real [40], tornando o mecanismo de controle condicionado à solução de um problema de dois níveis [24].

#### 4.4 O HIPERPLANO DE DOIS NÍVEIS EFETIVOS

Nesta seção exibiremos uma das etapas de maior importância para o método paramétrico misto, onde transformaremos o Hamiltoniano original de  $N$  níveis para um problema de 2 níveis efetivo. Logo, a maneira mais apropriada para tal objetivo é construirmos uma base que faça a transformação entre as representações no espaço de Hilbert. Os estados naturalmente escolhidos são: o inicial, quando  $|\psi(t = t_0)\rangle = |\psi_i\rangle$  e o final, sendo  $|\psi(t = \tau)\rangle = |\psi_f\rangle$ . Ambos estados são previamente conhecidos, pois sempre temos as condições iniciais do problema e também sabemos qual é o estado a ser alcançado em cada passo de controle (ver a Eq.(4.25)). Expandindo-os em termos das bases de  $H_0^{(\varepsilon)}$ , dado por  $\{|\varepsilon_n\rangle\}$ , temos

$$|\psi_i\rangle = \sum_n c_n^{(i)} |\varepsilon_n\rangle \quad \text{e} \quad |\psi_f\rangle = \sum_n c_n^{(f)} |\varepsilon_n\rangle, \quad (4.26)$$

no qual  $c_n^{(i)} = c_n(t_0)$  e  $c_n^{(f)} = c_n(\tau)$ . A nova base será obtida via ortonormalização de Gram-Schmidt (se necessário, ver a Seção 4.2). Considere uma base ortonormal intermediária  $\{|e_n\rangle\}$  para  $n = 1, 2, 3, \dots, N$ , começando por

$$|e_1\rangle = |\psi_i\rangle. \quad (4.27)$$

em seguida, escrevemos o elemento  $|e_2\rangle$  ortogonal a  $|e_1\rangle$ , e agora temos os elementos do subespaço que constituem o hiperplano  $\mathcal{H}_2$  expandido em termos dos estados  $|\psi_i\rangle$  e  $|\psi_f\rangle$ , no qual

$$|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 - |C|^2}} (C|\psi_i\rangle - |\psi_f\rangle) \quad (4.28)$$

com  $C = \langle \psi_i | \psi_f \rangle$ . Veremos adiante a importância do coeficiente  $C$  no controle da trajetória  $S(t)$ , apesar de tratá-lo apenas como um número complexo conhecido neste momento. Agora o protocolo de Gram-Schmidt<sup>3</sup> é invocado para obtermos todas outras bases ortogonais, por exemplo,

$$|e_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 - |C_1^{(3)}|^2 - |C_2^{(3)}|^2}} \left( |\alpha_3\rangle - C_1^{(3)} |e_1\rangle - C_2^{(3)} |e_2\rangle \right) \quad (4.29)$$

aqui  $C_m^{(n)} = \langle e_m | \alpha_n \rangle$ . O estado  $|\alpha_n\rangle$  pode assumir qualquer uma das bases do Hamiltoniano  $H_0 \{|\varepsilon_n\rangle\}$  para satisfazer a condição de ortogonalidade, dependendo do estado de controle no instante  $t = \tilde{t}$ . Os outros elementos são facilmente obtidos pela fórmula geral

$$|e_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 - \sum_{m=1}^{m=n-1} |C_m^{(n)}|^2}} \left( |\alpha_n\rangle - \sum_{m=1}^{m=n-1} C_m^{(n)} |e_m\rangle \right). \quad (4.30)$$

Uma vez conhecida a conexão entre  $\{|e_n\rangle\}$  e  $\{|\varepsilon_n\rangle\}$  definiremos a base intermediária no subespaço  $\mathcal{H}$ . Veja na Fig. 32 um diagrama exibindo a maneira que conectamos a base ortogonal nos hiperespaços  $\mathcal{H}$  e  $\mathcal{H}_2$ . Antes de avançarmos na discussão, destacaremos outra característica notável da ortonormalização de Gram-Schmidt, que é a obtenção de uma matriz unitária composta pelas novas bases calculadas. Definiremos ‘ $\Gamma$ ’ para ser a respectiva matriz unitária, tal que

$$|\varepsilon_n\rangle = \sum_m^{m=N} \Gamma_{mn} |e_m\rangle \quad \text{e} \quad |e_n\rangle = \sum_m^{m=N} (\Gamma^\dagger)_{mn} |\varepsilon_m\rangle. \quad (4.31)$$

Suponha que  $H^{(\varepsilon)}$  atue sobre a base  $|\varepsilon_n\rangle$  da Eq. (4.31) e depois multiplicamos um  $\langle \varepsilon_m |$  pelo lado esquerdo, no qual

$$\langle \varepsilon_m | H^{(\varepsilon)} | \varepsilon_n \rangle = \sum_p^{p=N} \sum_m^{m=N} \langle e_p | \Gamma_{pm} H^{(\varepsilon)} (\Gamma^\dagger)_{mn} | e_m \rangle. \quad (4.32)$$

Simplesmente não sabemos o resultado da ação de  $H^{(\varepsilon)}$  sobre a base  $|e_n\rangle$ , mas conhecemos quais elementos estão presentes na matriz resultante, ou seja,  $\Gamma H^{(\varepsilon)} \Gamma^\dagger$ . Se substituirmos  $H^{(\varepsilon)}$  pela sua forma original, seremos capazes de criar um novo operador  $H^{(e)}$  (veremos em breve a sua relevância), dado por

$$H^{(e)} = \Gamma(H_0^{(\varepsilon)} + V^{(\varepsilon)})\Gamma^\dagger. \quad (4.33)$$

Nesse momento vamos impor uma condição fundamental de que o potencial de controle  $V^{(\varepsilon)}$  faz com que  $H^{(e)}$  seja escrito como uma estrutura de blocos, em que

$$H^{(e)} = \begin{pmatrix} H^{(2)} & O \\ O^T & \Lambda^{(N-2)} \end{pmatrix}, \quad O^T = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}_{2 \times (N-2)}, \quad (4.34)$$

<sup>3</sup> Aqui empregamos a ortonormalização de Gram-Schmidt clássico apenas como demonstração, pois queremos focar na discussão teórica do método misto. A parte computacional foi escrita a partir do algoritmo modificado visando maior estabilidade e precisão numérica.

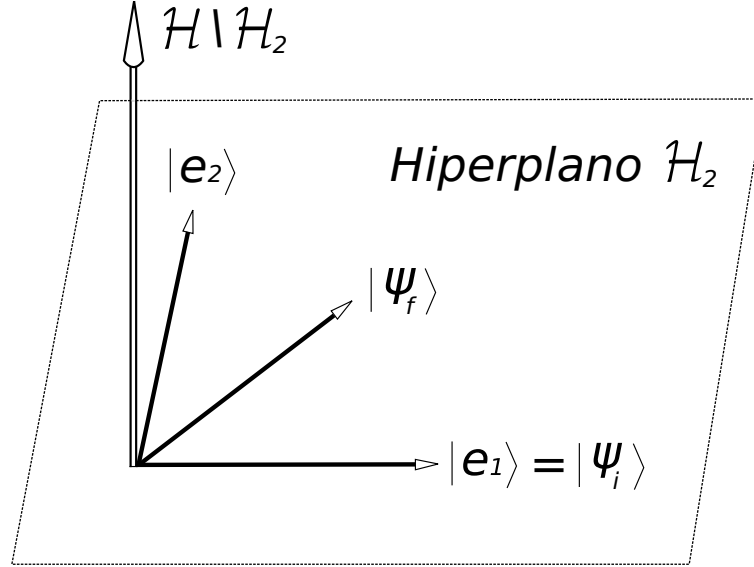


Figura 32 – Diagrama esquemático para as bases  $\{|e_n\rangle\}$  no espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ . O elemento de base  $|e_1\rangle$  coincide com o estado inicial  $|\psi_i\rangle$ , de acordo com a Eq. (4.27), ao passo que  $|e_2\rangle$  é outra componente ortogonal (pois  $\langle e_2 | e_1 \rangle = 0$ ), formando o espaço de 2-níveis efetivos no hiperplano  $\mathcal{H}_2$ . Expandimos essa base em termos dos estados inicial e final conforme a Eq. (4.28). As bases remanescentes  $\{|e_3\rangle, |e_4\rangle, \dots\}$  obedecem o algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt, e portanto, são elementos de  $\mathcal{H} \setminus \mathcal{H}_2$ .

aqui o  $( )^T$  significa a operação de transposição e  $O$  equivale a uma matriz nula de ordem  $2 \times (N - 2)$ , com

$$H^{(2)} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & u \exp[-i\phi] \\ u \exp[+i\phi] & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

com a fase  $\phi$ , o termo de amplitude  $u$  e os elementos da diagonal  $\lambda_1, \lambda_2$  definidos como  $\{(u, \phi, \lambda_1, \lambda_2) \in \Re e \mid 0 \leq \phi < 2\pi, u \geq 0, -\infty \leq \lambda_n \leq \infty\}$ , e

$$\Lambda^{(N-2)} = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{21}^* & \Lambda_{31}^* & \dots & \Lambda_{N-21}^* \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} & \Lambda_{32}^* & \dots & \Lambda_{N-22}^* \\ \Lambda_{31} & \Lambda_{32} & \Lambda_{33} & \dots & \Lambda_{N-23}^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \Lambda_{N-21} & \Lambda_{N-22} & \Lambda_{N-23} & \dots & \Lambda_{N-2N-2} \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

e temos  $\Lambda_{nn} \in \Re e (\forall n)$ . Avisamos que o potencial garantindo (4.34) pode não ser simples, mas este é o preço a ser pago pela simplicidade das equações finais.

Segundo as expressões matriciais que apresentamos ao longo da seção, o sistema de controle é decomposto nos subespaços  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_{N-2}$ . O ponto fundamental dessa proposta teórica é ter em mente que as bases  $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$  foram expandidas em termos dos estados  $|\psi_i\rangle$  e  $|\psi_f\rangle$ , o que garante que a evolução temporal das janelas de controle estarão sempre restritas ao sistema de 2-níveis efetivos, no entanto, nunca perderemos

informação do problema original de  $N$  níveis pelo fato dos estados inicial e final serem uma superposição linear das bases do Hamiltoniano original.

A pergunta a ser respondida é – como realizamos a evolução temporal? Veremos adiante a importância em determinar as variáveis  $u$ ,  $\phi$ ,  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  para evoluirmos o sistema em cada janela de controle. Na próxima seção será dado um significado para a expressão,

$$|\psi_f\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H^{(2)}\tau\right]|\psi_i\rangle, \quad (4.37)$$

onde  $\tau$  é largura da janela temporal no intervalo  $[t_0, t_0 + \tau]$  e assumindo que  $|\psi_f\rangle = |\psi(t = \tau)\rangle$ .

#### 4.5 CONTROLANDO DOIS NÍVEIS EFETIVOS

Apresentaremos nesta seção a maneira pela qual um sistema de  $N$  níveis é resolvido efetivamente como um problema de dois níveis [24]. Nosso objetivo é determinar um sistema de equações que descreverá a dinâmica temporal do sistema em função dos parâmetros  $u$ ,  $\phi$ ,  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$ , onde tais variáveis constituem os elementos da matriz na forma de bloco  $H^{(2)}$ . Deduziremos as equações de controle a partir de três passos chave:

(i) **Diagonalização do Hamiltoniano  $H^{(2)}$  para obter os autovetores  $\{|E_1\rangle, |E_2\rangle\}$  e os autovalores  $E_1$  e  $E_2$ .**

O resultado da diagonalização de  $H^{(2)}$  está organizado na primeira seção do Apêndice C. Abaixo, seguem os autovetores:

$$|E_1\rangle = A_1|e_1\rangle + B_1|e_2\rangle, \quad (4.38)$$

$$|E_2\rangle = A_2|e_1\rangle + B_2|e_2\rangle, \quad (4.39)$$

sendo

$$A_n = \frac{(-1)^n \sqrt{2} u \exp[-i\phi]}{G \sqrt{1 + (-1)^n (\lambda_2 - \lambda_1)/G}} \quad \text{e} \quad B_n = \sqrt{\frac{1 + (-1)^n (\lambda_2 - \lambda_1)/G}{2}}, \quad (4.40)$$

onde ( $n = 1, 2$ ) e  $G = \sqrt{4u^2 + (\lambda_2 - \lambda_1)^2}$ , e os autovalores:

$$E_1 = \frac{1}{2} \left[ (\lambda_2 + \lambda_1) - \sqrt{4u^2 + (\lambda_2 - \lambda_1)^2} \right], \quad (4.41)$$

$$E_2 = \frac{1}{2} \left[ (\lambda_2 + \lambda_1) + \sqrt{4u^2 + (\lambda_2 - \lambda_1)^2} \right]. \quad (4.42)$$

(ii) **Expandir o estado  $|\psi_i\rangle$  em termos das bases  $\{|E_n\rangle\}$  e obter os coeficientes  $d_1$  e  $d_2$ .**

Agora que conhecemos os autovetores de  $H^{(2)}$ , podemos escrever o estado inicial na forma

$$|\psi_i\rangle = |\psi(t_0)\rangle = d_1 |E_1\rangle + d_2 |E_2\rangle. \quad (4.43)$$

Quando construímos a base que conectaria os subespaços  $2D$  e  $N$ -dimensões (a matriz  $\Gamma$ ), iniciamos com  $|e_1\rangle = |\psi_i\rangle$ . Se substituirmos tal relação na Eq. (4.43), obtemos

$$|e_1\rangle = d_1 |E_1\rangle + d_2 |E_2\rangle, \quad (4.44)$$

nesse momento determinaremos os coeficientes  $d_1$  e  $d_2$ . Devido à diagonalização de  $H^{(2)}$ , sabemos que os seus autovetores fornecem uma relação direta entre as bases  $|E_n\rangle$  e  $|e_n\rangle$ . Se combinarmos as Eqs. (4.38) e (4.39) no lado direito da Eq. (4.44) e depois reagruparmos, obtemos

$$|e_1\rangle = (d_1 A_1 + d_2 A_2) |e_1\rangle + (d_1 B_1 + d_2 B_2) |e_2\rangle, \quad (4.45)$$

se multiplicarmos a Eq. (4.45) por um bra  $\langle e_1 |$  e depois pelo bra  $\langle e_2 |$  pela esquerda, surge um sistema de equações linear, onde

$$1 = d_1 A_1 + d_2 A_2, \quad (4.46)$$

$$0 = d_1 B_1 + d_2 B_2, \quad (4.47)$$

lembrando que  $\langle e_1 | e_2 \rangle = 0$ . A solução dos coeficientes é trivial, sendo

$$d_1 = \frac{B_2}{A_1 B_2 - A_2 B_1} \quad \text{e} \quad d_2 = \frac{-B_1}{A_1 B_2 - A_2 B_1}. \quad (4.48)$$

**(iii) Escrever o estado  $|\psi_f\rangle$  em termos das bases  $\{|E_n\rangle\}$  e deduzir um sistema de equações em função das variáveis  $(u, \phi, \lambda_1, \lambda_2)$**

Primeiramente, apresentamos o estado final no instante  $t = \tau$ , no qual

$$|\psi_f\rangle = |\psi(\tau)\rangle = d_1 \exp[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau] |E_1\rangle + d_2 \exp[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau] |E_2\rangle, \quad (4.49)$$

apenas atuamos o operador de evolução temporal no estado  $|\psi(t_0)\rangle$  da Eq. (4.43) para chegarmos no  $|\psi(\tau)\rangle$ . Antes de utilizarmos as expressões obtidas para  $d_1$  e  $d_2$ , retomaremos os cálculos lembrando que  $|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{1-|C|^2}} (C |\psi_i\rangle - |\psi_f\rangle)$ . Se manipularmos tal relação a fim de isolar  $|\psi_f\rangle$ , e em seguida substituirmos na Eq. (4.49), temos

$$C |e_1\rangle - \sqrt{1-|C|^2} |e_2\rangle = d_1 \exp[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau] |E_1\rangle + d_2 \exp[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau] |E_2\rangle, \quad (4.50)$$

traçando um caminho semelhante ao item anterior, isto é, combinando as Eqs. (4.38) e (4.39) no lado direito da Eq. (4.50), chegamos em

$$C |e_1\rangle - \sqrt{1-|C|^2} |e_2\rangle = \left( d_1 A_1 \exp[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau] + d_2 A_2 \exp[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau] \right) |e_1\rangle \quad (4.51)$$

$$+ \left( d_1 B_1 \exp[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau] + d_2 B_2 \exp[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau] \right) |e_2\rangle, \quad (4.52)$$

ao multiplicarmos a equação anterior por um  $\langle e_1 |$  e depois  $\langle e_2 |$  pela esquerda teremos duas novas expressões, sendo elas

$$C = d_1 A_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau\right] + d_2 A_2 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau\right], \quad (4.53)$$

$$-\sqrt{1 - |C|^2} = d_1 B_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau\right] + d_2 B_2 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau\right], \quad (4.54)$$

se inserirmos as relações encontradas para  $d_1$  e  $d_2$  nas Eqs. (4.53) e (4.54), e colocarmos os termos comuns em evidência, temos

$$C = \frac{B_1 B_2}{(A_1 B_2 - A_2 B_1)} \left( \frac{A_1}{B_1} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau\right] - \frac{A_2}{B_2} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau\right] \right), \quad (4.55)$$

$$-\sqrt{1 - |C|^2} = \frac{B_1 B_2}{(A_1 B_2 - A_2 B_1)} \left( \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau\right] - \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau\right] \right). \quad (4.56)$$

Essa já seria a resposta final se não estivéssemos interessados em uma expressão que tivesse explicitamente os parâmetros  $(u, \phi, \lambda_1, \lambda_2)$ . Os cálculos algébricos para tal são trabalhosos e não são fundamentais aqui, pois precisaremos dos autovalores dispostos nas Eqs. (4.41) e (4.42) juntamente aos coeficientes  $A_n$  e  $B_n$  expostos na Eq. (4.40). Assim tais derivações são apresentadas na seção C.2 do Apêndice C. O resultado final é

$$C = \exp\left[-i \frac{\lambda_+ \tau}{2\hbar}\right] \left( \cos\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right] + i \frac{\lambda_-}{G} \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right] \right), \quad (4.57)$$

$$\sqrt{1 - |C|^2} = \exp\left[i \left(\phi - \frac{\lambda_+ \tau}{2\hbar}\right)\right] \frac{2u}{G} i \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right]. \quad (4.58)$$

Temos  $\lambda_{\pm} = \lambda_2 \pm \lambda_1$  e  $G = \sqrt{4u^2 + \lambda_-^2}$ . Embora tal conjunto de equações tenha quatro incógnitas, é possível encontrar uma solução exata fazendo considerações apropriadas.

#### 4.5.1 Solução dos Parâmetros no Subespaço 2-D Efetivo

Considere as Eqs. (4.57) e (4.58). A segunda expressão, em especial, deve necessariamente ser uma igualdade entre funções reais, pois sempre  $|C|^2 \leq 1$ . Consequentemente, impomos que a parte imaginária do lado direito deve ser nula, com

$$\cos\left[\phi - \frac{\lambda_+ \tau}{2\hbar}\right] = 0 \Rightarrow \left(\phi - \frac{\lambda_+ \tau}{2\hbar}\right) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi. \quad (4.59)$$

Da parte real obtemos<sup>4</sup>  $\sin\left[\phi - \frac{\lambda_+ \tau}{2\hbar}\right] = (-1)^n$ . Sabemos que a quantidade  $C$  é um número complexo, logo, é conveniente defini-lo na forma polar  $C = c \exp[i\varphi]$ , onde  $c \geq 0$  e  $0 \leq \varphi < 2\pi$ . Substituindo tais relações nas Eqs. (4.57) e (4.58), obtemos

$$c \exp[i\phi] = (-1)^n \left( i \cos\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right] - \frac{\Delta\lambda}{G} \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right] \right), \quad (4.60)$$

$$\sqrt{1 - |c|^2} = -(-1)^n \frac{2u}{G} \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right]. \quad (4.61)$$

<sup>4</sup> Observe o número complexo  $i$  na Eq. (4.58) que ao ser multiplicado pela exponencial complexa expandida pela fórmula de Euler, nos dá  $i \cos[\phi - \lambda_+ \tau / 2\hbar] - \sin[\phi - \lambda_+ \tau / 2\hbar]$ . Por esse motivo temos a função seno representando a parte real.

Nesse ponto já conseguimos simplificar uma das expressões principais. Agora, decompondo entre partes reais e imaginárias a Eq. (4.60), chegamos no sistema

$$\begin{cases} c \cos[\gamma] = -(-1)^n \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} \sin[\sqrt{x^2+y^2}], \\ c \sin[\gamma] = (-1)^n \cos[\sqrt{x^2+y^2}], \\ \sqrt{1-c^2} = -(-1)^n \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} \sin[\sqrt{x^2+y^2}], \end{cases} \quad (4.62)$$

em que usamos as novas variáveis  $x = u/(\hbar/\tau) \geq 0$ ,  $y = \lambda_-(2\hbar/\tau)$  e  $\gamma = \phi + \varphi$ .

Observe que elevando todas as expressões ao quadrado, veremos que a soma da primeira com a terceira equação será exatamente igual a segunda. Isso significa que uma das relações é redundante, a menos de um sinal apropriado. Agora, combinando a primeira e a terceira equação do sistema (4.62), encontramos

$$x c \cos[\gamma] = y \sqrt{1-c^2}, \quad (4.63)$$

após simplificações. Isolando  $y$  do lado direito, elevando tudo ao quadrado, somando  $x^2$  em ambos os lados e tomando a raiz quadrada, chegamos em

$$x \sqrt{\frac{1-c^2 \sin^2[\gamma]}{1-c^2}} = \sqrt{x^2+y^2}. \quad (4.64)$$

Se tomarmos o cosseno em ambos os termos da igualdade na Eq. (4.63) e compararmos com a segunda identidade da Eq. (4.62), obtemos

$$\cos \left[ x \sqrt{\frac{1-c^2 \sin^2[\gamma]}{1-c^2}} \right] = z, \quad (4.65)$$

definindo  $z = (-1)^n c \sin[\gamma]$ , onde  $|z| \leq 1$ .

Como estamos trabalhando com equações algébricas não-lineares, devemos tomar cuidado na definição das funções trigonométricas inversas, garantindo o máximo de generalidade para o espaço de soluções. Desse modo, considere  $-1 \leq b \leq +1$  sendo os principais valores para a função  $\arccos[b]$  pertencendo ao intervalo  $[0, \pi]$ , então  $\cos[a] = b$  tem como solução  $a = (-1)^\alpha \arccos[b] + 2m\pi$  (onde  $\alpha = 0, 1$  e  $m$  é um inteiro arbitrário). Logo, se resolvermos a Eq. (4.65) para  $x$ , e em seguida isolarmos  $y$  na Eq. (4.63) (usando  $x$ ), nos fornece

$$x = \sqrt{\frac{1-c^2}{1-c^2 \sin^2[\gamma]}} \left( (-1)^\alpha \arccos[z] + 2m\pi \right), \quad (4.66)$$

$$y = \frac{c \cos[\gamma]}{\sqrt{1-c^2 \sin^2[\gamma]}} \left( (-1)^\alpha \arccos[z] + 2m\pi \right). \quad (4.67)$$



Salientamos que uma das variáveis acima sempre será positiva, mais especificamente  $x \geq 0$  (pois  $u \geq 0$ ). Observe que  $(-1)^\alpha \arccos[z] + 2m\pi$  deve ser positivo para que  $x > 0$  e  $y$  tenha o mesmo sinal que  $\cos[\gamma]$ .

Determinaremos o sinal correto fazendo o seguinte: primeiro elevamos ao quadrado as Eqs. (4.66) e (4.67), e em seguida somamos. Por fim, calculamos a raiz quadrada do resultado, chegando em

$$\sqrt{x^2 + y^2} = (-1)^\alpha \arccos[z] + 2m\pi. \quad (4.68)$$

Finalmente, usando as Eqs. (4.66)–(4.68) e ao menos a primeira ou a terceira expressão do sistema disposto na Eq. (4.62), obtemos

$$\sqrt{1 - c^2 \sin[\gamma]} = -(-1)^\alpha (-1)^n \sin[\arccos[z]], \quad (4.69)$$

mas desde que  $\sin[\arccos[z]] = \sqrt{1 - z^2} = \sqrt{1 - c^2 \sin[\gamma]}$ , então

$$(-1)^\alpha = -(-1)^n \Rightarrow 2m\pi > (-1)^n \arccos[(-1)^n c \sin[\gamma]], \quad (4.70)$$

e daqui concluímos também que  $\alpha = n + 1$ .

Agora que temos a solução do sistema de equações podemos retornar às variáveis originais do Hamiltoniano  $H^{(2)}$ . Sabemos que a variável  $x$  é diretamente proporcional a  $u$  e a fase é simplesmente  $\gamma = \phi + \varphi$ . A solução de  $y$  corresponde a  $\lambda_- = \lambda_2 - \lambda_1$ , mas também conhecemos o valor de  $\lambda_+ = \lambda_2 + \lambda_1$  usando a Eq. (4.59), que ao serem associadas nos fornecem

$$\phi = \gamma - \varphi, \quad (4.71)$$

$$u = x \left( \frac{\hbar}{\tau} \right), \quad (4.72)$$

$$\lambda_1 = \left\{ \phi - \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi - y \right\} \left( \frac{\hbar}{\tau} \right), \quad (4.73)$$

$$\lambda_2 = \left\{ \phi - \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi + y \right\} \left( \frac{\hbar}{\tau} \right), \quad (4.74)$$

onde  $\tau$  é o passo temporal e  $n = 0, 1, 2, \dots, N$ . De acordo com as definições apresentadas ao longo dessa seção, o coeficiente  $C = \langle \psi_0 | \psi_f \rangle$  é expresso na forma polar  $C = c \exp[i\varphi]$ . Logo,  $c$  e  $\varphi$  serão sempre quantidades conhecidas, pois  $0 \leq |c| = |C| \leq 1$  e  $\varphi = \arcsin[\Im_m[C/c]]$ , restrita ao intervalo  $0 \leq \varphi < 2\pi$ . Por fim, o parâmetro que afeta todas as variáveis das Eqs. (4.71) – (4.74) é  $\gamma$  com  $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ . Os termos  $x$  e  $y$  também possuem valores conhecidos, apresentados anteriormente pelas relações (4.66) – (4.67), respectivamente, tal que  $\alpha = n + 1$ ,  $z = (-1)^n c \sin[\gamma]$  e o número  $m$  é um inteiro válido para  $2m\pi > (-1)^n \arccos[z]$ . Em síntese, todos os coeficientes e constantes aqui apresentados evidenciam outra característica fundamental do método misto – as múltiplas soluções de controle.

Para ilustrar tais resultados, construímos um conjunto de superfícies das múltiplas soluções associadas ao controle de 2-níveis efetivos, conforme a Fig. 33. Optamos por analisar diretamente as quantidades  $u$  (à esquerda) e  $\lambda_- = \lambda_2 - \lambda_1$  (à direita) em função da fase  $\gamma$ , do coeficiente  $c$  e dos números  $n, m$  (lembrando que  $x = u/(\hbar/\tau)$  e  $y = \lambda_-(2\hbar/\tau)$ ). Renormalizamos todas as curvas em termos das unidades  $(\hbar/\tau)$  e  $(2\hbar/\tau)$  para  $u$  e  $\lambda_-$ , respectivamente. Separamos os resultados em duas colunas principais, sendo a primeira uma superfície com todas as soluções paramétricas possíveis e a outra com três valores específicos do coeficiente  $c$ , sendo  $c = 0, 1, c = 0,5$  e  $c = 0,9$ , escolhidos unicamente para gerar essas superfícies, mas geralmente são determinados durante o controle. Na primeira situação (a) tomamos  $n = 0$  e  $m = 1$ , na parte (b) usamos  $n = 0$  e  $m = 2$ , para o caso (c)  $n = 1$  e  $m = 0$  e por fim em (d) usamos  $n = m = 1$ . Em síntese, para baixos valores do parâmetro  $c$  as variáveis  $u$  e  $\lambda_-$  são praticamente independentes de  $\gamma$ , mantendo um perfil aproximadamente constante. Em contrapartida, quando  $c \rightarrow 1$  são exibidos determinados padrões que variam em função de  $\gamma$ . Note que a amplitude  $u$  apresenta um formato de gaussiana em torno de  $\gamma = \pi/2$  e  $\gamma = 3\pi/2$ , e nessa mesma região,  $\lambda_-$  tende a aumentar de intensidade. Os valores positivos de  $\lambda_-$  representam resultados em que  $\lambda_2 > \lambda_1$ , e quando  $\lambda_- < 0$ , temos  $\lambda_2 < \lambda_1$ . Traduzindo para a realidade física do problema de controle, quando  $\lambda_2 > \lambda_1$  estamos excitando opticamente o sistema quântico, induzindo transições para autoestados de maior energia. Quando ocorrem transições de níveis mais energéticos para os menos energéticos, conseqüentemente temos  $\lambda_2 < \lambda_1$ . Avaliando a influência de  $n$  e  $m$  no sistema, em geral, à medida que o número  $m$  cresce a amplitude também aumenta mantendo o mesmo perfil (comparando os diferentes valores de  $c$  em cada caso). Contudo, dada a natureza não linear das equações, para  $n > 0$  e considerando o espaço de parâmetros de  $\gamma$ , observamos alterações tanto na intensidade quanto no formato das superfícies.

Através da análise desse conjunto de gráficos evidenciamos a importância do desenvolvimento teórico exposto até então. Em suma, a partir do espaço de soluções, cuja dependência dos parâmetros é bem definida, podemos traçar estratégias para selecionar o melhor conjunto  $(u, \phi, \lambda_1, \lambda_2)$  que controle a trajetória  $S(\tilde{t})$  em cada janela temporal  $t_0 \leq \tilde{t} \leq t_0 + \delta t$ .

#### 4.6 AS CONDIÇÕES PARA O CONTROLE TOTAL DE UM SISTEMA DE $N$ NÍVEIS

Após determinarmos os parâmetros apropriados para o problema de 2-níveis efetivo, o passo principal para o controle da trajetória é resolver a Eq. (4.33), onde  $H^{(e)}$  tem a forma de blocos na Eq. (4.34) com os elementos de  $H^{(2)}$  totalmente conhecidos (como descrito na seção anterior) e  $\Lambda^{(N-2)}$  é uma matriz totalmente arbitrária, logo, seus elementos podem ser tratados como parâmetros livres. Ao todo temos  $(N - 2)^2$  variáveis reais da matriz  $\Lambda^{(N-2)}$  de ordem  $(N - 2) \times (N - 2)$ .

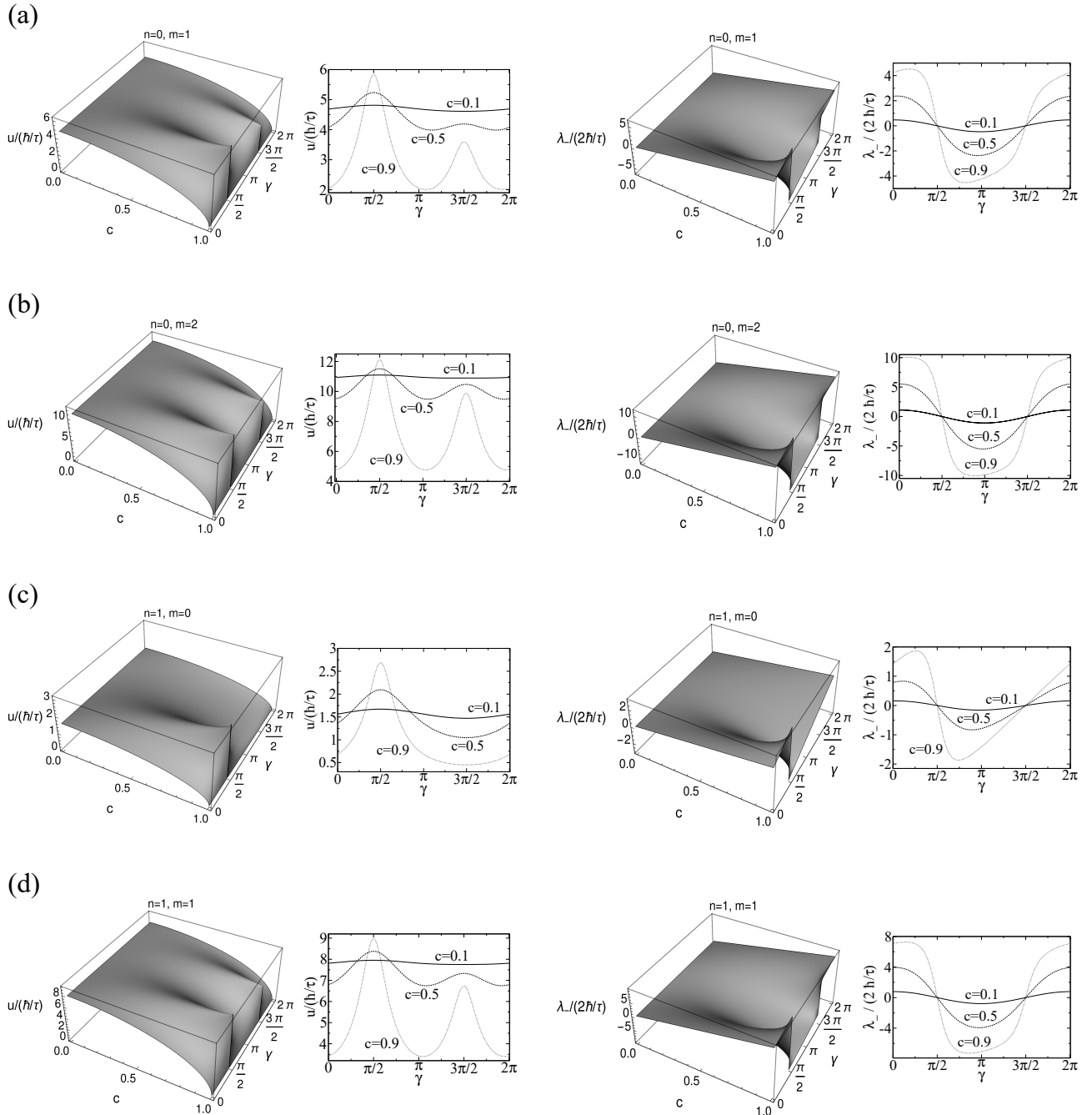


Figura 33 – Espaço de soluções para a amplitude  $u$  (à esquerda) e diferença dos elementos da diagonal  $\lambda_-$  (à direita) em função da fase  $\gamma$ , do coeficiente  $c$  e dos números  $n, m$ . Renormalizamos todas as curvas em termos das unidades  $(\hbar/\tau)$  e  $(2\hbar/\tau)$  para  $u$  e  $\lambda_-$ , respectivamente. Em (a) tomamos  $n = 0$  e  $m = 1$ , na parte (b) usamos  $n = 0$  e  $m = 2$ , para o caso (c)  $n = 1$  e  $m = 0$  e por fim em (d) usamos  $n = m = 1$ . Em geral, observamos que os menores valores para as variáveis  $u$  e  $\lambda_-$  ocorrem em todas as superfícies quando  $\gamma = \pi$ , assumindo que o coeficiente  $c \rightarrow 1$  indica transições mais suaves entre estados  $|\psi_i\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle$ .

Vamos parametrizar o potencial externo de controle como  $V_{nm}^{(\varepsilon)} = v_{nm} \exp[i \operatorname{sgn}(n - m) \phi_{nm}]$  (com  $v_{nm} = v_{mn}$ ,  $0 \leq \phi_{nm} = \phi_{mn} < 2\pi$ , e  $\operatorname{sgn}(n - m)$  sendo o sinal de  $n - m$

se  $n \neq m$  e 0 se  $n = m$ ). Naturalmente, considerar um potencial completamente geral seria totalmente impraticável para implementações concretas (e voltaremos a esta questão futuramente). No momento vamos discutir apenas a possibilidade teórica de controle para qualquer sistema de  $N$  níveis. Portanto, assumindo um potencial genérico multiparamétrico, temos  $N^2$  variáveis reais distintas.

Escrevemos, então

$$h_{nm} = (\Gamma H_0^{(\varepsilon)} \Gamma^\dagger)_{nm}, \quad \mathcal{V}_{nm} = (\Gamma V^{(\varepsilon)} \Gamma^\dagger)_{nm}, \quad (4.75)$$

no qual os  $h_{nm}$ 's possuem valores numéricos especificados e os  $\mathcal{V}_{nm}$ 's são funções do potencial paramétrico original. Assim construímos um sistema linear de equações

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= h_{11} + \mathcal{V}_{11}, \\ \lambda_2 &= h_{22} + \mathcal{V}_{22}, \\ u \exp[i\phi] &= h_{21} + \mathcal{V}_{21}, \\ 0 &= h_{nm} + \mathcal{V}_{nm}, \quad n \geq 3, \quad m = 1, 2, \\ \Lambda_{n-2m-2} &= h_{nm} + \mathcal{V}_{nm}, \quad n \geq 3, \quad m = 3, \dots, n. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Agora, supondo que não temos simetrias especiais fazendo algumas das equações acima serem equivalentes, no total temos  $N(N+1)/2$  equações complexas independentes, relacionando  $N(N+1)$  equações reais.

Desta forma, no caso mais geral possível, temos o excesso de variáveis em relação ao número total de equações no sistema acima contabilizando por  $\delta = N^2 + (N-2)^2 - N(N+1) = N^2 - 5N + 4$ . Note que para  $N = 3$ ,  $N = 4$ , e  $N \geq 5$  temos respectivamente,  $\delta = -2$ ,  $\delta = 0$ , e  $\delta > 0$ . Um sistema de equações lineares tem exatamente uma solução se  $\delta = 0$ . Está subdeterminado se  $\delta > 0$  e significa que tem mais de uma solução. Finalmente, está sobredeterminado se  $\delta < 0$ . Vale mencionar que tal análise poderia ser aperfeiçoada. Portanto, ainda poderíamos parametrizar o potencial externo de maneira conveniente e discutir as condições de controle quântico, mas tal condição poderia ser explorada em uma eventual continuação da tese.

## 4.7 IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO MISTO

Apresentamos até o momento as deduções que nos levaram ao novo método de controle misto, agora muito mais versátil do ponto de vista numérico para problemas multiníveis e multipotenciais. Visando estruturar como tal protocolo pode ser aplicado na prática para resolver um problema de controle, apresentamos a seguir os passos fundamentais para a implementação do controle misto para um sistema genérico:

(a) Primeiramente, selecionamos o sistema quântico que pretendemos controlar (átomo, molécula, ponto quântico, etc) e identificamos as suas principais propriedades,

como os autovalores de energia  $\varepsilon_n$ , número total de níveis  $N$ , período de controle<sup>5</sup>  $t_{max}$ , enfim, um estudo de caso geral para identificar os observáveis relevantes.

(b) Determinamos os respectivos autovalores  $\rho_n$  e autovetores  $|\rho_n\rangle$  do observável a ser controlado. Depois, escolhemos uma função apropriada  $S(t)$  para descrever o comportamento dinâmico do valor esperado  $\langle \mathcal{O} \rangle(t)$  desse observável, pois iremos discretizar tal trajetória em intervalos temporais de largura  $\delta t = \tau$ .

(c) Seleccionamos o melhor conjunto  $\{\rho_n\}$ , ou somente  $\{\rho\}$ , que coincida com  $\tilde{S} = \langle \mathcal{O} \rangle(\tilde{t})$ . Esse procedimento pode ser completamente automatizado numericamente ou analisando o espaço de soluções ajustando os valores das probabilidades  $\{\rho_n\}$ .

(d) Com os valores de  $\{\rho_n\}$  conhecidos, escrevemos o estado final  $|\psi(t_j)\rangle = |\psi_f\rangle$  da janela. Assim, conseguimos definir o coeficiente  $C = \langle \psi_i | \psi_f \rangle = \langle \psi_i(t_{j-1}) | \psi_f(t_j) \rangle$ . Isso significa que em cada janela de controle teremos sempre um novo valor para  $C$  até atingir o tempo total de evolução. Conhecendo  $C$ , dado que na forma polar extraímos  $c$  e  $\varphi$ , podemos determinar os parâmetros  $(u, \phi, \lambda_1, \lambda_2)$  do problema de dois níveis (após escolher  $\gamma, n, m$ ). Calculando tais parâmetros, construímos a matriz  $H^{(e)}$  para ser usada na diagonalização inversa, nos procedimentos finais.

(e) Nesse momento já podemos realizar o procedimento de ortonormalização de Gram-Schmidt, gerando todas as bases  $\{|e_n\rangle\}$  para escrevermos a matriz unitária  $\Gamma$ , responsável pela mudança de representação dos espaços de Hilbert  $2-D$  e  $N-D$ .

(f) Conhecendo a matriz  $\Gamma$  e seu conjugado transposto  $\Gamma^\dagger$  realizamos o procedimento de diagonalização inversa  $(H^{(e)})_{nm} = (\Gamma H_0^{(\varepsilon)} \Gamma^\dagger) + (\Gamma V^{(\varepsilon)} \Gamma^\dagger)_{nm}$ . Resolvemos o sistema de equações via mínimos quadrados especificando determinados valores iniciais para a busca de soluções. Feito isso, obtemos os parâmetros de controle  $\{v_{nm}, \phi_{nm}\}$ , sendo a amplitude e fase do sistema original que controlam a trajetória alvo no instante  $t = \tilde{t}$ .

(g) Pegamos a solução obtida e verificamos se ela satisfaz a trajetória alvo nessa janela. Se isso não ocorrer, alteramos o range de busca para ampliar o espaço de soluções e repetimos o procedimento do item (f).

(h) Atualizamos o estado inicial da próxima janela de controle para ser o estado final do passo anterior, isto é,  $|\psi_j(t_j)\rangle = |\psi_f(t_{j+1})\rangle$ . Isso garante que o sistema evoluirá passo a passo, ou seja, sempre de um estado inicial  $|\psi_i\rangle$  para o estado final  $|\psi_f\rangle$ . Por exemplo, se o sistema propaga de  $t_0 \rightarrow t_1$  então o estado evoluirá de  $|\psi(t_0)\rangle \rightarrow |\psi(t_1)\rangle$ .

(i) Repetimos essa sequência de operações iterativamente até alcançar o período de evolução temporal completo do valor esperado de interesse.

<sup>5</sup> Adotamos em nossas simulações que a largura do passo temporal  $\tau$  deve ser menor do que o maior tempo de transição dos estados do sistema, tal que  $\tau < 2\pi/\omega_{nm}$  [2].

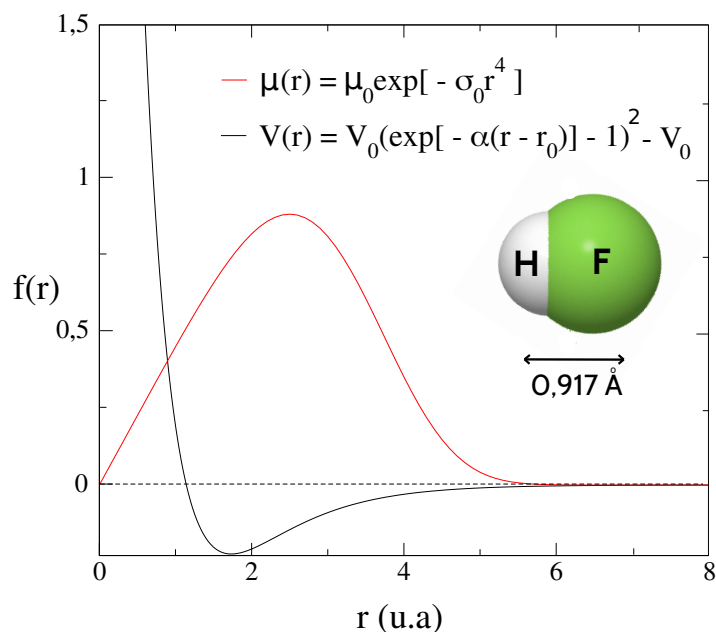


Figura 34 – Curvas de momento dipolo elétrico e de energia potencial da molécula de HF, cujos parâmetros estão descritos na Tab. 3. O momento dipolo é mais proeminente na região da distância de equilíbrio. A expressão de  $\mu(r)$  foi definida no estudo [164].

#### 4.8 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Moléculas diatômicas são as estruturas moleculares mais simples quimicamente, onde os dois átomos constituintes podem ser idênticos (homonucleares) ou distintos (heteronucleares). É um sistema quântico que vem sendo empregado com frequência na prova de conceitos e modelos teóricos [158], em controle quântico rovibracional [159] e no estudo das suas propriedades físico-químicas [160]. No presente capítulo selecionamos a molécula de HF (ácido fluorídrico) como objeto de investigação e controle. Tal estrutura é conhecida por sua elevada afinidade eletrônica e também toxicidade, além da formação de intensas pontes de hidrogênio na fase líquida [161]. Uma aplicação moderna envolve a emissão de luz laser na faixa do infravermelho (comprimento de onda 2,7 – 2,9  $\mu\text{m}$ ), processo inicialmente desenvolvido por George C. Pimentel na Universidade da Califórnia, Berkeley, em 1967 [161, 162]. Naturalmente, tal molécula também já foi explorada na literatura de controle coerente, como por exemplo, em problemas recentes envolvendo o controle de reações fotoquímicas em baixas temperaturas [5, 163].

Ilustramos as curvas de energia potencial e momento de dipolo elétrico da molécula HF na Fig. 34. O momento de dipolo elétrico ( $\mu(r)$ ) corresponde ao cálculo da polaridade líquida molecular, sendo representado pelo produto entre a carga do sistema e a distância entre as cargas [165]. Moléculas homonucleares não exibem momento de dipolo permanente, ao contrário das moléculas heteronucleares. Isso está associado diretamente com a distribuição não homogênea de cargas devido a diferença de eletronegatividade entre os

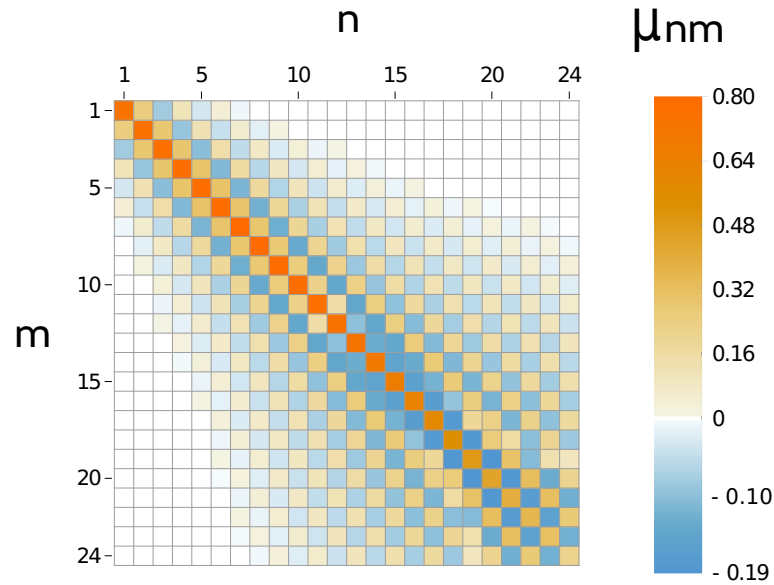


Figura 35 – Elementos de matriz do operador momento de dipolo elétrico  $\langle m|\mu(r)|n\rangle$  para a molécula de HF. Na barra lateral, o padrão de cores indica a intensidade de tais elementos de matriz, no qual eliminamos todos os dados menores do que  $10^{-6}$ .

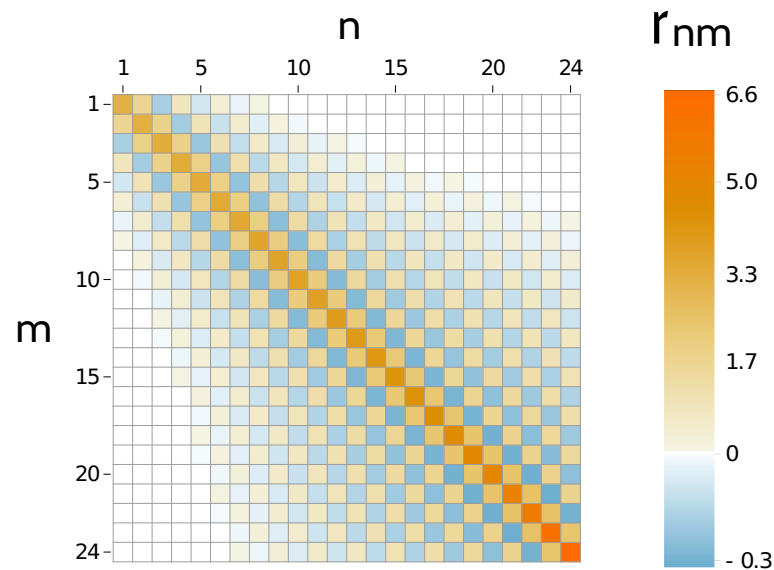


Figura 36 – Elementos de matriz do operador posição  $\langle m|r|n\rangle$  para a molécula de HF. Na barra lateral, o padrão de cores indica a intensidade de tais elementos de matriz, no qual eliminamos todos os dados menores do que  $10^{-6}$ .

átomos constituintes, simetria e também com a paridade das funções de onda do sistema. Tal quantidade é importante no controle coerente pelo fato dela intermediar a interação do campo eletromagnético externo com o sistema.

Para controlar os níveis vibracionais precisamos conhecer os valores numéricos das autoenergias  $\{\varepsilon_n\}$  do sistema, bem como os valores do momento de dipolo elétrico de transição, a fim de acoplar o campo eletromagnético externo com a molécula. Os dados de energia estão dispostos na Tab. 4, cujos elementos de matriz foram determinamos

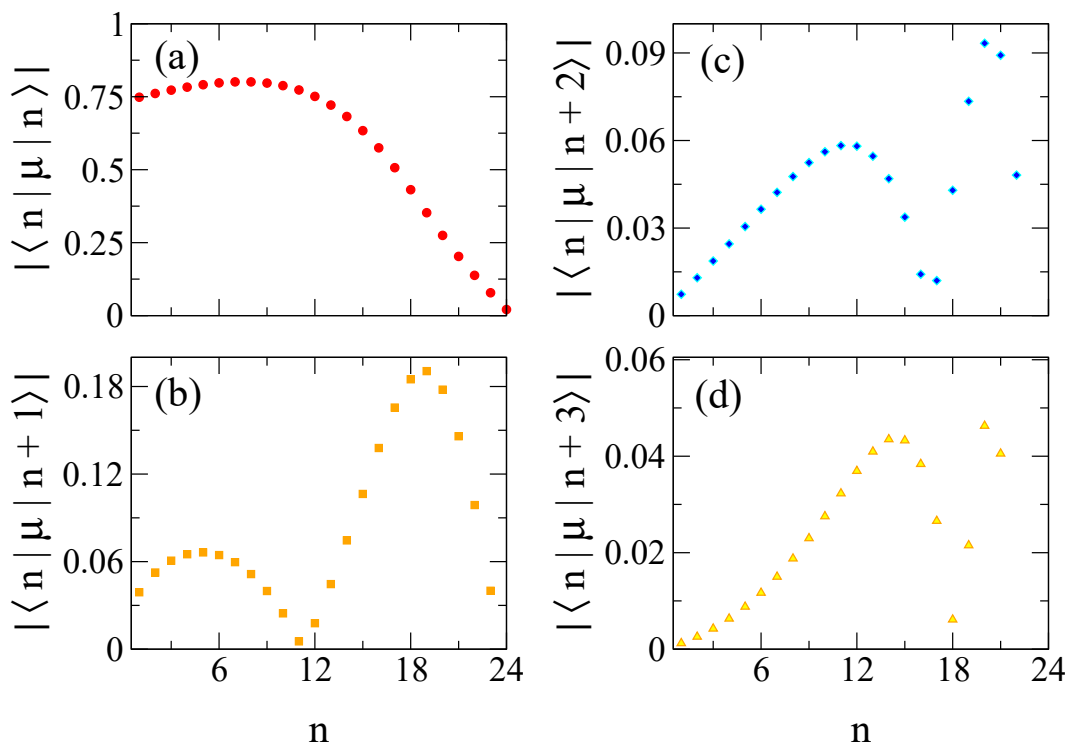


Figura 37 – Valores absolutos dos elementos de matriz do operador momento de dipolo em função dos níveis vibracionais do ácido HF. No painel (a) estão os termos diagonais, em (b) todos os valores de transições permitidas quando  $\mu_{n,n+1}$ , na parte (c) as transições quando  $\mu_{n,n+2}$ , e por fim, em (d) os elementos correspondentes a  $\mu_{n,n+3}$  em função de cada nível vibracional.

via integração na base de posição da função exposta na Fig. 34, conforme o Apêndice B. Optamos por expôr os elementos do momento de dipolo como uma matriz de cores, conforme a Fig. 35, onde é possível identificar o padrão gerado principalmente em torno da diagonal iniciando em  $n, m = (1, 1)$ , formado pelos termos  $\mu_{n,n+1}, \mu_{n,n+2} \dots$ . Esses termos representam a amplitude de probabilidade da transição entre os níveis  $n$  e  $n + 1, n + 2$ , e assim sucessivamente.

Devido a anarmonicidade intrínseca do potencial Morse, a tendência é que existam transições permitidas entre mais de um nível consecutivo, o que não ocorre para o potencial oscilador harmônico, por exemplo. Dependendo da situação de controle, é apreciável que níveis mais energéticos estejam conectados com níveis menos energéticos, pois isso facilita no controle seletivo de população, onde desejamos ocupar rapidamente os estados excitados próximos da energia de dissociação [166]. Contudo, apesar desses termos serem não negligenciáveis, seus valores absolutos são consideravelmente pequenos.

Na Fig. 37 expomos os valores dos elementos de matriz da molécula de HF em função de cada nível vibracional do sistema. No painel (a) estão os termos diagonais do momento de dipolo. Esse resultado corresponde a intensidade do dipolo permanente à medida que a distância média do átomo de Hidrogênio aumenta em relação ao Flúor para cada nível vibracional. Nos painéis restantes (b), (c) e (d) estão todos os valores das



Tabela 3 – Parâmetros do Potencial Morse para a molécula de HF [164].

Fonte [164]	HF	u. a.
Constante Mecânica	$\alpha_0$	1,1740
Posição de Equilíbrio	$r_0$	1,7329
Energia de Dissociação	$V_0$	0,2250
Massa Reduzida	$m_\mu$	1744,63
Amplitude do dipolo	$\mu_0$	0,4535
Alcance do dipolo ( $\sigma_0^{-1/4}$ )	$r^*$	3,5355

transições permitidas quando  $\mu_{n,n+1}$ ,  $\mu_{n,n+2}$  e  $\mu_{n,n+3}$ , respectivamente. Observe como os termos cuja transição é consecutiva tem um pouco mais do que o dobro da intensidade dos termos adjacentes. Portanto, na prática é necessário fornecer proporcionalmente mais energia através do campo externo para ser possível induzir transições para níveis superiores.

Em controle de trajetória existem diferentes rotas para se atingir o estado alvo de controle, como por exemplo, no controle do valor esperado da posição. Suponha que em um dado instante  $t'$  a posição de uma partícula qualquer seja  $\langle \psi(t') | r | \psi(t') \rangle = r_0$ . Logo, existem inúmeras combinações lineares dos autoestados de posição expandidos em  $|\psi(t')\rangle$  que resultam em  $r_0$ . Isso vai de encontro a capacidade de determinadas técnicas de controle para vasculhar uma gama de soluções possíveis que acabam por satisfazer o mesmo objetivo, que é justamente o caso do controle paramétrico por partes exposto nesta tese. Desse modo, não precisamos nos preocupar com a intensidade do acoplamento entre os níveis – embora relevantes em outras aplicações – mas sim em encontrar as soluções cujo campo elétrico conduza a dinâmica do sistema como planejado.

Na Tab. 3, agrupamos os parâmetros moleculares do HF [164], cujo Hamiltoniano está descrito em detalhes no Apêndice B. Na Tab. 4 expomos os valores numéricos dos autovalores de energia do HF e na Fig. 38 combinamos tal resultado com a curva de energia potencial.

Tabela 4 – Autovalores de todos os níveis vibracionais. Expomos tais valores juntamente a curva de potencial na Fig. 38.

Energia u. a.			
$\varepsilon_1 = 0,0093286$	$\varepsilon_7 = 0,1058670$	$\varepsilon_{13} = 0,173966$	$\varepsilon_{19} = 0,213624$
$\varepsilon_2 = 0,0273935$	$\varepsilon_8 = 0,1191920$	$\varepsilon_{14} = 0,182551$	$\varepsilon_{20} = 0,217468$
$\varepsilon_3 = 0,0446683$	$\varepsilon_9 = 0,1317270$	$\varepsilon_{15} = 0,190345$	$\varepsilon_{21} = 0,220523$
$\varepsilon_4 = 0,0611531$	$\varepsilon_{10} = 0,143472$	$\varepsilon_{16} = 0,197350$	$\varepsilon_{22} = 0,222788$
$\varepsilon_5 = 0,0768479$	$\varepsilon_{11} = 0,154426$	$\varepsilon_{17} = 0,203565$	$\varepsilon_{23} = 0,224262$
$\varepsilon_6 = 0,0917527$	$\varepsilon_{12} = 0,164591$	$\varepsilon_{18} = 0,208989$	$\varepsilon_{24} = 0,224947$

Vamos considerar o Hamiltoniano  $H_0^{(\varepsilon)}$  constituído por uma base completa de vinte e quatro estados para descrever o sistema proposto, sendo escrito em termos do conjunto

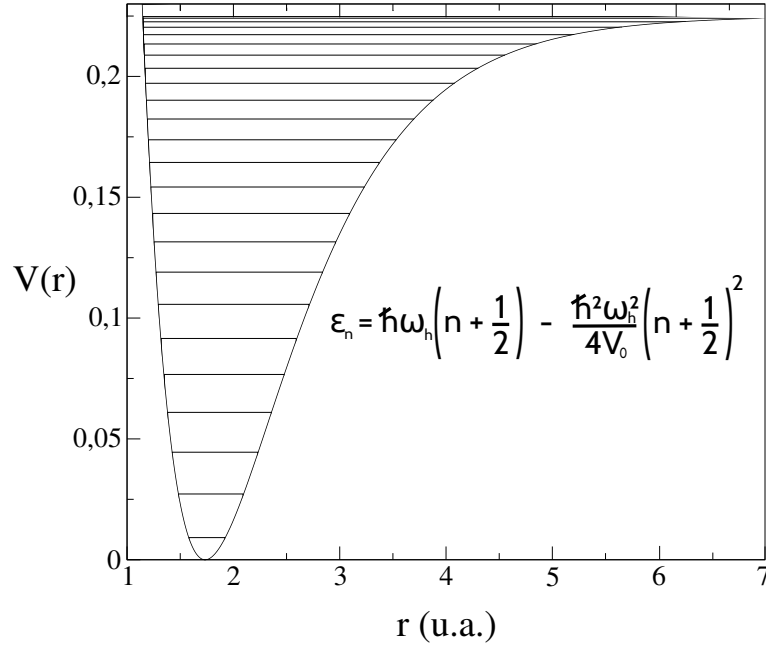


Figura 38 – Curva de energia potencial da molécula de HF juntamente seus 24 autovalores vibracionais (o eixo positivo foi obtido fazendo  $V(r) + V_0 = V_0(1 - \exp[-\alpha_0(r - r_0)])^2$ ). Os valores numéricos estão indicados na Tab. 4. Na equação,  $\varepsilon_n$  corresponde a equação de autovalor em função de  $n$ ,  $\omega_h$  é a frequência do oscilador de Morse,  $V_0$  é a energia de ligação da molécula, e por fim,  $\hbar$  a constante de Planck.

$\{|\varepsilon_1\rangle, |\varepsilon_2\rangle, \dots, |\varepsilon_{24}\rangle\}$ , tais que

$$|\varepsilon_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varepsilon_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varepsilon_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad |\varepsilon_{24}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.77)$$

Assumindo que um potencial externo  $V^{(\varepsilon)}$  atua sobre a molécula de HF inicialmente não perturbado, definimos o Hamiltoniano total  $H^{(\varepsilon)} = H_0^{(\varepsilon)} + V^{(\varepsilon)}$ , tal que

$$H^{(\varepsilon)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 - v_{1,1} & v_{1,2} e^{-i\phi_{1,2}} & \dots & v_{1,24} e^{-i\phi_{1,24}} \\ v_{1,2} e^{i\phi_{1,2}} & \varepsilon_2 - v_{2,2} & \dots & v_{2,24} e^{-i\phi_{2,24}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{1,24} e^{i\phi_{1,24}} & v_{2,24} e^{i\phi_{2,24}} & \dots & \varepsilon_{24} - v_{24,24} \end{pmatrix}, \quad (4.78)$$

onde  $v_{nm}$  acomodam o campo externo multiplicado pelo momento de dipolo de transição  $v_{nm} = -\mu_{nm}\mathcal{E}(t)$  e os termos diagonais  $v_{nn}$  estão associados o momento de dipolo permanente da molécula. Para manipular o comportamento dinâmico da distância internuclear precisamos dos elementos de matriz do operador posição  $r_{nm}$ . Calculamos numericamente tais valores e os apresentamos na Fig. 36. Informações a respeito do procedimento para determinação da forma matricial desse operador estão apresentadas no Apêndice B.

Apresentaremos nas próximas seções os resultados obtidos para o controle de um sistema com 24 níveis vibracionais do ácido HF. Primeiramente observaremos as oscilações moleculares livres, isto é, sem atuação de um campo externo. Em seguida, exibiremos o valor esperado controlado da distância internuclear  $S(t) = \langle r \rangle (t)$  em termos da dinâmica de um pacote de ondas construído a partir dos estados vibracionais controlados, ou seja, observando a atuação do potencial externo sobre a molécula.

#### 4.9 OSCILAÇÕES MOLECULARES LIVRES

Antes de implementarmos o controle da dinâmica molecular do HF, investigamos o comportamento do sistema quando nenhum campo externo é aplicado. Utilizando os elementos de matriz do operador posição (exposto na Fig. 36) e o estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \sqrt{0,3}|\varepsilon_1\rangle + \sqrt{0,25}|\varepsilon_2\rangle + \sqrt{0,2}|\varepsilon_3\rangle + \sqrt{0,15}|\varepsilon_4\rangle + \sqrt{0,1}|\varepsilon_5\rangle$  (base de  $H_0 \{|\varepsilon_n\rangle\}$ ), podemos escrever o valor esperado da posição no tempo como

$$\begin{aligned} \langle r \rangle (t) &= \langle \psi(t) | r | \psi(t) \rangle \\ &= \sum_n^N \sum_m^N c_n^* c_m r_{nm} e^{-i(\varepsilon_m - \varepsilon_n)t} \quad , \end{aligned} \quad (4.79)$$

onde os  $c_n$ 's são os coeficientes de expansão do estado  $|\psi(0)\rangle$  para  $N = 5$ . A dependência em  $t$  origina-se da atuação do operador de evolução temporal  $|\psi(t)\rangle = \exp[-iH_0^{(\varepsilon)}t/\hbar] |\psi(0)\rangle$  e, em seguida, calculando  $\langle \psi(t) | r | \psi(t) \rangle$ . A conexão matemática com o método misto nos faz considerar a igualdade  $|\psi(t)\rangle = |\psi_f\rangle$  sempre válida. A escolha para esse estado inicial vem da suposição de que a molécula livre esteja arbitrariamente em um estado de superposição dos cinco primeiros níveis vibracionais antes da implementação do controle.

Na Fig. 39 expomos o valor esperado da distância internuclear do HF livre, sem campo externo. Note que o sistema oscila continuamente, juntamente a formação de um padrão de batimentos. O formato do batimento depende do tipo de superposição que esteja sendo gerado entre os autoestados do sistema, como por exemplo, do estado  $|\psi(0)\rangle$ .

Desenhamos uma linha tracejada para indicar a região de equilíbrio da estrutura, com  $r_0 = 1,7329$  u.a.. Observe como as oscilações tendem a permanecer acima desse limiar, embora o cruze para intervalos menores do que  $\omega_0 t < 430$  e repetindo no intervalo  $1400 \leq \omega_0 t \leq 1940$ . Outro ponto são valores máximos e mínimos atingidos, sendo  $r_{min} \approx 1,53$  u.a. e  $r_{max} \approx 2,1$  u.a., respectivamente. A princípio poderíamos dizer que se trata da janela de controlabilidade da molécula, contudo, tais valores só foram atingidos devido a escolha do estado inicial. A verdadeira janela de controlabilidade vem dos autovalores do operador posição, onde o menor valor é  $r^{(1)} = 1,2905$  u.a. e o maior  $r^{(24)} = 7,1186$  u.a.. Na prática isso significa que podemos controlar a posição dentro do range  $r^{(1)} \leq \langle r \rangle (t) \leq r^{(24)}$ , conforme será apresentado nas próximas seções.

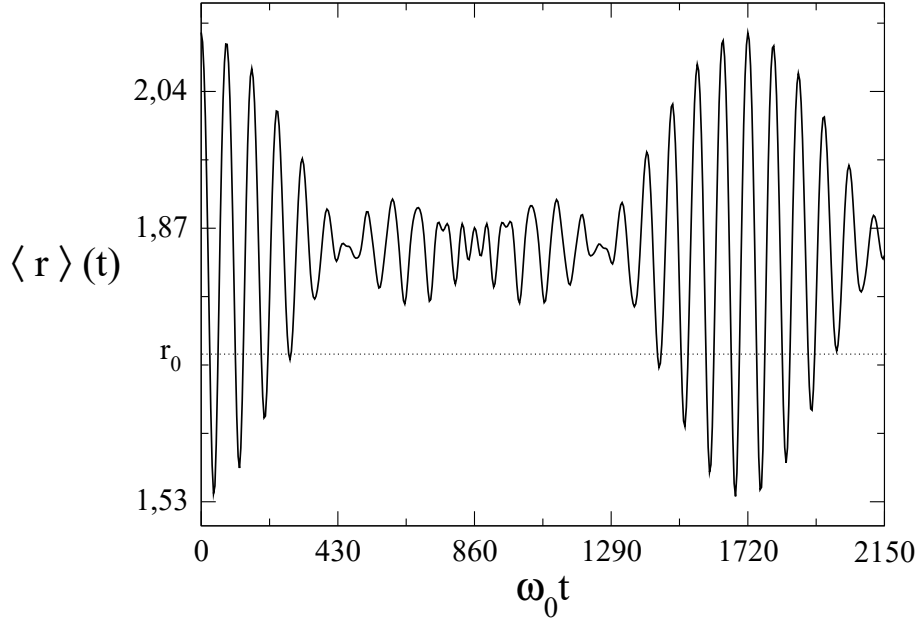


Figura 39 – Valor esperado da distância internuclear  $\langle r \rangle(t)$  associado à distância internuclear da molécula de HF. O padrão de batimentos formado na figura foi gerado pelo estado de superposição do inicial  $|\psi(0)\rangle = \sqrt{0,3}|\varepsilon_1\rangle + \sqrt{0,25}|\varepsilon_2\rangle + \sqrt{0,2}|\varepsilon_3\rangle + \sqrt{0,15}|\varepsilon_4\rangle + \sqrt{0,1}|\varepsilon_5\rangle$ . Na linha tracejada está indicada a posição de equilíbrio  $r_0 = 1,7329$  u.a. da molécula. Definimos como fator de escala  $\omega_0 = \Delta E = 0,21562$ .

#### 4.10 CONTROLE DE OSCILAÇÕES MOLECULARES

Conforme mencionado nas seções anteriores, finalmente apresentaremos os resultados da posição controlada da molécula de HF. Ao longo do capítulo expomos como construímos teoricamente o método misto. Para um melhor entendimento a respeito das etapas executadas para a obtenção das soluções de controle, recomendamos novamente a leitura dos passos descritos na Sec. 4.7.

Primeiramente, apontaremos os principais parâmetros iniciais do procedimento. O sistema foi controlado usando  $t_{max} = 2150$ , ou seja, o mesmo período em que a molécula oscila livremente (ver Fig. 39). Definimos que cada janela de controle deve ter a largura  $\omega_0\tau \approx 3,2$ , cuja escolha vem da condição  $\tau < 2\pi/(\varepsilon_{24} - \varepsilon_1)$ . Além disso, também usamos tal constante como fator de escala para a evolução temporal do sistema  $\omega_0 = \varepsilon_{24} - \varepsilon_1 = 0,21562$ . Também determinamos um parâmetro que depende do momento de dipolo do sistema a partir da relação  $|\tilde{\mu}| = \sum_{n,m=1}^{N_{max}} |\mu_{nm}|/N_{max} = 0,04416$  u.a., onde  $N_{max}$  corresponde ao número total de elementos de matriz desse operador. Além disso, eliminamos todos os termos  $\mu_{nm}$  menores do que  $10^{-8}$ . Logo, o campo externo pode ser escrito em termos dessas quantidades, como  $V = -|\tilde{\mu}|\mathcal{E}$  para determinarmos os valores máximos dos parâmetros do campo elétrico apropriado ( $\tilde{\mathcal{E}} = |\tilde{\mu}|\mathcal{E}_{max}/\Delta\varepsilon$ ), assim levamos em conta as variações de intensidade do momento de dipolo elétrico. Para explorar o espaço de soluções disponíveis através do método misto, não definimos um valor máximo  $\mathcal{E}_{max}$  para todas as janelas, mas

atribuimos um valor inicial e aumentamos quando necessário para determinar uma solução – via mínimos quadrados – que satisfaça a trajetória  $S(t)$ . Definimos a trajetória alvo de acordo com a expressão

$$S(t) = r_0 + 5,0 \sin(5,0 \times 10^{-4} \pi t)^2 \exp(-1,0 \times 10^{-4} t), \quad (4.80)$$

onde  $r_0 = 1,7329$  é a distância internuclear de equilíbrio.

Agora falaremos de algumas quantidades que foram discutidas na construção da técnica de controle. A primeira delas envolve o coeficiente  $C = \langle \psi(t_j) | \psi(t_{j+1}) \rangle$ , que associa os estados inicial e final de cada janela de controle. Esboçamos na Fig. 40 a parte real desse coeficiente em (a), e os elementos de amplitude  $u$  e fase  $\phi$  presentes na matriz do bloco  $2 \times 2$  (veja a Eq. (4.35)) estão nos painéis (b) e (c), respectivamente. Não expomos os termos  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  por não contribuir para a discussão nesse momento.

O aspecto oscilatório de  $Re[C]$  tem uma conexão direta com a taxa de transição da trajetória alvo, e também indiretamente com a largura da janela temporal. Essa dependência com a janela temporal justifica-se pela questão da taxa de transição apresentar oscilações mais abruptas para intervalos temporais maiores, afinal, nesse tipo de situação é demandado variações significativas do potencial externo para satisfazer a trajetória alvo. Contudo, no método misto não podemos impôr uma janela temporal demasiadamente pequena, pois o conjunto de equações intermediárias são inversamente proporcionais a  $\tau$  (visite as Eqs. (4.71) e (4.74)), o que implica em amplitudes de alta intensidade nas soluções do campo de controle.

Conhecendo o comportamento dos parâmetros apresentados nas Figs. 40 (b) e (c), conseguimos implementar uma transformação inversa descrita no item (f) da Seção 4.7 a fim de obter os parâmetros do potencial de controle real. Expomos tais parâmetros na Fig. 41, ou seja, o perfil de intensidade do campo elétrico em (a) e da fase em (b). Embora o método misto seja capaz de lidar com múltiplos campos de controle simultâneos aplicados ao sistema e fornecendo soluções de todos os parâmetros inversamente sem grandes complicações, vimos que para a trajetória alvo escolhida somente um termo do potencial externo foi suficiente para manipular a molécula de HF e produzir o comportamento almejado. Outro ponto envolve o conjunto de superfícies de soluções dos parâmetros  $u$ ,  $\phi$ ,  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  (ver a Fig.33). Quando vasculhamos as soluções de campo, não vimos melhora significativa em alterar  $n$ ,  $m$  ou  $\gamma$ . Isso é positivo, pois agiliza o protocolo de controle e é algo que não era possível analisar no método antigo. Retomando a discussão sobre a amplitude do campo, o valor máximo atingido foi  $\tilde{\mathcal{E}} 0,36$ , ou seja, utilizamos aproximadamente 36% da diferença total de energia do sistema para controlar o observável de interesse. Além disso, repare como as variações de intensidade, tanto do campo quanto da fase, são mais proeminentes até  $\omega_0 t \approx 860$  quando atingimos a maior distância da posição de equilíbrio do potencial Morse. Apesar de existirem outros picos de  $\tilde{\mathcal{E}}$  espalhados ao longo de  $\omega_0 t$ , a solução é aceitável dada as grandes variações espaciais da trajetória  $S(t)$ .

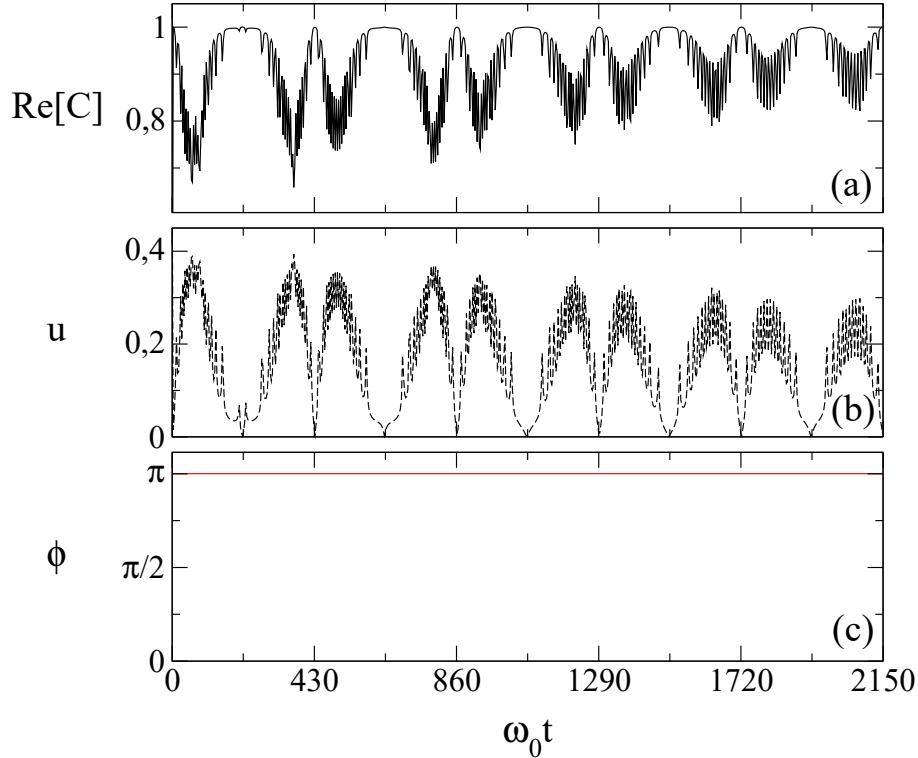


Figura 40 – No painel (a) apresentamos a parte real do coeficiente  $C = \langle \psi(t_j) | \psi(t_{j+1}) \rangle$ , os elementos de amplitude  $u$  e fase  $\phi$  que constituem a matriz do bloco  $2 \times 2$  (veja a Eq. (4.35)) estão nos painéis (b) e (c), respectivamente.

Na curva proposta para a posição do Hidrogênio visamos forçar o afastamento desse átomo em relação ao Flúor, mas induzindo o Hidrogênio a executar oscilações harmonicamente tendendo para a posição de equilíbrio ao longo do tempo, conforme a Fig. 42. Nessa figura estão as curvas alvo e controlada sobrepostas a fim de demonstrar a qualidade do controle. Também destacamos duas linhas tracejadas indicando a região associada ao menor e maior autovalor do operador posição, sendo  $r^{(1)} = 1,2905$  u.a. e  $r^{(1)} = 7,1186$  u.a., respectivamente, e também observe que as oscilações sempre ficam restritas entre  $\Delta r^{(n)} = 5,828$  u.a.. Na prática, estamos tirando o sistema do estado de superposição inicialmente estacionário – dado o padrão de batimentos – para oscilar em uma frequência totalmente diferente e acessando regiões espaciais mais próximas da dissociação molecular (principalmente nos primeiros instantes).

#### 4.11 DINÂMICA DE UM PACOTE DE ONDAS

Nas seções anteriores vimos a descrição do sistema, a preparação do campo externo e os resultados obtidos para o controle da posição do HF. Aqui veremos um passo extra, ou melhor, uma extensão da dinâmica do sistema em termos de um pacote de ondas vibracional que viaja ao longo do potencial Morse. Note que não exibimos o vetor de estado quando  $t = 0$ , e isso se deve ao fato de termos escolhido intencionalmente um estado inicial

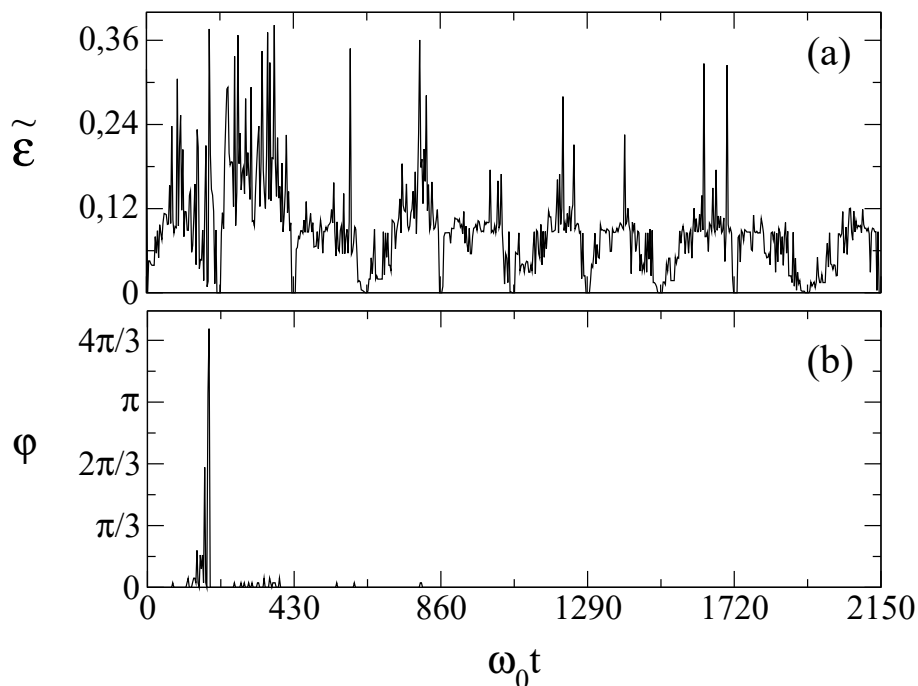


Figura 41 – Solução dos parâmetros de amplitude e fase do campo externo ‘real’ que controle distância internuclear da molécula de HF. O termo real se refere a transformação dos parâmetros do subespaço bidimensional efetivo para o potencial do laser propriamente dito  $\{u, \phi\} \rightarrow \{\mathcal{E}, \varphi\}$ . Vale mencionar que o

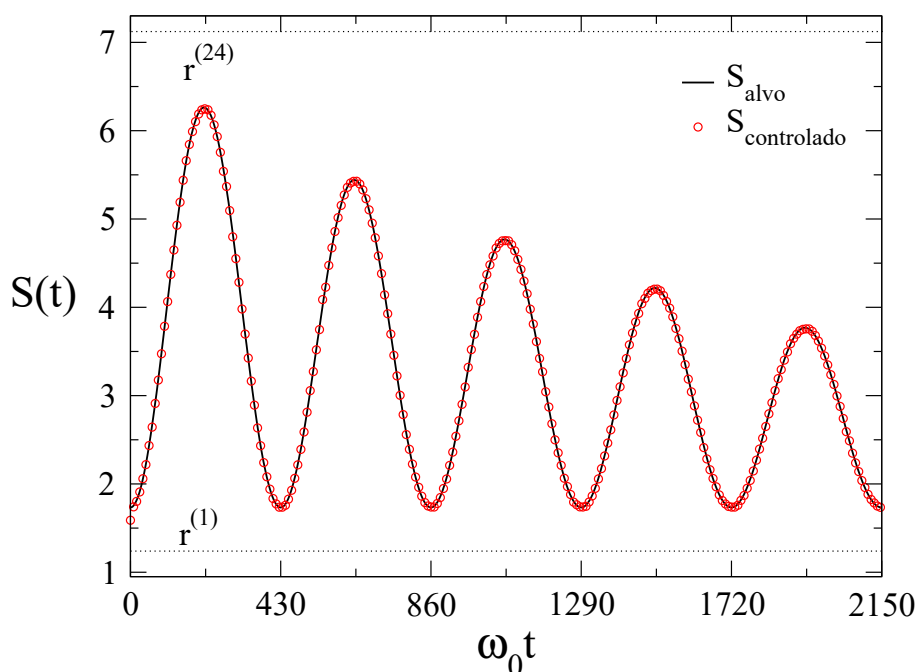


Figura 42 – Trajetória alvo ( $S_{alvo}$ ) e controlada ( $S_{controlado}$ ) do valor esperado da distância internuclear do ácido HF. As linhas tracejadas indicam a região correspondente ao menor  $r^{(1)} = 1,2905$  u.a. e maior autovalor  $r^{(24)} = 7,1186$  u.a. do operador posição.

referente a um pacote gaussiano.

Antes de apresentar a dinâmica do pacote de ondas vamos descrever os passos intermediários para a construção de tal objeto. Primeiramente devemos calcular os coeficientes de expansão<sup>6</sup> desse pacote. Isso é feito através da seguinte expressão

$$c_m = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(r) \Psi(r, 0) dr . \quad (4.81)$$

com a autofunção  $\psi_m(r)$  vibracional (definida no Apêndice B) e a função  $\Psi(r, 0)$  que representa o envelope gaussiano no instante  $t = 0$ . Esse envelope é expresso como

$$\Psi(r, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-(r-x_0)^2/4\sigma^2} e^{ik_0(r-x_0)} . \quad (4.82)$$

onde  $\sigma = 0, 1$  é a largura à meia altura e  $x_0 = r_0 + \delta r$  o centro do pacote. Não consideramos a dependência com o número de onda, portanto  $k_0 = 0$ . Isso significa que inicialmente o pacote de ondas não está em movimento (momento  $p = \hbar k = 0$ ), o que simplifica a discussão a respeito da evolução do pacote de ondas ao longo da seção.

O procedimento de construção e evolução do pacote de ondas consistiu em duas etapas. A fim de determinar os coeficientes de expansão  $\{c_n\}$ , primeiramente atribuímos um certo valor para  $\delta r$  e mantendo  $\sigma = 0, 1$  sempre fixo. Em seguida, calculamos os  $\{c_n\}$  e verificamos se a soma das probabilidades resulta em  $\sum_{n=1}^{N=24} |c_n|^2 = 1$ , onde obtemos  $\delta r = 0, 5$ . Sendo assim, os coeficientes para todos os  $N = 24$  estados vibracionais obtidos através desse processo estão expostos na Tab. 5. Utilizamos os mesmos coeficientes na expansão do estado inicial de controle da posição da molécula de HF  $|\psi(0)\rangle = \sum_{n=1}^{N=24} c_n |\varepsilon_n\rangle$ .

Tabela 5 – Coeficientes de expansão do estado inicial para o pacote de ondas.

Coeficientes			
$c_1 = 0,126993$	$c_2 = 0,366245$	$c_3 = 0,608028$	$c_4 = 0,611788$
$c_5 = 0,306037$	$c_6 = -0,030467$	$c_7 = -0,098642$	$c_8 = 0,008680$
$c_9 = 0,032051$	$c_{10} = -0,013878$	$c_{11} = -0,005419$	$c_{12} = 0,008905$
$c_{13} = -0,004401$	$c_{14} = -0,000084$	$c_{14} = 0,002089$	$c_{15} = -0,002196$
$c_{17} = 0,001521$	$c_{18} = -0,000776$	$c_{18} = 0,000230$	$c_{19} = 0,000086$
$c_{21} = -0,000229$	$c_{22} = 0,000260$	$c_{23} = -0,000224$	$c_{24} = 0,000120$

Em geral, expandimos um pacote de ondas a partir do estado de superposição

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{N=24} c_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |\varepsilon_n\rangle , \quad (4.83)$$

<sup>6</sup> Obter essa expressão é simples. Sabemos que um coeficiente de expansão qualquer pode ser escrito como  $c_m = \langle \varepsilon_m | \Psi(0) \rangle$ , onde  $|\Psi\rangle$  é o vetor de estado do sistema em  $t = 0$ . Se inserirmos a relação de completude em termos da base de posição  $I = \int |r'\rangle \langle r'| dr'$  nessa expressão, obtemos exatamente a Eq. (4.81), pois simplesmente tem-se  $\psi_k(r) = \langle r | \varepsilon_k \rangle$  e  $\Psi(r, 0) = \langle r | \Psi(0) \rangle$ .



e aplicando a relação de completeza no espaço de posição  $I = \int |r'\rangle\langle r'| dr'$ , onde obtemos

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{n=1}^N c_n \times I e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |\varepsilon_n\rangle, \text{ depois multiplicando por } \langle r''|, \\ \langle r''|\Psi(t)\rangle &= \sum_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} c_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \langle r''|r'\rangle \langle r'|\varepsilon_n\rangle dr', \text{ aplicando a definição } \delta(r' - r'') = \langle r''|r'\rangle, \\ \langle r''|\Psi(t)\rangle &= \sum_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \delta(r' - r'') dr' c_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \langle r'|\varepsilon_n\rangle, \text{ no qual } \int_{-\infty}^{\infty} \delta(r' - r'') dr' = 1, \end{aligned} \quad (4.84)$$

onde usamos  $\Psi(r', t) = \langle r'|\Psi(t)\rangle$  e a autofunção do potencial Morse  $\psi_n(r') = \langle r'|\varepsilon_n\rangle$  para chegar em

$$\Psi(r', t) = \sum_{n=1}^N c_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} \psi_n(r'), \quad (4.85)$$

por fim, o módulo quadrado da Eq. (4.85) é a densidade de probabilidade de encontrar o pacote de ondas em uma determinada posição  $r'$  e em um instante  $t$ , tal que

$$|\Psi(r, t)|^2 = \sum_{n,m=1}^N c_m^* c_n e^{i\omega_{nm}t} \psi_m^*(r) \psi_n(r), \quad (4.86)$$

com as frequências de transição  $\omega_{nm} = (\varepsilon_m - \varepsilon_n)/\hbar$  e a simples mudança de variáveis  $r' \rightarrow r$ .

Para relacionar com os resultados da seção anterior, consideramos todos os coeficientes do vetor de estado  $|\psi_f\rangle = \sum_{n=1}^N c_n^{(f)}(\tau) |\varepsilon_n\rangle$  de cada janela temporal ' $\tau$ ' e substituímos na Eq. (4.86) aplicando a transformação  $c_n e^{-i\varepsilon_n t} \rightarrow c_n^{(f)}(\tau)$ , tal que

$$|\Psi(r, \tau)|^2 = \sum_{n,m=1}^N c_m^{*(f)}(\tau) c_n^{(f)}(\tau) \psi_m^*(r) \psi_n(r), \quad (4.87)$$

Na Fig. 43 expomos a densidade de probabilidade do pacote de ondas quando  $\tau = 0$ . Conforme esperado, a curva é perfeitamente uma distribuição gaussiana. Observe que o máximo de amplitude atinge o valor 4, o que é normal devido a forma que construímos o pacote de ondas em geral [167, 168].

Agora, assumindo  $\omega_0\tau > 0$  a dinâmica temporal do pacote de ondas está exposta na Fig. 44. Observe como inicialmente o pacote sofre um espalhamento nas 'paredes' do potencial Morse nos primeiros 215 instantes de tempo. Em  $\omega_0\tau \approx 320$  é formada uma região em que a probabilidade é praticamente nula do pacote de ondas estar próximo da posição de equilíbrio da molécula de HF ( $r \approx 1,7329$  u.a.). Note que isso se repete a cada  $\omega_0\tau \approx 320$  instantes de tempo, com exceção da região  $1620 \leq \omega_0\tau \leq 2150$ . O padrão de cores indica que quanto mais amarelo claro, mais próximo está do pico da gaussiana com a densidade de probabilidade  $\approx 4$ . Isso significa que nessas regiões ocorrem dois fenômenos possíveis denominados *reconstrução parcial* e *reconstrução total* do pacote de ondas [168, 169, 170]. O termo reconstrução refere-se a capacidade do pacote de assumir

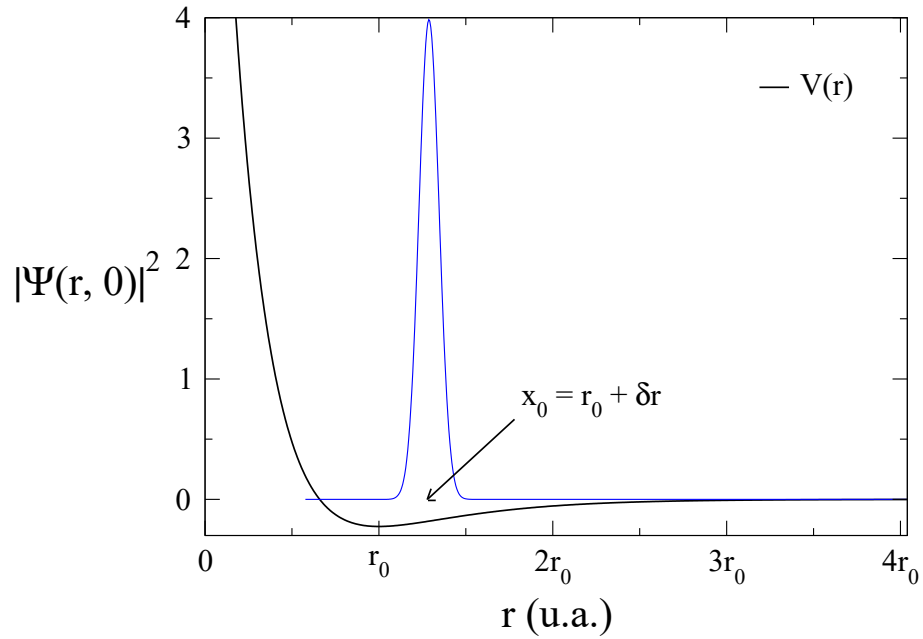


Figura 43 – Densidade de probabilidade do pacote de ondas no instante  $\tau = 0$ . Adicionamos também a curva do potencial Morse do ácido HF para melhor visualização da região em que o centro do pacote está localizado, conforme indicado por  $x_0 = r_0 + \delta r$ .

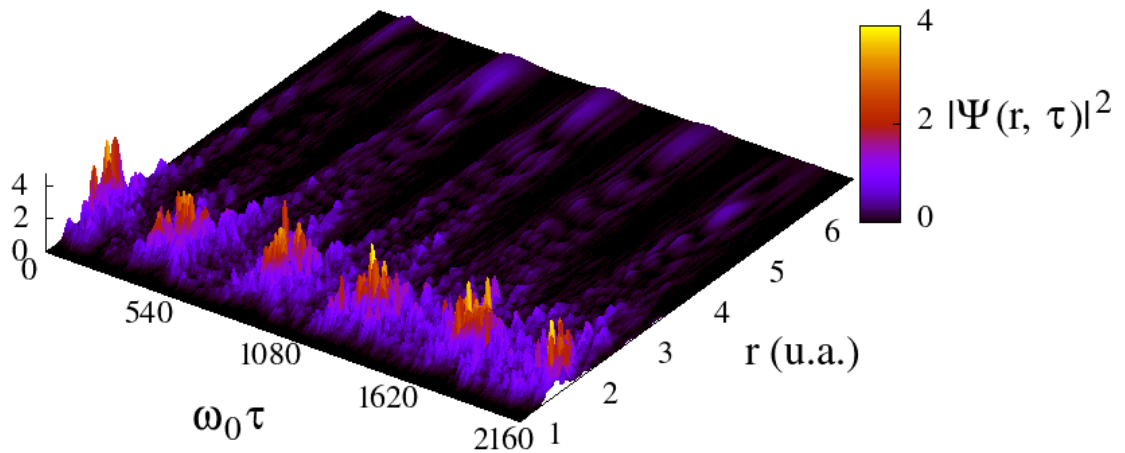


Figura 44 – Evolução temporal do pacote de ondas vibracional. Assumindo as autofunções vibracionais do potencial Morse, podemos afirmar que o padrão formado corresponde a densidade de probabilidade de determinar a posição do átomo de Hidrogênio oscilando no tempo em relação ao átomo de Flúor (na origem).

uma forma idêntica ou muito parecida com o envelope do instante inicial (basicamente a mesma distribuição gaussiana da Fig. 43).

Para uma melhor visualização do comportamento do sistema, fizemos uma nova

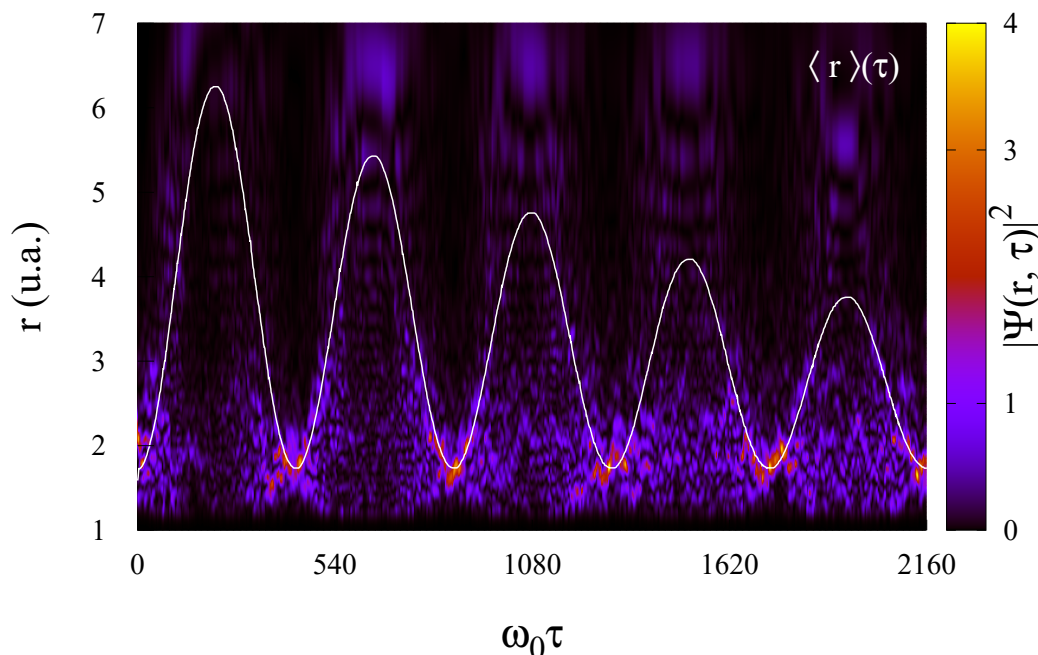


Figura 45 – Mapa da densidade de probabilidade do pacote de ondas juntamente a trajetória do valor esperado da posição controlado  $\langle r \rangle(\tau)$ .

figura comparando a trajetória da posição controlada juntamente com o mapa da densidade de probabilidade do pacote de ondas, conforme exposto na Fig. 45. Agora o comportamento do pacote fica evidente, pois basicamente as variações da distância internuclear estão diretamente associadas a evolução temporal do pacote de ondas. Repare que nas regiões mais distantes da posição de equilíbrio a probabilidade está distribuída ao longo da molécula. Ou seja, próximo da região de dissociação a função de onda vibracional é mais delocalizada, e conseqüentemente, o pacote de ondas alarga-se a ponto de considerarmos que o átomo de Hidrogênio pode estar em qualquer lugar da molécula!

E visando finalizar a discussão dessa seção, observe as regiões mais alaranjadas/amareladas da Fig. 45. Ao contrário do que apontamos no parágrafo anterior, à medida que o potencial aproxima-se da posição de equilíbrio a tendência é uma forte sobreposição das funções de onda, bem como um espalhamento considerável no potencial (como mencionado anteriormente). Além disso, o deslocamento do pacote de ondas pode resultar em variações do seu momento linear  $\langle p \rangle$  no tempo. Analogamente ao caso clássico, nos pontos de ‘retorno’ do oscilador (regiões de distância mínima ou máxima do potencial) a tendência é que o momento da partícula diminua – e também se inverta a direção do movimento. Por esse motivo observamos maiores valores de densidade de probabilidade para  $r \approx 2$  u.a., e justamente nessa distância a interferência das funções de onda pode ser construtiva a ponto de reconstituir o pacote de ondas na configuração inicial.

## 4.12 DISCUSSÕES DO CAPÍTULO

No presente capítulo apresentamos o Controle Paramétrico Misto, partindo dos seus aspectos teóricos mais fundamentais e passando pela sua sofisticada estrutura matemática. Em essência, conhecendo-se o valor esperado do observável alvo em uma dada janela temporal e as probabilidades que satisfazem tal quantidade, podemos mapear a evolução do sistema de  $N$ -níveis transformando-o em um simples problema bidimensional, e em função de somente quatro variáveis analiticamente determinadas, retornamos para o espaço  $N$ -dimensional de equações não-lineares vinculadas ao problema original. O resultado oriundo desse conjunto de equações contém múltiplas soluções de controle que são devidamente verificadas no fim do processo.

Demonstramos a viabilidade da técnica no controle do valor esperado da posição da molécula de HF. Em trabalhos anteriores [40], Delben e Luz analisavam os parâmetros do subespaço bidimensional de forma puramente numérica, e tal limitação dificultava parcialmente na seleção de melhores resultados. Contribuímos consideravelmente ao método misto ao obter expressões analíticas nessa etapa, conforme exposto na Fig. 33. Quando aplicarmos o método em problemas mais complexos, envolvendo a determinação de diferentes campos de controle, tal mapeamento do espaço de soluções facilitará na otimização dos parâmetros do(s) potencial(is) externo(s).

O controle dos  $N = 24$  estados quânticos associados a distância internuclear do ácido HF abriu a possibilidade de investigação da dinâmica de um pacote de ondas formado pela combinação linear das autofunções do potencial Morse juntamente aos coeficientes de expansão  $c_n^{(f)}(\tau)$  do estado final associado as janelas de controle. Analisamos diferentes regiões do potencial cuja densidade de probabilidade estava distribuída de modo localizado (próximo da distância de equilíbrio) ou delocalizada (regiões mais afastadas da distância de equilíbrio). Identificamos visualmente reconstruções parciais e totais do pacote à medida que o Hidrogênio se aproxima do Flúor.

## 5 CONCLUSÃO

---

A proposta essencial deste trabalho consistiu em aplicarmos o protocolo de controle por partes independente do tempo em duas classes distintas de problemas. Constatamos a versatilidade do conceito de discretização temporal do potencial externo e da trajetória alvo na manipulação de sistemas abertos e sistemas fechados. Com isso, ampliamos ainda mais as opções de aplicabilidade do método ao evidenciar o caráter promissor da técnica em problemas multiníveis ou na preservação de correlações quânticas.

Primeiramente, exploramos o controle de dois *qubits* em estado  $X$ , onde comparamos a atuação de diferentes fontes de ruídos e analisamos o efeito da aplicação do campo externo no sistema. Mostramos que através do controle paramétrico conseguimos manter os *qubits* emaranhados e também com bons níveis de coerência na maioria dos exemplos. Em praticamente todos os gráficos exibimos a dinâmica dos valores médios de energia a fim de comparar o estado do sistema com os valores obtidos. Em resumo, notamos que o controle é perdido quando o sistema tona-se um estado de mistura estatística, onde toda a informação foi perdida para o ambiente, e justamente nessa condição a energia média dos *qubits* é nula. Conhecendo tal característica, podemos realizar operações quânticas de interesse enquanto a energia média é diferente de zero. Observamos que quando adicionamos o ruído AD ao PD, conseguimos mitigar parcialmente a atuação do ruído PD sobre o sistema, favorecendo consideravelmente a geração e manutenção de emaranhamento – com a presença do campo externo. Tal associação demonstrou-se benéfica novamente quando controlamos uma trajetória associada ao emaranhamento, e como efeito secundário, observamos ainda que valores maiores de coerência e negatividade no sistema, tanto para tempos curtos quanto tempos longos. Além disso, inicialmente propusemos que ambos os *qubits* eram idênticos, algo padrão em teoria de informação quântica, contudo, demonstramos que no caso de um sistema aberto cujo ambiente esteja afetando cada *qubit* de maneira heterogênea, o protocolo de controle ainda é capaz de manter diferentes níveis de populações com grande precisão. Exemplificamos também como as múltiplas soluções podem ser benéficas para o comportamento do sistema, pois encontramos resultados consideravelmente melhores quando incluímos o parâmetro da fase do laser.

No que tange o método de controle direto, primeiramente controlamos o valor esperado da posição do oscilador harmônico quântico considerando dois casos – dez e vinte níveis. Nunca antes esse método havia sido explorado para  $N > 2$ . Incluímos uma verificação do número de possíveis soluções em cada janela temporal, propagando as cinco primeiras soluções e observando o padrão resultante. Vimos que em determinadas regiões, e dependendo do comportamento da trajetória alvo, poderiam existir milhares de soluções. Já em outras, identificamos algumas dezenas, centenas ou até mesmo nenhuma solução. Para contornar tal situação, dividimos por 10 a precisão numérica dos parâmetros de controle a fim de aumentar esse espaço, algo que denominamos de precisão dinâmica. No que se refere ao controle do radical OH, propomos uma trajetória cuja a amplitude das oscilações decrescia gradualmente, mas obviamente delimitada em sua janela de controlabilidade (autovalores mínimos e máximos). Retornando ao sistema de dez níveis do oscilador harmônico, implementamos o controle de restrição de população. Conseguimos manipular a mesma trajetória alvo e ainda manter os valores da soma das três primeiras populações menores ou no máximo iguais a 0,10. Ou seja, não permitimos que a população supere 10% da ocupação dentre esses níveis. Em seguida, fizemos um procedimento análogo para as probabilidades na base do observável onde restringimos o terceiro, o quinto e oitavo autoestado de posição do sistema, cuja soma também não ultrapassou os 10%.

Finalizamos o capítulo com o controle de mínima dispersão aplicado a um sistema de três níveis (do mesmo oscilador). Apesar das probabilidades exibirem variações rápidas em determinados intervalos de tempo, o controle foi totalmente satisfatório. A ideia por trás do procedimento de minimização da variância no valor esperado do observável (que é o valor médio de um operador) recai novamente na manutenção da trajetória alvo entre dois autovalores consecutivos. Na prática significa que somente duas componentes de probabilidade do observável serão utilizadas para satisfazer a trajetória alvo, alternando-se entre níveis inferiores e superiores, mas sempre restritos a termos consecutivos. Em alguma aplicação futura, tentaremos combinar o protocolo de minimização da dispersão juntamente com o formalismo de matriz densidade aplicado em sistemas abertos.

Em relação ao método paramétrico misto, contribuimos essencialmente na análise e visualização do espaço de múltiplas soluções. Em relação ao método, o uso da ortonormalização de Gram-Schmidt proporcionou uma maneira direta de associar subespaços de Hilbert com dimensões distintas. Ou seja, mapeamos um problema  $N$ -dimensional em outro de 2 níveis efetivos, cuja principal informação de ‘entrada’ era a taxa de variação do estado inicial para o estado final em cada janela de controle.

Outra importante contribuição desta tese vem justamente na determinação das equações dinâmicas do subespaço de dois níveis efetivos. Tais expressões foram resolvidas analiticamente, e conforme comentado no parágrafo anterior, conseguimos esboçar graficamente o conjunto de parâmetros na forma de superfícies. Tal espaço é muito bem

definido, principalmente em relação aos respectivos valores extremos (máximos e mínimos). Escolhemos a molécula de HF, que possui vinte e quatro níveis, no intuito de controlar o valor esperado da distância intermolecular. Conseguimos estabilizar as oscilações moleculares, inicialmente mandando o átomo de Hidrogênio para regiões distantes do Flúor e depois fazendo-os se aproximarem gradualmente. Em seguida, preparamos um pacote de ondas com os estados vibracionais do HF a fim de observar a sua dinâmica. Vimos que o pacote de ondas se espalhava por regiões mais afastadas da posição de equilíbrio, e em distâncias menores a probabilidade desse pacote era mais localizada, apesar de sofrer algumas interferências do próprio formato do potencial Morse.

Portanto, os principais resultados almejados para a tese foram devidamente alcançados. Como perspectiva de trabalhos futuros em controle quântico, elencamos alguns exemplos:

- Caracterizar o quão complexo deve ser o potencial  $V$  para implementar um certo controle quântico.
- Estudar a viabilidade do controle de  $N$ -qubits interagentes e sendo descrito por outras equações mestras.
- Tentar explorar o controle de um sistema com  $N > 100$  níveis.
- Controlar a dinâmica de reconstruções de um pacote de ondas vibracional.
- Aplicar o método paramétrico direto no controle de dissociação molecular.
- Encontrar maneiras de simplificar a estrutura matemática do método misto.

## REFERÊNCIAS

- [1] Aron Luiz Oliveira dos Santos. Controle quântico paramétrico aplicado a sistemas de quatro níveis. Master's thesis, Universidade Federal do Paraná - UFPR, 2019.
- [2] Jiusandro Kuhn. *Controle Paramétrico de Evolução Quântica*. PhD thesis, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, 2008.
- [3] Brianna R Heazlewood. Quantum-state control and manipulation of paramagnetic molecules with magnetic fields. *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 72:353–373, 2021.
- [4] JM Smith, PA Dalgarno, RJ Warburton, AO Govorov, K Karrai, BD Gerardot, and PM Petroff. Voltage control of the spin dynamics of an exciton in a semiconductor quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 94(19):197402, 2005.
- [5] Adrien Devolder, Timur Tscherbul, and Paul Brumer. Coherent control of reactive scattering at low temperatures: Signatures of quantum interference in the differential cross sections for  $f+h_2$  and  $f+hd$ . *Phys. Rev. A*, 102(3):031303, 2020.
- [6] R. G. Unanyan, L. P. Yatsenko, K. Bergmann, and B. W. Shore. Population inversion using laser and quasistatic magnetic field pulses. *Opt. Commun.*, 139:43, 1997.
- [7] M. Shapiro and P. Brumer. Laser control of unimolecular decay yields in the presence of collisions. *J. Chem. Phys.*, 90:6179, 1989.
- [8] T. H. Maiman. Stimulated optical radiation in ruby. *Nature*, 187(4736):493, 1960.
- [9] Yan Han and Guifang Li. Coherent optical communication using polarization multiple-input-multiple-output. *Opt. Exp.*, 13(19):7527–7534, 2005.
- [10] Dipika V Patel and Charles NJ McGhee. Contemporary in vivo confocal microscopy of the living human cornea using white light and laser scanning techniques: a major review. *Clin. Exp. Ophthalmol.*, 35(1):71–88, 2007.
- [11] L-C Zhang, Hooyar Attar, Mariana Calin, and Jurgen Eckert. Review on manufacture by selective laser melting and properties of titanium based materials for biomedical applications. *Mat. Tech.*, 31(2):66–76, 2016.



- 
- [12] Haibo Zeng, Xi-Wen Du, Subhash C Singh, Sergei A Kulinich, Shikuan Yang, Jianping He, and Weiping Cai. Nanomaterials via laser ablation/irradiation in liquid: a review. *Adv. Func. Mat.*, 22(7):1333–1353, 2012.
- [13] Hong-Hua Fang, Jie Yang, Jing Feng, Takeshi Yamao, Shu Hotta, and Hong-Bo Sun. Functional organic single crystals for solid-state laser applications. *Las. Phot. Rev.*, 8(5):687–715, 2014.
- [14] Editorial. Celebrating 60 years of laser. *Commun. Phys.*, 96:3, 2020.
- [15] M. E. Corrales, J.González-Vázquez, G. Balerdi, I.R.Soá, R.deNalda, and L. Bañares. Control of ultrafast molecular photodissociation by laser-field-induced potentials. *Nature Chemistry*, 6:785 – 790, 2014.
- [16] Andrius Baltuška, Th Udem, M Uiberacker, M Hentschel, E\_ Goulielmakis, Ch Gohle, Ronald Holzwarth, VS Yakovlev, A Scrinzi, Th W Hänsch, et al. Attosecond control of electronic processes by intense light fields. *Nature*, 421(6923):611–615, 2003.
- [17] Moshe Shapiro and Paul Brumer. *Principles of the Quantum Control of Molecular Process*. John Wiley Sons INC, 2002.
- [18] Konrad Hütten, Michael Mittermair, Sebastian O Stock, Randolf Beerwerth, Vahe Shirvanyan, Johann Riemensberger, Andreas Duensing, Rupert Heider, Martin S Wagner, Alexander Guggenmos, et al. Ultrafast quantum control of ionization dynamics in krypton. *Nat. Comm.*, 9(1):1–5, 2018.
- [19] Birgitta Whaley and Gerard Milburn. Focus on coherent control of complex quantum systems. *J. Phys.*, 17(10):100202, 2015.
- [20] Jiusandro Kuhn. Estudo da dinâmica de pacotes de onda em bilhares quânticos. Master’s thesis, Universidade Federal do Paraná - UFPR, Curitiba, Paraná, may. 2004.
- [21] J.J. Sakurai and Jim Napolitano. *Mecânica Quântica Moderna*. bookman, Porto Alegre, 2013.
- [22] Christiane P Koch. Controlling open quantum systems: tools, achievements, and limitations. *J. Phys. Cond. Mat.*, 28(21):213001, 2016.
- [23] Wusheng Zhu, Martina Smit, and Herschel Rabitz. Managing singular behavior in the tracking control of quantum dynamical observables. *J. Chem. Phys.*, 110(4):1905–1915, 1999.
- [24] J. Kuhn and M. G. E. Luz. Piecewise time-independent procedure to control two-level systems. *Phys. Rev.*, 75(A):053–410, 2007.

- [25] G. J. Delben and M. G. E. da Luz. General tracking control of arbitrary n-level quantum systems using piecewise time-independent potentials. *Quan. Inf. Proc.*, 15(5):1955–1978, 2016.
- [26] P. Brumer and M. Shapiro. Control of unimolecular reactions using coherent light. *Chem. Phys. Lett.*, 126:541, 1986.
- [27] J. Werschnik and E. K. U. Gross. Quantum optimal control theory. *Journal Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.*, 40:R175–R211, 10 2007.
- [28] W. S. Zhu and 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.
- [29] Tommaso Caneva, Michael Murphy, Tommaso Calarco, Rosario Fazio, Simone Montangero, Vittorio Giovannetti, and Giuseppe E Santoro. Optimal control at the quantum speed limit. *Phys. Rev. Lett.*, 103(24):240501, 2009.
- [30] A. P. Peirce, M. A. Dahleh, and H. Rabitz. Optimal control of quantum-mechanical systems: Existence, numerical approximation, and applications. *Phys. Rev. A*, 37:4950, 1988.
- [31] Christian Arenz and Herschel Rabitz. Controlling qubit networks in polynomial time. *Phys. Rev. Lett.*, 120(22):220503, 2018.
- [32] Jair Botina, Herschel Rabitz, and Naseem Rahman. A new approach to molecular classical optimal control: Application to the reaction  $\text{hcn} \rightarrow \text{hc} + \text{n}$ . *J. Chem. Phys.*, 102(1):226–236, 1995.
- [33] Praveen Kumar and Svetlana A. Malinovskaya. Quantum dynamics manipulation using optimal control theory in the presence of laser field noise. *J. Mod. Opt.*, 57(14-15):9, august 2010.
- [34] Yuzuru Kurosaki, Tak-San Ho, and Herschel Rabitz. The role of dissociation channels of excited electronic states in quantum optimal control of ozone isomerization: A three-state dynamical model. *Chem. Phys.*, 469:115–122, 2016.
- [35] C. K. Ong, G. M. Huang, T. J. Tarn, and J. W. Clark. Invertibility of quantum-mechanical control systems. *Math. Systems Theory*, 17(4):335, 1984.
- [36] Peter Gross, Harjinder Singh, Herschel Rabitz, Kenneth Mease, and GM Huang. Inverse quantum-mechanical control: A means for design and a test of intuition. *Phys. Rev. A*, 47(6):4593, 1993.
- [37] Wusheng Zhu and Herschel Rabitz. Quantum control design via adaptive tracking. *J. Chem. Phys.*, 119(7):3619–3625, 2003.

- [38] Andre G Campos, Denys I Bondar, Renan Cabrera, and Herschel A Rabitz. How to make distinct dynamical systems appear spectrally identical. *Phys. Rev. Lett.*, 118(8):083201, 2017.
- [39] G. McCaul, C. Orthodoxou, K. Jacobs, G. H. Booth, , and D. I. Bondar. Driven imposters: Controlling expectations in many-body systems. *Phys. Rev. Lett.*, 124(18):183201, 2020.
- [40] Guilherme Jurkevicz Delben. *Controle Paramétrico por Partes de um Sistema Quântico de N Níveis*. PhD thesis, Universidade Federal do Paraná - UFPR, 2013.
- [41] G. J. Delben and M. G. E. da Luz. General tracking control of arbitrary n-level quantum systems using piecewise time-independent potentials. *Quan. Inf. Proc.*, 15(5):1955–1978, 2016.
- [42] Katharine W Moore and Herschel Rabitz. Exploring quantum control landscapes: Topology, features, and optimization scaling. *Phys. Rev. A*, 84(1):012109, 2011.
- [43] Arun Nanduri, Ofer M Shir, Ashley Donovan, Tak-San Ho, and Herschel Rabitz. Exploring the complexity of quantum control optimization trajectories. *Physical Chemistry Chem. Phys.*, 17(1):334–347, 2015.
- [44] Albert Einstein, Boris Podolsky, and Nathan Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, 47(10):777, 1935.
- [45] John S Bell. On the einstein podolsky rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, 1(3):195, 1964.
- [46] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [47] Heinz-Peter Breuer, Francesco Petruccione, et al. *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [48] Alain Aspect, Jean Dalibard, and Gérard Roger. Experimental test of bell’s inequalities using time-varying analyzers. *Phys. Rev. Lett.*, 49(25):1804, 1982.
- [49] Laszlo Gyongyosi and Sandor Imre. Entanglement access control for the quantum internet. *Quan. Inf. Proc.ing*, 18(4):107, 2019.
- [50] Kui Hou, Da qiang Bao, Cheng jie Zhu, and Ya ping Yang. Controlled teleportation of an arbitrary two-qubit entanglement in noises environment. *Quantum Inf. Process*, 18:104, 2019.

- 
- [51] Sandeep K Goyal, Subhashish Banerjee, and Sibasish Ghosh. Effect of control procedures on the evolution of entanglement in open quantum systems. *Phys. Rev. A*, 85(1):012327, 2012.
- [52] Leandro Aolita, Fernando De Melo, and Luiz Davidovich. Open-system dynamics of entanglement: a key issues review. *Rep. Prog. Phys.*, 78(4):042001, 2015.
- [53] Yuanhao Wang, Ying Li, Zhang-qi Yin, and Bei Zeng. 16-qubit ibm universal quantum computer can be fully entangled. *NPJ Quan. Inf.*, 4(1):1–6, 2018.
- [54] Cédric Bény, Christopher T Chubb, Terry Farrelly, and Tobias J Osborne. Energy cost of entanglement extraction in complex quantum systems. *Nat. Comm.*, 9(1):1–9, 2018.
- [55] M. Ghasemi and M. K. Tavassoly. Dissipative quantum repeater. *Quantum Inf. Process*, 18:113, 2019.
- [56] Nicolò Accanto, Pablo M De Roque, Marcial Galvan-Sosa, Sotirios Christodoulou, Iwan Moreels, and Niek F Van Hulst. Rapid and robust control of single quantum dots. *Light: Science & Applications*, 6(3):e16239–e16239, 2017.
- [57] Fang Gao, Roberto Rey-de Castro, Yaoxiong Wang, Herschel Rabitz, and Feng Shuang. Identifying a cooperative control mechanism between an applied field and the environment of open quantum systems. *Phys. Rev. A*, 93(5):053407, 2016.
- [58] Jonas Maziero. A representação de kraus para a dinâmica de sistemas quânticos abertos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 38, 2016.
- [59] Walter T Strunz. Decoherence in quantum physics. In *Coherent Evolution in Noisy Environments*, pages 199–233. Springer, 2002.
- [60] Girish S Agarwal. Quantum statistical theories of spontaneous emission and their relation to other approaches. *Quan. Opt.*, pages 1–128, 1974.
- [61] DO Soares-Pinto, MHY Moussa, J Maziero, ER Deazevedo, TJ Bonagamba, RM Serra, and LC Céleri. Equivalence between redfield-and master-equation approaches for a time-dependent quantum system and coherence control. *Phys. Rev. A*, 83(6):062336, 2011.
- [62] Philip Pearle. Simple derivation of the lindblad equation. *Euro. J. Phys.*, 33(4):805, 2012.
- [63] Constantin Brif, Raj Chakrabarti, and Herschel Rabitz. Control of quantum phenomena: past, present and future. *IOP Science*, 2010.

- [64] Manzoor Ikram, Fu-li Li, and M Suhail Zubairy. Disentanglement in a two-qubit system subjected to dissipation environments. *Phys. Rev. A*, 75(6):062336, 2007.
- [65] Bo Jing, Xu-Jie Wang, Yong Yu, Peng-Fei Sun, Yan Jiang, Sheng-Jun Yang, Wen-Hao Jiang, Xi-Yu Luo, Jun Zhang, Xiao Jiang, et al. Entanglement of three quantum memories via interference of three single photons. *Nature Photonics*, 13(3):210–213, 2019.
- [66] Bi-Heng Liu, Li Li, Yun-Feng Huang, Chuan-Feng Li, Guang-Can Guo, Elsi-Mari Laine, Heinz-Peter Breuer, and Jyrki Piilo. Experimental control of the transition from markovian to non-markovian dynamics of open quantum systems. *Nat. Phys.*, 7(12):931–934, 2011.
- [67] Julio T Barreiro. Environmental effects controlled. *Nat. Phys.*, 7(12):927–928, 2011.
- [68] Julio T Barreiro, Markus Müller, Philipp Schindler, Daniel Nigg, Thomas Monz, Michael Chwalla, Markus Hennrich, Christian F Roos, Peter Zoller, and Rainer Blatt. An open-system quantum simulator with trapped ions. *Nature*, 470(7335):486–491, 2011.
- [69] Steve Campbell, Francesco Ciccarello, G Massimo Palma, and Bassano Vacchini. System-environment correlations and markovian embedding of quantum non-markovian dynamics. *Phys. Rev. A*, 98(1):012142, 2018.
- [70] R Lo Franco, Antonio D’Arrigo, Giuseppe Falci, Giuseppe Compagno, and Elisabetta Paladino. Preserving entanglement and nonlocality in solid-state qubits by dynamical decoupling. *Phys. Rev. B*, 90(5):054304, 2014.
- [71] E. Paladino, YM. Galperin, G. Falci, and BL. Altshuler.  $1/f$  noise: Implications for solid-state quantum information. *Rev. Mod. Phys.*, 86(2):361, 2014.
- [72] M. H. M. Passos, W. F. Balthazar, A. Z. Khoury, M. Hor-Meyll, L. Davidovich, and J. A. O. Huguenin. Experimental investigation of environment-induced entanglement using an all-optical setup. *Phys. Rev. A*, 97(1):022321, 2018.
- [73] Silas R. Beane, David B. Kaplan, Natalie Klco, and Martin J. Savage. Entanglement suppression and emergent symmetries of strong interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 122:102001, 2019.
- [74] Zhengjun Xi, Yongming Li, and Heng Fan. Quantum coherence and correlations in quantum system. *Sci. Rep.*, 5(1):1–9, 2015.
- [75] ACS Costa, MW Beims, and RM Angelo. Generalized discord, entanglement, einstein-podolsky-rosen steering, and bell nonlocality in two-qubit systems under (non-)

- markovian channels: Hierarchy of quantum resources and chronology of deaths and births. *Phys. A: Stat. Mech. App.*, 461:469–479, 2016.
- [76] ARR Carvalho, AJS Reid, and JJ Hope. Controlling entanglement by direct quantum feedback. *Phys. Rev. A*, 78(1):012334, 2008.
- [77] Sabrina Maniscalco, Francesco Francica, Rosa L Zaffino, Nicola Lo Gullo, and Francesco Plastina. Protecting entanglement via the quantum zeno effect. *Phys. Rev. Lett.*, 100(9):090503, 2008.
- [78] Y. Lin, J. P. Gaebler, F. Reiter, T. R. Tan, R. Bowler, A. S. Sorensen, D. Leibfried, , and D. J. Wineland. Dissipative production of a maximally entangled steady state of two quantum bits. *Nature*, 504:12801, 2013.
- [79] Shyam Shankar, Michael Hatridge, Zaki Leghtas, KM Sliwa, Aniruth Narla, Uri Vool, Steven M Girvin, Luigi Frunzio, Mazyar Mirrahimi, and Michel H Devoret. Autonomously stabilized entanglement between two superconducting quantum bits. *Nature*, 504(7480):419–422, 2013.
- [80] G. H. Aguilar, A. Valdés-Hernández, L. Davidovich, S. P. Walborn, and P. H. Souto Ribeiro. Experimental entanglement redistribution under decoherence channels. *Phys. Rev. Lett*, 113:240501, 2014.
- [81] F. Dolde, V. Bergholm, Y. Wang, I. Jakobi, B. Naydenov, S. Pezzagna, J. Meijer, F. Jelezko, P. Neumann, T. Schulte-Herbruggen, J. Biamonte, and J. Wrachtrup. High-fidelity spin entanglement using optimal control. *Nature Communications*, 5:4371, 2014.
- [82] C. Gonzalez-Ballester, E. Moreno, and F. J. Garcia Vidal. Generation, manipulation, and detection of two qubit entanglement in waveguide qed. *Phys. Rev. A*, 89:042328, 2014.
- [83] W. B. Gao, A. Imamoglu, H. Bernien, and R. Hanson. Coherent manipulation, measurement and entanglement of individual solid-state spins using optical fields. *Nature Photonics*, 5:58, 2015.
- [84] Fernando Galve and Eric Lutz. Energy cost and optimal entanglement production in harmonic chains. *Phys. Rev. A*, 79(3):032327, 2009.
- [85] Giulio Chiribella and Yuxiang Yang. Optimal quantum operations at zero energy cost. *Phys. Rev. A*, 96(2):022327, 2017.
- [86] William K Wootters. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Phys. Rev. Lett.*, 80(10):2245, 1998.

- 
- [87] Charles H Bennett, Herbert J Bernstein, Sandu Popescu, and Benjamin Schumacher. Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A*, 53(4):2046, 1996.
- [88] Karol Życzkowski, Paweł Horodecki, Anna Sanpera, and Maciej Lewenstein. Volume of the set of separable states. *Phys. Rev. A*, 58(2):883, 1998.
- [89] Tillmann Baumgratz, Marcus Cramer, and Martin B Plenio. Quantifying coherence. *Phys. Rev. Lett.*, 113(14):140401, 2014.
- [90] Richard Jozsa. Fidelity for mixed quantum states. *J. Mod. Opt.*, 41(12):2315–2323, 1994.
- [91] Ignacio R Sola, Bo Y Chang, Svetlana A Malinovskaya, and Vladimir S Malinovsky. Quantum control in multilevel systems. In *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*, volume 67, pages 151–256. Elsevier, 2018.
- [92] Clemens Müller, Jared H Cole, and Jürgen Lisenfeld. Towards understanding two-level-systems in amorphous solids: insights from quantum circuits. *Rep. Prog. Phys.*, 82(12):124501, 2019.
- [93] I Medina and FL Semião. Pulse engineering for population control under dephasing and dissipation. *Phys. Rev. A*, 100(1):012103, 2019.
- [94] R Tehini, K Hamraoui, and D Sugny. Shaping of the time evolution of field-free molecular orientation by thz laser pulses. *Phys. Rev. A*, 99(3):033419, 2019.
- [95] Nikolay V Golubev, Victor Despré, and Alexander I Kuleff. Quantum control with smoothly varying pulses: general theory and application to charge migration. *J. Mod. Opt.*, 64(10-11):1031–1041, 2017.
- [96] Murphy Yuezhen Niu, Sergio Boixo, Vadim N Smelyanskiy, and Hartmut Neven. Universal quantum control through deep reinforcement learning. *NPJ Quan. Inf.*, 5(1):1–8, 2019.
- [97] Abhinav Kandala, Antonio Mezzacapo, Kristan Temme, Maika Takita, Markus Brink, Jerry M Chow, and Jay M Gambetta. Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. *Nature*, 549(7671):242–246, 2017.
- [98] Marcus Theisen, Francesco Petiziol, Stefano Carretta, Paolo Santini, and Sandro Wimberger. Superadiabatic driving of a three-level quantum system. *Phys. Rev. A*, 96(1):013431, 2017.

- [99] Arne Barfuss, Johannes Kölbl, Lucas Thiel, Jean Teissier, Mark Kasperczyk, and Patrick Maletinsky. Phase-controlled coherent dynamics of a single spin under closed-contour interaction. *Nat. Phys.*, 14(11):1087–1091, 2018.
- [100] CA Estrada Guerra, D Velasco Villamizar, and Luis GC Rego. Decoherence effects on quantum control by reverse optimized pulse sequences. *Phys. Rev. A*, 86(2):023411, 2012.
- [101] Isidor I Rabi, Sidney Millman, P Kusch, and Jerrold Reinach Zacharias. The molecular beam resonance method for measuring nuclear magnetic moments. the magnetic moments of  $^6\text{Li}$ ,  $^7\text{Li}$  and  $^19\text{F}$ . *Phys. Rev.*, 55(6):526, 1939.
- [102] SC Hou, XL Huang, and XX Yi. Suppressing decoherence and improving entanglement by quantum-jump-based feedback control in two-level systems. *Phys. Rev. A*, 82(1):012336, 2010.
- [103] Sai Vinjanampathy and ARP Rau. Generalized x states of n qubits and their symmetries. *Phys. Rev. A*, 82(3):032336, 2010.
- [104] Davide Girolami and Gerardo Adesso. Quantum discord for general two-qubit states: analytical progress. *Phys. Rev. A*, 83(5):052108, 2011.
- [105] Zhen-Yu Wang, Jorge Casanova, and Martin B Plenio. Delayed entanglement echo for individual control of a large number of nuclear spins. *Nat. Comm.*, 8(1):1–8, 2017.
- [106] Isidor Isaac Rabi, Norman F Ramsey, and Julian Schwinger. Use of rotating coordinates in magnetic resonance problems. *Rev. Mod. Phys.*, 26(2):167, 1954.
- [107] Murilo Aranha Guimarães Marcello. Manual de teoria da comunicação. *Tríade: Comunicação, Cultura e Mídia*, 5(9), 2017.
- [108] Claude E Shannon. A mathematical theory of communication, bell systems technol. *J*, 27(3):379–423, 1948.
- [109] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum mechanics*, volume 1. John Wiley, New York, 1977.
- [110] Raphael Fortes and Gustavo Rigolin. Fighting noise with noise in realistic quantum teleportation. *Phys. Rev. A*, 92(1):012338, 2015.
- [111] Susanna F Huelga and Martin B Plenio. Vibrations, quanta and biology. *Contemporary Physics*, 54(4):181–207, 2013.
- [112] Guifré Vidal and Reinhard F Werner. Computable measure of entanglement. *Phys. Rev. A*, 65(3):032314, 2002.



- 
- [113] Frank Verstraete, Koenraad Audenaert, Jeroen Dehaene, and Bart De Moor. A comparison of the entanglement measures negativity and concurrence. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34(47):10327, 2001.
- [114] Nicolai Friis, Giuseppe Vitagliano, Mehul Malik, and Marcus Huber. Entanglement certification from theory to experiment. *Nature Reviews Physics*, 1(1):72–87, 2019.
- [115] Michał Horodecki, Paweł Horodecki, and Ryszard Horodecki. Mixed-state entanglement and distillation: Is there a “bound” entanglement in nature? *Phys. Rev. Lett.*, 80(24):5239, 1998.
- [116] Mark Galassi, Jim Davies, James Theiler, Brian Gough, Gerard Jungman, Patrick Alken, Michael Booth, and Fabrice Rossi. Gnu scientific library. *No. Release*, 2, 1996.
- [117] Sven M Hein, Franz Schulze, Alexander Carmele, and Andreas Knorr. Entanglement control in quantum networks by quantum-coherent time-delayed feedback. *Phys. Rev. A*, 91(5):052321, 2015.
- [118] GJ Delben and MW Beims. Tracking control of two qubit entanglement using piecewise time-independent method. *Physica Scripta*, 96(2):025102, 2021.
- [119] Ryszard Horodecki, Paweł Horodecki, Michał Horodecki, and Karol Horodecki. Quantum entanglement. *Rev. Mod. Phys.*, 81:865–942, Jun 2009.
- [120] TP Harty, MA Sepiol, DTC Allcock, CJ Ballance, JE Tarlton, and DM Lucas. High-fidelity trapped-ion quantum logic using near-field microwaves. *Phys. Rev. Lett.*, 117(14):140501, 2016.
- [121] Raymond J Spiteri, Marina Schmidt, Joydip Ghosh, Ehsan Zahedinejad, and Barry C Sanders. Quantum control for high-fidelity multi-qubit gates. *J. Phys.*, 20(11):113009, 2018.
- [122] Peter Kaufmann, Timm F Gloger, Delia Kaufmann, Michael Johanning, and Christof Wunderlich. High-fidelity preservation of quantum information during trapped-ion transport. *Phys. Rev. Lett.*, 120(1):010501, 2018.
- [123] J Randall, AM Lawrence, SC Webster, S Weidt, NV Vitanov, and WK Hensinger. Generation of high-fidelity quantum control methods for multilevel systems. *Phys. Rev. A*, 98(4):043414, 2018.
- [124] ZH Wang, YJ Ji, Yong Li, and DL Zhou. Dissipation and decoherence induced by collective dephasing in a coupled-qubit system with a common bath. *Phys. Rev. A*, 91(1):013838, 2015.

- [125] Peter C Humphreys, Norbert Kalb, Jaco PJ Morits, Raymond N Schouten, Raymond FL Vermeulen, Daniel J Twitchen, Matthew Markham, and Ronald Hanson. Deterministic delivery of remote entanglement on a quantum network. *Nature*, 558(7709):268–273, 2018.
- [126] Mihir Pant, Hari Krovi, Don Towsley, Leandros Tassiulas, Liang Jiang, Prithwish Basu, Dirk Englund, and Saikat Guha. Routing entanglement in the quantum internet. *NPJ Quan. Inf.*, 5(1):1–9, 2019.
- [127] Jun Jing, Ting Yu, Chi-Hang Lam, JQ You, and Lian-Ao Wu. Control relaxation via dephasing: A quantum-state-diffusion study. *Phys. Rev. A*, 97(1):012104, 2018.
- [128] Sebastian Zaiser, Torsten Rendler, Ingmar Jakobi, Thomas Wolf, Sang-Yun Lee, Samuel Wagner, Ville Bergholm, Thomas Schulte-Herbrüggen, Philipp Neumann, and Jörg Wrachtrup. Enhancing quantum sensing sensitivity by a quantum memory. *Nat. Comm.*, 7:12279, 2016.
- [129] Wei Zhang, Dong-Sheng Ding, Yu-Bo Sheng, Lan Zhou, Bao-Sen Shi, and Guang-Can Guo. Quantum secure direct communication with quantum memory. *Phys. Rev. Lett.*, 118(22):220501, 2017.
- [130] Christiane P Koch. Controlling open quantum systems: tools, achievements, and limitations. *J. Phys. Cond. Mat.*, 28(21):213001, 2016.
- [131] ALO dos Santos and GJ Delben. Tracking quantum control for a two qutrits system under amplitude damping noise. *Phys. A: Stat. Mech. App.*, 574:126017, 2021.
- [132] DW Schlitt and C Stutz. An instructive example of the sudden approximation in quantum mechanics. *American Journal of Physics*, 38(1):70–75, 1970.
- [133] Paul R Berman. Approximation techniques in time-dependent problems. In *Introductory Quantum Mechanics*, pages 593–606. Springer, 2018.
- [134] Khosrow Chadan and Pierre C Sabatier. *Inverse problems in quantum scattering theory*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [135] Eugene L Allgower, Kurt Georg, et al. *Computational solution of nonlinear systems of equations*, volume 26. American Mathematical Soc., 1990.
- [136] Abhinav Jha, Vincent Beltrani, Carey Rosenthal, and Herschel Rabitz. Multiple solutions in the tracking control of quantum systems. *J. Phys. Chem. A*, 113(26):7667–7670, 2009.
- [137] Alicia Magann, Tak-San Ho, and Herschel Rabitz. Singularity-free quantum tracking control of molecular rotor orientation. *Phys. Rev. A*, 98(4):043429, 2018.

- [138] Tatsuya Joutsuka, Ward H Thompson, and Damien Laage. Vibrational quantum decoherence in liquid water. *The journal of physical chemistry letters*, 7(4):616–621, 2016.
- [139] Philip M. Morse. Diatomic molecules according to the wave mechanics. ii. vibrational levels. *Phys. Rev.*, 34(A):57–64, 1929.
- [140] Konstantinos S Kalogerakis, Daniel Matsiev, Philip C Cosby, James A Dodd, Stefano Falcinelli, Jonas Hedin, Alexander A Kutepov, Stefan Noll, Peter A Panka, Constantin Romanescu, et al. New insights for mesospheric oh: multi-quantum vibrational relaxation as a driver for non-local thermodynamic equilibrium. In *Annales geophysicae*, volume 36, pages 13–24. Copernicus GmbH, 2018.
- [141] Peter W. Atkins and Ronald Friedman. *Molecular Quantum Mechanics*, volume 1. Oxford, New York, 1999.
- [142] R Mecke. Das rotationsschwingungsspektrum des wasserdampfes. i. *Zeitschrift für Physik*, 81(5):313–331, 1933.
- [143] Daniel Keefer and Regina de Vivie-Riedle. Pathways to new applications for quantum control. *Accounts of chemical research*, 51(9):2279–2286, 2018.
- [144] Till Stensitzki, Yang Yang, Valeri Kozich, Ashour A Ahmed, Florian Kössl, Oliver Kühn, and Karsten Heyne. Acceleration of a ground-state reaction by selective femtosecond-infrared-laser-pulse excitation. *Nature chemistry*, 10(2):126–131, 2018.
- [145] Kenji Mishima and Koichi Yamashita. Free-time and fixed end-point multi-target optimal control theory: Application to quantum computing. *Chem. Phys.*, 379(1-3):13–22, 2011.
- [146] Ditte Møller. *Adiabatic Processes in Quantum Computation*. PhD thesis, University of Aarhus, Denmark, 05 2008.
- [147] Bruce W Shore. Picturing stimulated raman adiabatic passage: a stirap tutorial. *Advances in Optics and Photonics*, 9(3):563–719, 2017.
- [148] R Unanyan, M Fleischhauer, BW Shore, and K Bergmann. Robust creation and phase-sensitive probing of superposition states via stimulated raman adiabatic passage (STIRAP) with degenerate dark states. *Opt. Comm.*, 155(1):144–154, 1998.
- [149] Howard Anton and Robert C Busby. *Álgebra linear contemporânea*. Bookman Editora, 2006.
- [150] George B Arfken and Hans J Weber. *Mathematical methods for physicists*, 1999.

- 
- [151] Xin-Ping Xu. Exact analytical results for quantum walks on star graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 42(11):115205, 2009.
- [152] Ward Cheney and David Kincaid. Linear algebra: Theory and applications. *The Australian Mathematical Society*, 110, 2009.
- [153] Åke Björck. Numerics of gram-schmidt orthogonalization. *Linear Algebra and Its Applications*, 197:297–316, 1994.
- [154] Lyle Pursell and SY Trimble. Gram-schmidt orthogonalization by gauss elimination. *The American Mathematical Monthly*, 98(6):544–549, 1991.
- [155] Lloyd N Trefethen and David Bau III. *Numerical linear algebra*, volume 50. Siam, 1997.
- [156] Akira Imakura and Yusaku Yamamoto. Efficient implementations of the modified gram-schmidt orthogonalization with a non-standard inner product. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 36(2):619–641, 2019.
- [157] Gene H Golub and Charles F Van Loan. *Matrix computations*, volume 3. JHU press, 2012.
- [158] Johannes Hecker Denschlag. A toy model for a diatomic molecule. *Physica Scripta*, 91(8):083012, 2016.
- [159] Yuzuru Kurosaki and Keiichi Yokoyama. Quantum optimal control of the isotope-selective rovibrational excitation of diatomic molecules. *Chem. Phys.*, 493:183–193, 2017.
- [160] Johan F Triana and José Luis Sanz-Vicario. Polar diatomic molecules in optical cavities: Photon scaling, rotational effects, and comparison with classical fields. *J. Chem. Phys.*, 154(9):094120, 2021.
- [161] ACS Chemistry for Life. Molecule of the week archive: Hydrogen fluoride.
- [162] Karl L Kompa and George C Pimentel. Hydrofluoric acid chemical laser. *J. Chem. Phys.*, 47(2):857–858, 1967.
- [163] Meryem Tizniti, Sébastien D Le Picard, François Lique, Coralie Berteloite, André Canosa, Millard H Alexander, and Ian R Sims. The rate of the f+h<sub>2</sub> reaction at very low temperatures. *Nature chemistry*, 6(2):141–145, 2014.
- [164] JR Stine and DW Noid. Classical treatment of the dissociation of hydrogen fluoride with one and two infrared lasers. *Opt. Comm.*, 31(2):161–164, 1979.

- [165] Ira N Levine, Daryle H Busch, and Harrison Shull. *Quantum chemistry*, volume 6. Pearson Prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 2009.
- [166] Emanuel F de Lima and José EM Hornos. The morse oscillator under time-dependent external fields. *J. Chem. Phys.*, 125(16):164110, 2006.
- [167] Péter Földi, Attila Czirják, Balázs Molnár, and Mihály G Benedict. Formation of schrödinger-cat states in the morse potential: wigner function picture. *Opt. Exp.*, 10(8):376–381, 2002.
- [168] Supriya Chatterjee. On the exact revival of morse oscillator wave packets. *J. Math. Chem.*, pages 1–11, 2022.
- [169] R. W. Robinett. Quantum wave packet revivals. *Phys. Rep.*, 392:1, 2004.
- [170] F. F. Guimarães, F. Gel'mukhanov, A. Cesar, and H. Agren. Quantum wave packet revivals in ir + x-ray pump-probe spectroscopy. *Chem. Phys. Lett.*, 405:398, 2005.
- [171] Walter Pfeifer. The lie algebras  $su(n)$ . In *The Lie Algebras  $su(N)$* , pages 15–21. Springer, 2003.
- [172] Karl Kraus, Arno Böhm, John D Dollard, and WH Wootters. States, effects, and operations: fundamental notions of quantum theory. lectures in mathematical physics at the university of texas at austin. *Lecture notes in physics*, 190, 1983.
- [173] Gabriel Landi. Quantum information and quantum noise. [http://www.fmt.if.usp.br/~gtlandi/courses/lecture-notes\\_v2-18.pdf](http://www.fmt.if.usp.br/~gtlandi/courses/lecture-notes_v2-18.pdf), 2019. [Online; acessado 10-Novembro-2021].
- [174] Robert Eisberg and Robert Resnick. *Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei and particles*. Elsevier, Rio de Janeiro, 1923.
- [175] Kimikazu Sugimori, T. Ito, Hidemi Nagao, and K. Nishigawa. Theoretical study of multiphoton processes in diatomic molecules. *International Journal of Quantum Chemistry*, 105(A):596–604, 2005.
- [176] Hosung Sun. The morse potential eigenenergy by the analytical transfer matrix method. *Physics Letters A*, 338(3-5):309–314, 2005.
- [177] Kleber Daum Machado. *Equações Diferenciais Aplicadas*. Toda palavra, Ponta Grossa, 2012.

## A OPERADORES, MATRIZES E TENSORES

*Para controlar a dinâmica de um sistema microscópico é necessário um ferramental teórico sofisticado, e tal recurso é devidamente fornecido através da mecânica quântica. Operadores, matrizes e tensores tornam-se indispensáveis quando o número de partículas aumenta, ao aplicarmos um campo de laser ou quando o sistema interage com um reservatório. Para um sistema de duas partículas, realizamos o produto tensorial do espaço de Hilbert correspondente  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ , e as matrizes de Pauli auxiliam na descrição desse novo espaço vetorial ‘aumentado’, como veremos nas próximas seções. O formalismo de matriz densidade é necessário quando buscamos analisar as densidades de probabilidades e coerência de um ensemble estatístico, e existem expressões úteis para obter informação sobre cada subsistema e as suas correlações quânticas.*

### A.1 MATRIZES DE PAULI E PROPRIEDADES

O objetivo desta seção é apresentar os operadores, e as suas principais propriedades, utilizados na representação de *qubits* no espaço de Hilbert. Tais operadores são denominados matrizes de Pauli, e geralmente são representados pelas matrizes  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$ . As matrizes de Pauli fazem parte de um grupo especial unitário no  $SU(2)$  [171], cujos elementos são

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

onde  $\sigma_0$  é a própria matriz identidade. As propriedades são apresentadas a seguir:

$$\det \sigma_k = -1, \quad (\text{A.2})$$

$$\text{Tr}[\sigma_k] = 0, \quad (\text{A.3})$$

$$[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\varepsilon_{abc} \sigma_c, \quad (\text{A.4})$$

$$\{\sigma_a, \sigma_b\} = 2\delta_{ab} \sigma_0, \quad (\text{A.5})$$

$$\sigma_k^2 = -i\sigma_x\sigma_y\sigma_z = \sigma_0. \quad (\text{A.6})$$

onde  $\varepsilon_{abc}$  é o símbolo de Levi-Civita<sup>1</sup>,  $\delta_{ab}$  é a delta de Kronecker<sup>2</sup> e  $(k = x, y, z)$ .

<sup>1</sup> O símbolo de Levi-Civita pode adquirir três valores:  $\varepsilon_{abc} = +1$  se  $abc$  tiver ordem cíclica,  $\varepsilon_{abc} = 0$  se  $a = b$ ,  $b = c$  ou  $a = c$  e  $\varepsilon_{abc} = -1$  se  $abc$  não tiver ordem cíclica.

<sup>2</sup> A delta de Kronecker pode ter dois valores:  $\delta_{ab} = +1$  se  $a = b$  e  $\delta_{ab} = 0$  se  $a \neq b$ .

Outros dois operadores, construídos a partir das matrizes de Pauli  $\sigma_+$  e  $\sigma_-$ . Tais operadores podem representar transições em sistemas quânticos, como os processos de absorção e emissão de fótons em problemas de dois estados [47]. Dessa forma, podemos associá-los aos operadores de Lindblad na equação mestra (veja a Seção 2.3), sendo expressas por

$$\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.7})$$

$$\sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

portanto, temos os operadores de levantamento (sinal positivo) e de rebaixamento (sinal negativo), como apresentado previamente no Cap. 2. As matrizes com índice, <sup>(1)</sup> ou <sup>(2)</sup>, são definidas por

$$\sigma_z^{(1)} = \sigma_z \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z^{(2)} = \sigma_0 \otimes \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.9})$$

$$\sigma_+^{(1)} = \sigma_+ \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_-^{(1)} = \sigma_- \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.10})$$

$$\sigma_+^{(2)} = \sigma_0 \otimes \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_-^{(2)} = \sigma_0 \otimes \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.11})$$

note que em todas as Eqs. (A.9), (A.10) e (A.11) todo produto tensorial com a identidade (operador  $\sigma_0 = I$ ) à direita pertence ao subsistema <sup>(1)</sup> e o produto tensorial com a identidade à esquerda corresponde ao subsistema <sup>(2)</sup>. Tal ordenamento tem origem na construção do próprio espaço vetorial  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ .

## A.2 MATRIZ DENSIDADE DE POPULAÇÃO

Nesta seção apresentaremos a forma matricial do operador densidade de população de cada *qubit* a partir de  $\rho(t) = \rho^{(1)}(t) \otimes \rho^{(2)}(t)$ . Determinando  $\rho(t)$  podemos extrair toda a informação do sistema quântico, seja ele isolado ou não. Os efeitos externos induzidos pelo ambiente são contabilizados ao calcular o valor esperado do observável de interesse, que de acordo com o formalismo de matriz de densidade é expresso como  $\langle O \rangle(t) = \text{Tr}[\rho(t)O]$ .

Para obter informação de somente uma parcela do sistema realizamos uma operação denominada de traço parcial, definida como  $\rho^{(a)} = Tr_b[\rho]$  ( $a, b = 1, 2$  ou  $2, 1$ ). O traço parcial  $Tr_2$  é o mapeamento do operador  $\rho(t)$  em um espaço vetorial composto pelos dois *qubits*  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  sobre a matriz densidade  $\rho^{(1)}$  em  $\mathcal{H}_1$  [46, 47]. Isso significa que estamos ignorando toda parte correspondente ao subsistema 2 para analisar o subsistema 1, sendo possível realizar o processo inverso, ou seja, ignorar 1 e determinar 2 fazendo  $Tr_1$ . Matematicamente tal relação é expressa por

$$\rho(t) = \sum_{i,j,k,l} c_{i,j,k,l} |a_i\rangle \langle a_j| \otimes |b_k\rangle \langle b_l|, \quad (\text{A.12})$$

$$\rho^{(1)}(t) = Tr_2[\rho(t)], \quad (\text{A.13})$$

$$= \sum_{i,j,k,l} c_{i,j,k,l} |a_i\rangle \langle a_j| \langle b_l | b_k \rangle, \quad (\text{A.14})$$

$$\rho^{(2)}(t) = Tr_1[\rho(t)], \quad (\text{A.15})$$

$$= \sum_{i,j,k,l} c_{i,j,k,l} |b_k\rangle \langle b_l| \langle a_j | a_i \rangle, \quad (\text{A.16})$$

onde utilizamos  $Tr_\alpha \left[ |\alpha''\rangle \langle \alpha'| \right] = \langle \alpha' | \alpha'' \rangle$ .

Vamos demonstrar a seguir como fazer a composição da matriz densidade do sistema em termos do produto tensorial dos subsistemas. Assim, escrevemos

$$\rho^{(1)}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{ee}^{(1)} & \rho_{eg}^{(1)} \\ \rho_{ge}^{(1)} & \rho_{gg}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

$$\rho^{(2)}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{ee}^{(2)} & \rho_{eg}^{(2)} \\ \rho_{ge}^{(2)} & \rho_{gg}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.18})$$

e

$$\rho(t) = \rho^{(1)}(t) \otimes \rho^{(2)}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{ee}^{(1)} \rho_{ee}^{(2)} & \rho_{ee}^{(1)} \rho_{eg}^{(2)} & \rho_{eg}^{(1)} \rho_{ee}^{(2)} & \rho_{eg}^{(1)} \rho_{eg}^{(2)} \\ \rho_{ee}^{(1)} \rho_{ge}^{(2)} & \rho_{ee}^{(1)} \rho_{gg}^{(2)} & \rho_{eg}^{(1)} \rho_{ge}^{(2)} & \rho_{eg}^{(1)} \rho_{gg}^{(2)} \\ \rho_{ge}^{(1)} \rho_{ee}^{(2)} & \rho_{ge}^{(1)} \rho_{eg}^{(2)} & \rho_{gg}^{(1)} \rho_{ee}^{(2)} & \rho_{gg}^{(1)} \rho_{eg}^{(2)} \\ \rho_{ge}^{(1)} \rho_{ge}^{(2)} & \rho_{ge}^{(1)} \rho_{gg}^{(2)} & \rho_{gg}^{(1)} \rho_{ge}^{(2)} & \rho_{gg}^{(1)} \rho_{gg}^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.19})$$

note que os elementos matriciais das Eqs. (A.17) e (A.18) foram misturados devido ao produto tensorial, conforme a Eq. (A.19). Para implementação numérica dessas expressões, é conveniente definirmos uma matriz densidade correspondente a um sistema de quatro níveis, expressa por

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.20})$$

Resolvendo a equação mestre para a matriz densidade (veja a Eq. (2.22)) obtemos todos os elementos matriciais da Eq. (A.20), e em seguida, determinamos as densidades de população de ambos os *qubits* tomando o traço parcial da matriz da Eq. (A.20).



Recuperamos a densidade de população do *qubit* 1 fazendo

$$\rho^{(1)}(t) = \text{Tr}_2[\rho(t)] = \begin{pmatrix} \rho_{11} + \rho_{22} & \rho_{13} + \rho_{24} \\ \rho_{31} + \rho_{42} & \rho_{33} + \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.21})$$

igualando com a Eq. (A.17), resulta em

$$\rho_{ee}^{(1)} = \rho_{11} + \rho_{22}, \quad (\text{A.22})$$

$$\rho_{eg}^{(1)} = \rho_{13} + \rho_{24}, \quad (\text{A.23})$$

$$\rho_{ge}^{(1)} = \rho_{31} + \rho_{42}, \quad (\text{A.24})$$

$$\rho_{gg}^{(1)} = \rho_{33} + \rho_{44}. \quad (\text{A.25})$$

De forma similar, calculando o traço parcial, temos a densidade de população do *qubit* 2,

$$\rho^{(2)}(t) = \text{Tr}_1[\rho(t)] = \begin{pmatrix} \rho_{11} + \rho_{33} & \rho_{12} + \rho_{34} \\ \rho_{21} + \rho_{43} & \rho_{22} + \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.26})$$

e comparando com a Eq. (A.18), temos

$$\rho_{ee}^{(2)} = \rho_{11} + \rho_{33}, \quad (\text{A.27})$$

$$\rho_{eg}^{(2)} = \rho_{12} + \rho_{34}, \quad (\text{A.28})$$

$$\rho_{ge}^{(2)} = \rho_{21} + \rho_{43}, \quad (\text{A.29})$$

$$\rho_{gg}^{(2)} = \rho_{22} + \rho_{44}. \quad (\text{A.30})$$

A razão para as Eqs. (A.21) e (A.26) apresentarem somas nos elementos matriciais torna-se simples ao considerarmos  $\rho(t)$  como uma soma de projetores<sup>3</sup>

$$\rho(t) = \rho_{11} |ee\rangle \langle ee| + \rho_{12} |ee\rangle \langle eg| + \dots + \rho_{44} |gg\rangle \langle gg|, \quad (\text{A.31})$$

fazendo o traço parcial do segundo *qubit* na Eq. (A.31), isto é, aplicando a Eq. (A.12), obtém-se

$$\begin{aligned} \rho^{(1)}(t) &= (\rho_{11} + \rho_{22}) |e\rangle \langle e| + (\rho_{13} + \rho_{24}) |e\rangle \langle g| \\ &+ (\rho_{31} + \rho_{42}) |g\rangle \langle e| + (\rho_{33} + \rho_{44}) |g\rangle \langle g|, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

que é idêntica ao resultado da Eq. (A.26). O processo é análogo para  $\rho^{(2)}(t)$ , portanto, não haverá demonstração.

<sup>3</sup> Expressões obtidas a partir das bases  $|e\rangle = (1 \ 0)^T$  e  $|g\rangle = (0 \ 1)^T$ .

### A.3 PARAMETRIZAÇÃO DO CAMPO DE CONTROLE

Em um sistema bipartido, que é justamente o caso de dois *qubits* acoplados, temos que preparar o campo com algum tipo de parametrização para controlar a dinâmica do sistema. Para tal, novamente aplicamos as matrizes de Pauli devido a propriedade de representar matrizes de rotação, e segundo o nosso propósito, representará uma dada polarização do campo.

#### A.3.1 Campo Polarizado em $\sigma_x$

$$\begin{aligned} H_{c_1} &= V_1 \otimes \sigma_x, \\ &= -\Omega_{R_1} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi_1} \\ 0 & 0 & e^{i\varphi_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi_1} & 0 & 0 \\ e^{-i\varphi_1} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

$$\begin{aligned} H_{c_2} &= \sigma_x \otimes V_2, \\ &= -\Omega_{R_2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi_2} \\ 0 & 0 & e^{-i\varphi_2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_2} & 0 & 0 \\ e^{-i\varphi_2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Se  $\Omega_R = \Omega_{R_1} = \Omega_{R_2}$  e  $\varphi = \varphi_1 = \varphi_2$ , temos

$$\begin{aligned} H_c &= H_{c_1} + H_{c_2}, \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -2\Omega_R e^{i\varphi} \\ 0 & 0 & -2\Omega_R \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & -2\Omega_R \cos(\varphi) & 0 & 0 \\ -2\Omega_R e^{-i\varphi} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

#### A.3.2 Campo Polarizado em $\sigma_y$

$$\begin{aligned} H_{c_1} &= V_1 \otimes \sigma_y, \\ &= -\Omega_{R_1} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i e^{i\varphi_1} \\ 0 & 0 & i e^{i\varphi_1} & 0 \\ 0 & -i e^{-i\varphi_1} & 0 & 0 \\ i e^{-i\varphi_1} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

$$H_{c_2} = \sigma_y \otimes V_2, \quad (\text{A.37})$$

$$= -\Omega_{R_2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i e^{i\varphi_2} \\ 0 & 0 & i e^{-i\varphi_1} & 0 \\ 0 & -i e^{i\varphi_1} & 0 & 0 \\ i e^{-i\varphi_1} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.38})$$

Se  $\Omega_R = \Omega_{R_1} = \Omega_{R_2}$  e  $\varphi = \varphi_1 = \varphi_2$ , temos

$$H_c = H_{c_1} + H_{c_2},$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -2i\Omega_R e^{i\varphi} \\ 0 & 0 & -2\Omega_R \sin(\varphi) & 0 \\ 0 & -2\Omega_R \sin(\varphi) & 0 & 0 \\ -2i\Omega_R e^{-i\varphi} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.39})$$

### A.3.3 Campo Polarizado em $\sigma_z$

$$H_{c_1} = V_1 \otimes \sigma_z,$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\Omega_{R_1} e^{i\varphi_1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Omega_{R_1} e^{i\varphi_1} \\ -\Omega_{R_1} e^{-i\varphi_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Omega_{R_1} e^{-i\varphi_1} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.40})$$

Sobre o qubit dois

$$H_{c_2} = \sigma_z \otimes V_2,$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_{R_2} e^{i\varphi_2} & 0 & 0 \\ -\Omega_{R_2} e^{-i\varphi_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Omega_{R_2} e^{i\varphi_2} \\ 0 & 0 & \Omega_{R_2} e^{-i\varphi_2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.41})$$

Considerando a soma dos campos de controle, temos

$$H_c = H_{c_1} + H_{c_2},$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_{R_2} e^{i\varphi_2} & -\Omega_{R_1} e^{i\varphi_1} & 0 \\ -\Omega_{R_2} e^{-i\varphi_2} & 0 & 0 & \Omega_{R_1} e^{i\varphi_1} \\ -\Omega_{R_1} e^{-i\varphi_1} & 0 & 0 & \Omega_{R_2} e^{i\varphi_2} \\ 0 & \Omega_{R_1} e^{-i\varphi_1} & \Omega_{R_2} e^{-i\varphi_2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.42})$$

## A.4 OPERADORES DE KRAUS E APROXIMAÇÃO DE MARKOV E EQUAÇÃO DE LINDBLAD

Já vimos nas seções anteriores a definição da matriz densidade  $\rho$  e como escrevê-la para sistemas bipartidos. A seguir, veremos como determinar as equações dinâmicas capazes de descrever o comportamento de um sistema que interaje com um ambiente markoviano (ou sem memória) [47]. Para tal, utilizamos a noção de operação linear que preserva o traço, isto é, uma operação que mapeia uma matriz densidade em outra matriz densidade garantindo a sua unitariedade, por exemplo. Denominamos essa transformação linear especial de *mapa* ou *canal quântico* [47].

O mapa mais geral tem a forma

$$\rho' = \mathcal{E}(\rho) = \sum_k M_k \rho M_k^\dagger, \quad (\text{A.43})$$

sendo  $M_k$  um conjunto de operadores sob a condição  $\sum_k M_k^\dagger M_k = 1$ , amplamente conhecidos como Operadores de Kraus [172].

### A.4.1 Emissão Espontânea - Amplitude damping

Como exemplo, considere um átomo de dois níveis interagindo com o campo eletromagnético do vácuo. Considere, portanto, as matrizes

$$M_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\beta} \end{pmatrix}, \quad M_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\beta} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.44})$$

com  $0 \leq \beta \leq 1$  e assumindo as bases  $|0\rangle = (1 \ 0)^T$  e  $|1\rangle = (0 \ 1)^T$ . Verificando a condição  $M_0^\dagger M_0 + M_1^\dagger M_1 = 1$ , temos

$$\begin{aligned} \sum_k M_k^\dagger M_k &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\beta} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{\beta} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\beta} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1-\beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

como esperado. Agora, vamos assumir uma matriz densidade genérica  $\rho$  e a atuação do canal quântico  $\mathcal{E}$ , obtendo

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{12}^* & \rho_{22} \end{pmatrix}, \quad \rho' = \mathcal{E}(\rho) = \begin{pmatrix} \beta + \rho_{11}(1-\beta) & \rho_{12}\sqrt{1-\beta} \\ \rho_{12}^*\sqrt{1-\beta} & \rho_{22}(1-\beta) \end{pmatrix} \quad (\text{A.46})$$

teremos duas situações possíveis: se eventualmente  $\beta = 0$  o canal simplesmente não altera a matriz densidade com  $\rho = \rho'$ , caso contrário, se  $\beta = 1$  então

$$\rho' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.47})$$

que é simplesmente o estado  $|0\rangle\langle 0|$ . Em suma, o canal *amplitude damping* atua de modo que independente do estado inicial o mapa sempre tenderá ao nível de menor energia. Tal efeito corresponde diretamente ao fenômeno de emissão espontânea. Note que os termos fora da diagonal foram destruídos no processo, com  $\rho'_{12} \rightarrow \rho_{12}\sqrt{1 - (\beta = 1)} = 0$ , que na prática é a destruição das coerências do estado  $\rho$ . Além disso, as populações  $\rho'_{11} \rightarrow \beta + \rho_{11}(1 - \beta)$  e  $\rho'_{22} \rightarrow \rho_{22}(1 - \beta)$  também são amortecidas à medida que  $\beta$  aumenta.

#### A.4.2 Dedução do Teorema de Lindblad

A partir dos operadores de Kraus podemos descrever o mapa de um estado inicial arbitrário  $\rho_0$  para um estado final qualquer  $\rho_f$ . No entanto, estamos interessados em prever a dinâmica do estado  $\rho$  em detalhes, para cada instante de tempo ao longo de toda a sua evolução. Para tal, com a finalidade de analisar a atuação do ambiente sobre o sistema físico, empregamos a Equação de Lindblad (ou equação mestra) a fim de determinar  $\rho(t)$ . Apresentaremos, a seguir, uma dedução simplificada dessa expressão a partir das notas de aulas do professor Gabriel T. Landi [173] e fundamentado teoricamente em termos da obra de Breuer e Petruccione [47].

Considerando a propriedade do semigrupo, que nos permite segmentar um mapa de  $t_1$  até o instante  $t_N$  na forma  $\mathcal{E}(t_1)\mathcal{E}(t_2)\dots\mathcal{E}(t_N)$ , é possível evoluir um estado quântico em múltiplos passos infinitesimais como se o mapa tivesse realizado a operação  $\mathcal{E}(t_1+t_2+\dots+t_N)$ . Logo, podemos escrever o estado  $\rho$  como

$$\rho(t + \Delta t) = \sum_k M_k(\Delta t) \rho(t) M_k^\dagger(\Delta t), \quad (\text{A.48})$$

ressaltando que os operadores  $M_k(\Delta t)$  são necessariamente independentes do tempo. Por trás desse procedimento buscamos uma relação do tipo  $d\rho/dt = \mathcal{L}(\rho)$ , ou uma forma diferencial equivalente a

$$\rho(t + \Delta t) \approx \rho(t) + \Delta t \mathcal{L}(\rho(t)), \quad (\text{A.49})$$

Para construir tal operação, suponha as seguintes condições: (i) se  $\Delta t = 0$ , então não há dinâmica, implicando em  $\sum_k M_k(0)\rho M_k^\dagger = \rho$ . (ii) assumindo termos de primeira ordem em  $\Delta t$ , é esperado que  $M_k(\Delta t) = \sqrt{\Delta t} L_k$ . Propõe-se, assim, duas parametrizações

$$M_0 = I + G\Delta t, \quad (\text{A.50})$$

$$M_k = L_k \sqrt{\gamma_k \Delta t}, \quad \text{para } k \neq 0, \quad (\text{A.51})$$

sendo  $I$  uma matriz identidade e tanto  $G$  quanto  $L_k$  operadores quaisquer. Introduzimos a constante  $\gamma_k \geq 0$  para fins de adimensionalização (neste momento). Devemos avançar nos cálculos que seguem impondo uma condição de normalização, acarretando em

$$I = \sum_k M_k^\dagger M_k = M_0^\dagger M_0 + \sum_{k \neq 0} M_k^\dagger M_k, \quad (\text{A.52})$$

e substituindo as Eqs. (A.51) e (A.51) na expressão anterior, obtemos

$$\sum_k M_k^\dagger M_k = (I + G^\dagger \Delta t)(I + G \Delta t) + \Delta t \sum_{k \neq 0} \gamma_k L_k^\dagger L_k, \quad (\text{A.53})$$

$$= I + (G + G^\dagger) \Delta t + \Delta t \sum_{k \neq 0} \gamma_k L_k^\dagger L_k + O(\Delta t^2), \quad (\text{A.54})$$

onde todo termo de ordem maior ou igual a  $O(\Delta t^2)$  será negligenciado a partir desse ponto. Não conseguiremos avançar sem conhecer a forma de  $G$ . Logo, o parametrizamos como

$$G = K - iH \quad K = \sum_{k \neq 0} -\frac{1}{2} \gamma_k L_k^\dagger L_k, \quad (\text{A.55})$$

com  $K$  e  $H$  hermitianos. Combinando ambas as relações, obtém-se

$$G = -\left(iH + \frac{1}{2} \gamma_k L_k^\dagger L_k\right), \quad (\text{A.56})$$

Finalmente é possível construir os operadores  $M_0$  e  $M_k$ , ou mais precisamente tem-se  $M_0 = I - \Delta t(iH + \frac{1}{2} \gamma_k L_k^\dagger L_k)$ . Substituindo tais relações na Eq. (A.48) resulta em

$$\rho(t + \Delta t) = (I + G^\dagger \Delta t) \rho(t) (I + G \Delta t) + \Delta t \sum_{k \neq 0} \gamma_k L_k^\dagger L_k, \quad (\text{A.57})$$

com algumas manipulações algébricas,

$$\rho(t + \Delta t) = \rho(t) + \Delta t \left( G \rho(t) + \rho(t) G^\dagger \right) + \Delta t \sum_{k \neq 0} \gamma_k L_k^\dagger L_k, \quad (\text{A.58})$$

$$= \rho(t) - i \Delta t [H, \rho(t)] + \Delta t \sum_{k \neq 0} \gamma_k \left[ L_k \rho(t) L_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ L_k^\dagger L_k, \rho(t) \right\} \right], \quad (\text{A.59})$$

e impondo o limite de que os passos são infinitesimais  $\Delta t \rightarrow 0$ , obtém-se

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\rho(t + \Delta t) - \rho(t)}{\Delta t} \approx \frac{d\rho}{dt}, \quad (\text{A.60})$$

que é a expressão desejada a menos de um diferencial exato, tal como

$$\frac{d\rho}{dt} = -i [H, \rho] + \sum_{k \neq 0} \gamma_k \left[ L_k \rho L_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ L_k^\dagger L_k, \rho \right\} \right], \quad (\text{A.61})$$

que é definitivamente a equação mestra, ou de modo mais elegante, Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad (GKSL). Suprimimos o  $\hbar$  nos cálculos por simplicidade. Salientamos que os operadores  $L_k$  são matrizes arbitrárias, ou seja, a relação é válida para todo sistema

quântico dentro da aproximação markoviana. Se qualquer equação satisfizer tal estrutura, dizemos que sua dinâmica é do tipo *CPTP* - *Completely Positive Trace-Preserving*, ou completamente positivo com preservação de traço.

Outra análise relevante é sobre a física por trás dos operadores de Kraus. Note que  $M_k$  induz transições abruptas no sistema com certa probabilidade  $\rho \longleftarrow M_k \rho M_k^\dagger$ . Em outras palavras, para um dado intervalo de tempo  $\Delta t$  há uma probabilidade considerável do sistema permanecer inalterado em seu estado quântico (devido a  $M_0$ ), e uma probabilidade pequena de ocorrer transições no sistema (devido a  $M_k$ ). Tal propriedade dá nome aos  $L_k$  que apresentamos anteriormente, simplesmente como *operadores de salto* [173].

## B SOLUÇÕES CONHECIDAS DE POTENCIAIS

*Alguns potenciais são de uso recorrente em aplicações da mecânica quântica. Dois exemplos serão apresentados: o potencial morse e o oscilador harmônico quântico. Após expor as suas principais relações constitutivas, determinaremos certos operadores úteis para o desenvolvimento desta tese.*

### B.1 POTENCIAL MORSE DE UMA MOLÉCULA DIATÔMICA

Existem diferentes maneiras de descrever o comportamento vibracional das moléculas diatômicas. A primeira delas depende da resolução do Hamiltoniano para um sistema de muitos corpos (elétrons e prótons), sendo naturalmente a mais complexa [1]. A segunda forma envolve um procedimento de simplificação útil na representação da interação de qualquer molécula (via equação de Schrödinger), que é obtida através da aproximação de Born-Oppenheimer [165]. A consideração fundamental desse procedimento é separar os movimentos eletrônicos do nuclear, dada a grande diferença de massa, e também de velocidades, entre tais quantidades [174]. Isso implica na separação da função de onda total em um simples produto entre as funções de onda eletrônica e nuclear, cuja solução pode ser obtida separadamente com excelente precisão [165].

Neste trabalho não estamos interessados nas transições eletrônicas da molécula diatômica, somente nas variações da distância de sua componente nuclear. Portanto, apresentaremos exclusivamente as expressões que descrevem as oscilações dos átomos constituintes de tal estrutura. Um potencial empírico que tem sido um excelente modelo para tais variações de distância intermolecular é o Potencial Morse [139]. Esse potencial foi baseado em dados espectroscópicos vibracionais, denotando um comportamento anarmônico das oscilações moleculares. Acima de tudo, o potencial Morse é independente do tipo de formação molecular ou ligação atômica, sendo um modelo mais genérico possível para as oscilações anarmônicas associadas às moléculas diatômicas [175, 176]. O oscilador de Morse é definido por

$$V(r) = V_0 (e^{-2\alpha_0(r-r_0)} - 2e^{-\alpha_0(r-r_0)}), \quad (\text{B.1})$$

cujo Hamiltoniano total pode expresso como

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_0 (e^{-2\alpha_0(r-r_0)} - 2e^{-\alpha_0(r-r_0)}), \quad (\text{B.2})$$



onde  $V_0$  representa a energia de dissociação,  $\alpha_0$  é equivalente a constante elástica em uma mola e  $r_0$  a distância de equilíbrio intermolecular. Utilizamos as soluções propostas por Morse para os autovalores e autofunções, tais que

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_h \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2\omega_h^2}{4V_0} \left( n + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (\text{B.3})$$

$$\psi_n(r) = \left( \frac{\alpha_0}{N_{nn}} \right)^{1/2} e^{-\lambda e^{-\alpha_0(r-r_0)}} \left[ 2\lambda e^{-\alpha_0(r-r_0)} \right]^{\beta_n} \mathcal{L}_n^{2\beta_n} \left( 2\lambda e^{-\alpha_0(r-r_0)} \right). \quad (\text{B.4})$$

Aqui  $\beta_n = \lambda - n - \frac{1}{2}$  e  $\lambda = (2\mu_0 V_0 / \alpha_0^2 \hbar^2)^{1/2}$ ,  $N_{nn} = \sum_{s=0}^n \Gamma[2\beta + s] / \Gamma[s + 1]$  é a constante de normalização,  $\omega_h = (2\alpha_0^2 V_0 / m_\mu)^{1/2}$  é a frequência harmônica do oscilador,  $n = 0, 1, \dots, N$  os níveis vibracionais,  $m_\mu$  a massa reduzida dos átomos que compõem a molécula e  $\mathcal{L}_m^k(z)$  a função que representa os polinômios associados de Laguerre [177].

## B.2 O OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

O oscilador harmônico também pode descrever oscilações moleculares, mas geralmente sua validade é limitada somente para baixas energias. Não estamos interessados em nos aprofundar nas mais variadas aplicações desse modelo teórico, somente apresentar o Hamiltoniano total e suas principais equações associadas, tais como os autovalores e autofunções correspondentes. Logo, o potencial do oscilador harmônico pode ser definido como

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2, \quad (\text{B.5})$$

cujo Hamiltoniano total é dado por

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2, \quad (\text{B.6})$$

no qual  $\omega_x$  representa a frequência do oscilador e  $m$  a massa da partícula.

Como mencionado logo acima, a diagonalização do Hamiltoniano da Eq. (B.6) tem como resultado os autovalores e autofunções expressos como

$$\varepsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_x, \quad (\text{B.7})$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left( \frac{m\omega_x}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left( -\frac{m\omega_x x^2}{2\hbar} \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega_x}{\hbar}} x \right)^{1/4}, \quad (\text{B.8})$$

sendo  $H_n(u)$  os polinômios de Hermite e  $n = 0, 1, 2, \dots$  [21].

### B.2.1 O Valor Esperado da Posição

O valor esperado de um observável é um dos cálculos fundamentais em processos estatísticos em mecânica quântica [109, 21]. O procedimento é simples, pois basta conhecermos as energias do sistema e as respectivas bases do Hamiltoniano não perturbado. Nosso

propósito é desenvolver uma expressão geral para o valor esperado da posição, que em conformidade com a seção anterior, descreverá as variações da distância entre os átomos constituintes de uma molécula diatômica.

Considere um Hamiltoniano com um potencial arbitrário em função da distância radial  $V(r)$ , e independente do tempo, devidamente diagonalizado. Assumindo a solução na forma  $H_0 | \varepsilon_n \rangle = \varepsilon_n | \varepsilon_n \rangle$ , escrevemos um vetor de estado dependente do tempo ao atuarmos o operador de evolução temporal sobre o estado inicial  $|\psi(t)\rangle = \exp[-iH_0 t/\hbar] |\psi_0\rangle$ . Se  $|\psi_0\rangle$  for um estado de superposição das bases de  $H_0$ , podemos definir o valor esperado de um observável no tempo como  $\langle \mathcal{O} \rangle(t) = \langle \psi(t) | \mathcal{O} | \psi(t) \rangle$ .

Supondo que estamos interessados em algum observável arbitrário em termos da distância  $r$ . Assim, escrevemos na forma

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle(t) &= \langle \psi(t) | \mathcal{O} | \psi(t) \rangle, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle r | \psi(t) \rangle^* o(r) \langle r | \psi(t) \rangle dr, \quad \text{se } o \rightarrow o(r) \\ &= \sum_n \sum_m c_n^* c_m e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_m - \varepsilon_n)t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(r) o(r) \psi_m(r) dr \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

sendo ' $o(r)$ ' o autovalor do observável na base de posição. Também aplicamos a relação de completude no espaço de posições  $\mathbb{1} = \int |r\rangle \langle r| dr$  e a função de onda do estado inicial dada pela superposição  $|\psi_0\rangle = \sum_m c_m \psi_m(r)$  com  $\psi_m(r) = \langle r | \varepsilon_m \rangle$ .

A partir da Eq. (B.9) tiramos duas quantidades de grande interesse para o presente estudo. A primeira envolve os elementos de matriz do observável  $r_{nm}$ , sendo

$$\langle \varepsilon_n | r | \varepsilon_m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(r) r \psi_m(r) dr, \quad (\text{B.10})$$

e a outra quantidade são os elementos de matriz do momento de dipolo elétrico  $\mu_{nm}$ ,

$$\langle \varepsilon_n | \mu(r) | \varepsilon_m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(r) \mu(r) \psi_m(r) dr, \quad (\text{B.11})$$

Utilizando as funções de base apropriadas, tais quantidades são completamente determinadas.

## B.2.2 Elementos de Matriz do Operador Momento de Dipolo

O cálculo analítico de tais elementos de matriz é relativamente simples, mas não estamos interessados em incluí-los neste trabalho. O procedimento envolve integrar as Eqs. (B.10) e (B.11) utilizando as autofunções apropriadas, por exemplo, para o caso do sistema modelado pelo potencial Morse empregamos a Eq. (B.4), caso contrário, se estivermos lidando com o oscilador harmônico, aplicamos a Eq. (B.8). Outra alternativa seria calcular tais elementos de matriz com os operadores de criação e destruição, facilitando consideravelmente o procedimento.

Por exemplo, a função  $\vec{\mu} = (x^2/2 - \gamma x)\hat{x}$  é uma aproximação teórica que descreve o operador momento de dipolo elétrico para o oscilador harmônico quântico. Tal modelo já foi abordado nos trabalhos [23] e [25]. Apresentaremos ao longo do texto a função do momento de dipolo associado a molécula de interesse quando modelada pelo potencial Morse no capítulo correspondente.

### B.3 POTENCIAL DE CONTROLE NA FORMA DIPOLAR

Primeiramente, considere o Hamiltoniano genérico relacionando o sistema não perturbado e o potencial de interação

$$H^{(\varepsilon)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 + v_{11} & v_{12} e^{-i\phi_{12}} & v_{13} e^{-i\phi_{13}} & \dots & v_{1N} e^{-i\phi_{1N}} \\ v_{12} e^{i\phi_{12}} & \varepsilon_2 + v_{22} & v_{23} e^{-i\phi_{23}} & \dots & v_{2N} e^{-i\phi_{2N}} \\ v_{13} e^{i\phi_{13}} & v_{23} e^{i\phi_{23}} & \varepsilon_3 + v_{33} & \dots & v_{3N} e^{-i\phi_{3N}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ v_{1N} e^{i\phi_{1N}} & v_{2N} e^{i\phi_{2N}} & v_{3N} e^{i\phi_{3N}} & \dots & \varepsilon_N + v_{NN} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.12})$$

Para associarmos um campo de controle usual com o método paramétrico inverso por partes, seguiremos os mesmos passos desenvolvidos em trabalhos anteriores [2, 40]. Sendo assim, considere um Hamiltoniano que descreva a interação de um potencial externo com um sistema quântico de interesse  $H^{(\varepsilon)} = H_0^{(\varepsilon)} + q r F$ , cujos elementos de matriz são dados por

$$\langle \varepsilon_n | H^{(\varepsilon)} | \varepsilon_m \rangle = \varepsilon_n \delta_{nm} + q \langle \varepsilon_n | r | \varepsilon_m \rangle F \quad \text{com } (n, m = 1, 2, \dots, N), \quad (\text{B.13})$$

onde empregamos a função delta de Kronecker  $\delta_{nm}$ . O termo que promove o acoplamento com o sistema é  $q \langle \varepsilon_n | r | \varepsilon_m \rangle$ , claramente o operador momento de dipolo elétrico da transição, e pode ser representado por um número complexo  $D_{nm}$ , tal que

$$D_{nm} = q \langle \varepsilon_n | r | \varepsilon_m \rangle F = \mu_{nm} e^{-i\xi_{nm}} \quad \text{e} \quad F = E e^{-i\phi_E}, \quad (\text{B.14})$$

das relações anteriores chegamos na seguinte igualdade

$$\langle \varepsilon_n | H^{(\varepsilon)} | \varepsilon_m \rangle = \varepsilon_n \delta_{nm} + \mu_{nm} E e^{-i(\xi_{nm} + \phi_E)}, \quad (\text{B.15})$$

onde redefinimos novas expressões

$$v_{nm} = \mu_{nm} E \quad \text{e} \quad \phi_{nm} = \xi_{nm} + \phi_E, \quad (\text{B.16})$$

justificando, portanto, o forma pela qual escrevemos o Hamiltoniano da Eq. (B.12),

$$H_{nm}^{(\varepsilon)} = \varepsilon_n \delta_{nm} + v_{nm} e^{-i\phi_{nm}}. \quad (\text{B.17})$$

com a generalidade de que  $v_{nn} \neq 0$ . Aqui estamos considerando as expressões mais geréricas possíveis para o problema de controle quântico na forma dipolar, entretanto, em inúmeros sistemas temos  $\xi_{nm} = 0$ , além de existirem determinadas transições proibidas tais que  $\mu_{ij} = 0$ .

## C DETALHAMENTO TEÓRICO DO MÉTODO MISTO

*Apresentaremos neste apêndice os mais variados procedimentos teóricos empregados no aprimoramento do método paramétrico misto. Demonstraremos o processo de diagonalização de Hamiltonianos independentes do tempo de ordem  $2 \times 2$ , expressões algébricas de passos intermediários expostos ao longo da tese e a solução do sistema de equações oriundas do hiperespaço bidimensional efetivo.*

### C.1 DIAGONALIZAÇÃO DE MATRIZES $2 \times 2$

A finalidade desta seção é demonstrar a diagonalização de  $H^{(2)}$  via decomposição da matriz da Eq. (C.2) em duas partes, utilizando um procedimento semelhante ao apresentado no Complemento B<sub>IV</sub> do Cap. III do livro Cohen - Tannoudji [109]. Para calcularmos os autovetores  $\{|E_1\rangle, |E_2\rangle\}$  e os autovalores  $E_1, E_2$  correspondentes, fazemos

$$H^{(2)} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle, \quad (\text{C.1})$$

e na forma matricial,

$$H^{(2)} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & u e^{-i\phi} \\ u e^{i\phi} & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} u \geq 0 \\ 0 \leq \phi < 2\pi \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

aplicaremos o conceito de meia-soma e meia-diferença para expressarmos  $H^{(2)} = H_\alpha + H_\beta$ , dessa forma,

$$H^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\lambda_2 + \lambda_1) & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(\lambda_2 + \lambda_1) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) & u e^{-i\phi} \\ u e^{i\phi} & \frac{1}{2}(\lambda_2 - \lambda_1) \end{pmatrix}, \quad (\text{C.3})$$

por conveniência, utilizaremos duas novas variáveis nas próximas manipulações, a saber:  $\lambda_- = (\lambda_2 - \lambda_1)$  e  $\lambda_+ = (\lambda_2 + \lambda_1)$ .

#### C.1.1 Autovalores de $H^{(2)}$

Sabemos de antemão que os autovalores da matriz  $H_\alpha$  são  $\alpha_{1,2} = \lambda_+/2$ , onde  $H_\alpha |E_n\rangle = \alpha_n |E_n\rangle$ ,

$$H_\alpha = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\lambda_+ & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\lambda_+ \end{pmatrix}, \quad (\text{C.4})$$

e na matriz  $H_\beta$  colocaremos em evidência o termo  $\lambda_-/2$ , tornando-se

$$H_\beta = \frac{\lambda_-}{2} \begin{pmatrix} -1 & -\left(\frac{2u}{\lambda_-}\right) e^{-i\phi} \\ -\left(\frac{2u}{\lambda_-}\right) e^{i\phi} & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.5})$$

Definiremos um novo parâmetro que será importante na diagonalização, expresso por  $\tan(\theta) = -2u/\lambda_-$ . A equação de autovalor para  $H_\beta$ , de acordo com a equação  $H_\beta |E_n\rangle = \beta_n |E_n\rangle$ , é dada pelo determinante

$$\det \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\lambda_- - \beta & \frac{1}{2}\lambda_- \tan(\theta) e^{-i\phi} \\ \frac{1}{2}\lambda_- \tan(\theta) e^{i\phi} & \frac{1}{2}\lambda_- - \beta \end{bmatrix} = 0, \quad (\text{C.6})$$

e assim, temos a equação secular

$$\beta^2 - \frac{\lambda_-^2 (1 + \tan^2(\theta))}{4} = 0, \quad (\text{C.7})$$

cujas raízes fornecem os autovalores  $\beta_{1,2} = \pm(\lambda_-/2)\sqrt{1 + \tan^2(\theta)}$ . O resultado final de  $E_n$  é trivialmente obtido pela soma de  $\alpha_n$  com  $\beta_n$ , pois da Eq. (C.1) temos

$$H^{(2)} |E_n\rangle = (H_\alpha + H_\beta) |E_n\rangle, \quad (\text{C.8})$$

$$= (\alpha_n + \beta_n) |E_n\rangle, \quad (\text{C.9})$$

$$= E_n |E_n\rangle, \quad (\text{C.10})$$

tais expressões são válidas devido a relação de comutação entre os operadores  $[H^{(2)}, H_\alpha] = [H^{(2)}, H_\beta] = 0$ , gerando um conjunto ortonormal de autovetores simultâneos para  $H_\alpha$  e  $H_\beta$ . E assim, a fórmula final dos autovalores de  $H^{(2)}$  para  $(n = 1, 2)$ , é

$$E_n = \frac{1}{2}(\lambda_2 + \lambda_1) + \frac{1}{2}(-1)^n \sqrt{4u^2 + (\lambda_2 - \lambda_1)^2}, \quad (\text{C.11})$$

### C.1.2 Autovetores de $H^{(2)}$

Metade do problema foi resolvido nos parágrafos anteriores. Apresentaremos nesta seção o cálculo dos autovetores normalizados de  $H^{(2)}$ , a seguir,

$$|E_1\rangle = A_1 |e_1\rangle + B_1 |e_2\rangle, \quad (\text{C.12})$$

$$|E_2\rangle = A_2 |e_1\rangle + B_2 |e_2\rangle. \quad (\text{C.13})$$

Os parâmetros  $A_n$  e  $B_n$  são os coeficientes de expansão de  $\{|E_n\rangle\}$ . Tais coeficientes podem ser determinados através das Eqs. (C.1) e (C.11), isto é,

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & u e^{-i\phi} \\ u e^{i\phi} & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_n & 0 \\ 0 & E_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}, \quad (\text{C.14})$$

onde ( $n = 1, 2$ ). As matrizes apresentadas na Eq. (C.14) formam um sistema de equações lineares com duas variáveis a serem determinadas. Como buscamos autoestados normalizados, utilizaremos a condição  $|A_n|^2 + |B_n|^2 = 1$  que é válida para os dois autoestados de  $H^{(2)}$ . Sendo assim,

$$\begin{cases} -(E_n - \lambda_1)A_n + u e^{-i\phi} B_n = 0 \\ u e^{i\phi} A_n - (E_n - \lambda_2)B_n = 0 \end{cases}, \quad (\text{C.15})$$

escolhemos a primeira expressão do sistema disposto na Eq. (C.15) para resolver em termos do coeficiente  $A_n$

$$A_n = \frac{u e^{-i\phi}}{E_n - \lambda_1} B_n, \quad (\text{C.16})$$

$$|A_n|^2 + |B_n|^2 = 1, \quad (\text{C.17})$$

agora sabemos que  $A_n$  depende linearmente de  $B_n$ . Agora, demonstraremos os passos principais que seguimos para alcançar uma expressão final conveniente. Utilizaremos dois termos que foram definidos na seção anterior, sendo eles,  $\lambda_-$  e  $\lambda_+$ .

Primeiramente, substituiremos a Eq. (C.16) na Eq. (C.17) a fim de obter o coeficiente  $B_n$ , no qual

$$\left| \frac{u e^{-i\phi}}{E_n - \lambda_1} B_n \right|^2 + |B_n|^2 = 1, \quad (\text{C.18})$$

$$|B_n|^2 \left( \frac{u^2 + (E_n - \lambda_1)^2}{(E_n - \lambda_1)^2} \right) = 1. \quad (\text{C.19})$$

a seguir, um conjunto de expressões úteis na dedução do coeficiente  $B_n$ :

$$G = \sqrt{4u^2 + \lambda_-^2}, \quad (\text{C.20})$$

$$G^2 = 4u^2 + \lambda_-^2, \quad (\text{C.21})$$

$$E_n - \lambda_1 = \frac{\lambda_-}{2} + \frac{(-1)^n G}{2}, \quad (\text{C.22})$$

usando tais variáveis e isolando  $B_n$ , temos

$$B_n = \frac{\frac{\lambda_-}{2} + \frac{(-1)^n G}{2}}{\sqrt{u^2 + \frac{\lambda_-}{2} + \frac{(-1)^n G}{2}}}, \quad (\text{C.23})$$

vamos racionalizar a Eq. (C.23) multiplicando e dividindo pelo seu próprio denominador, obtendo

$$B_n = \frac{\left( \frac{\lambda_- + (-1)^n G}{2} \right) \sqrt{u^2 + \left( \frac{\lambda_- + (-1)^n G}{2} \right)^2}}{u^2 + \left( \frac{\lambda_- + (-1)^n G}{2} \right)^2}, \quad (\text{C.24})$$

colocando todos os termos dentro da raiz e abrindo os produtos notáveis, chegamos em

$$B_n = \sqrt{\frac{\frac{1}{4}(\lambda_-^2 + 2(-1)^n \lambda_- G + G^2)}{\frac{1}{4}(4u^2 + \lambda_-^2 + 2(-1)^n \lambda_- G + G^2)}}, \quad (\text{C.25})$$

note que no argumento do denominador da Eq. (C.25) surge o termo  $G^2 = 4u^2 + \lambda_-^2$ . Rearranjando as expressões e colocando  $G^2$  em evidência, temos

$$B_n = \sqrt{\frac{1}{2} \frac{G^2 \left(1 + \frac{2(-1)^n \lambda_-}{G} + \frac{\lambda_-^2}{G^2}\right)}{G^2 \left(1 + \frac{(-1)^n \lambda_-}{G}\right)}}, \quad (\text{C.26})$$

o termo que está no numerador da Eq. (C.26) pode ser escrito visando simplificar o denominador, isto é,

$$B_n = \sqrt{\frac{\left(1 + \frac{(-1)^n \lambda_-}{G}\right) \left(1 + \frac{(-1)^n \lambda_-}{G}\right)}{2 \left(1 + \frac{(-1)^n \lambda_-}{G}\right)}}, \quad (\text{C.27})$$

retornando para as quantidades originais (exceto  $G$ ), isto é,  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$ , obtemos

$$B_n = \sqrt{\frac{1 + (-1)^n (\lambda_2 - \lambda_1)/G}{2}}. \quad (\text{C.28})$$

Para determinar  $A_n$ , substituímos a Eq. (C.28) na Eq. (C.16), tornando-se

$$A_n = \frac{u e^{-i\phi}}{\left(\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2} + \frac{(-1)^n G}{2}\right)} \sqrt{\frac{1 + (-1)^n (\lambda_2 - \lambda_1)/G}{2}}, \quad (\text{C.29})$$

agora, se colocarmos  $(-1)^n G$  em evidência no denominador de  $A_n$  e racionalizarmos essa expressão, chegaremos em

$$A_n = \frac{u e^{-i\phi}}{\left(\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2} + \frac{(-1)^n G}{2}\right)} \sqrt{\frac{1 + (-1)^n (\lambda_2 - \lambda_1)/G}{2}}, \quad (\text{C.30})$$

para tornar o termo entre parênteses do numerador idêntico ao denominador (aquele fora da raiz), basta multiplicar e dividir a Eq. (C.30) por  $(-1)^n$ , atentando-se que  $(-1)^n (-1)^n = 1$ , sendo

$$A_n = \frac{u e^{-i\phi} \left(1 + \frac{(-1)^n (\lambda_2 - \lambda_1)}{G}\right) (-1)^n}{(-1)^n G \left(1 + \frac{(-1)^n (\lambda_2 - \lambda_1)}{G}\right) (-1)^n \sqrt{2} \sqrt{1 + \frac{(-1)^n (\lambda_2 - \lambda_1)}{G}}}, \quad (\text{C.31})$$

finalmente, sabendo que  $2/\sqrt{2} = \sqrt{2}$ , chegamos na relação final que procurávamos

$$A_n = \frac{(-1)^n \sqrt{2} u e^{-i\phi}}{G \sqrt{1 + \frac{(-1)^n (\lambda_2 - \lambda_1)}{G}}}. \quad (\text{C.32})$$

Os coeficientes de expansão  $A_n$  e  $B_n$  dos autoestados de  $H^{(2)}$ , bem como os autovalores correspondentes, são idênticos aos encontrados no trabalho [24]. Partindo das expressões aqui calculadas, já poderíamos implementar o *método direto*, visando controlar o valor esperado de algum observável em um sistema de dois níveis, mas não apresentaremos os detalhes matemáticos seguintes do artigo [24] neste Apêndice.

## C.2 EQUAÇÕES NO SUBESPAÇO 2-D EFETIVO

Detalharemos nesta seção os passos matemáticos que nos levarão às equações de controle do sistema de 2-níveis efetivo. Vamos partir das Eqs. (4.55) e (4.56), novamente apresentadas a seguir

$$C = \frac{B_1 B_2}{(A_1 B_2 - A_2 B_1)} \left( \frac{A_1}{B_1} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau\right] - \frac{A_2}{B_2} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau\right] \right), \quad (\text{C.33})$$

$$-\sqrt{1 - |C|^2} = \frac{B_1 B_2}{(A_1 B_2 - A_2 B_1)} \left( \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau\right] - \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau\right] \right), \quad (\text{C.34})$$

evitaremos substituir diretamente as expressões de  $A_n$  e  $B_n$  da Eq. (4.40) para não poluirmos visualmente nossos cálculos. Ao invés disso, vamos manipular o termo em evidência de ambas as equações fornecendo diretamente a resposta, que pode ser verificada *a posteriori* pelo leitor. Segue que

$$B_1 B_2 = \frac{u}{G} \quad \text{e} \quad A_1 B_2 - A_2 B_1 = -\exp[-i\phi], \quad (\text{C.35})$$

vamos manter a relação  $G = \sqrt{4u^2 + (\lambda_2 - \lambda_1)^2}$  em todas as etapas. As próximas simplificações são

$$\frac{A_1}{B_1} = \frac{2u e^{-i\phi}}{(\lambda_2 - \lambda_1) - G} \quad \text{e} \quad \frac{A_2}{B_2} = \frac{2u e^{-i\phi}}{(\lambda_2 - \lambda_1) + G}, \quad (\text{C.36})$$

substituindo tais relações nas Eqs. (C.34) e (C.34), obtemos

$$C = -\frac{u}{G} e^{i\phi} \left( \frac{\exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau\right]}{(\lambda_2 - \lambda_1) - G} - \frac{\exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau\right]}{(\lambda_2 - \lambda_1) + G} \right) \times (2u e^{-i\phi}), \quad (\text{C.37})$$

$$\sqrt{1 - |C|^2} = -\frac{u}{G} e^{i\phi} \left( \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau\right] - \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau\right] \right), \quad (\text{C.38})$$

a seguir, vamos usar a Eq. (C.11) com ( $n = 1, 2$ ) para transformar os autovalores  $E_1$  e  $E_2$  nas funções exponenciais, especificamente sendo

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_1 \tau\right] = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}(\lambda_2 + \lambda_1) \tau\right] \exp\left[+\frac{i}{2\hbar} G \tau\right], \quad (\text{C.39})$$

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_2 \tau\right] = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}(\lambda_2 + \lambda_1) \tau\right] \exp\left[-\frac{i}{2\hbar} G \tau\right], \quad (\text{C.40})$$

escrevemos dessa forma devido a soma nos  $E_n$ 's nos argumentos das funções exponenciais, assim, decompomos em um produto. Note que temos um termo em comum  $\exp\left[-\frac{i}{2\hbar}(\lambda_2 + \lambda_1) \tau\right]$ . Colocaremos tal termo em evidência para chegarmos na seguinte relação

$$C = -\frac{2u^2}{G} \exp\left[-i\frac{\lambda_+ \tau}{2\hbar}\right] \left( \frac{\exp\left[+i\frac{G\tau}{2\hbar}\right]}{\lambda_- - G} - \frac{\exp\left[-i\frac{G\tau}{2\hbar}\right]}{\lambda_- + G} \right), \quad (\text{C.41})$$

$$\sqrt{1 - |C|^2} = -\frac{u}{G} e^{i\phi} \exp\left[-i\frac{\lambda_+ \tau}{2\hbar}\right] \left( \exp\left[+i\frac{G\tau}{2\hbar}\right] - \exp\left[-i\frac{G\tau}{2\hbar}\right] \right), \quad (\text{C.42})$$

é conveniente utilizarmos  $\lambda_{\pm} = \lambda_2 \pm \lambda_1$ . Vamos implicitamente fazer o uso das relações trigonométricas de Euler, sendo  $\cos(x) = (\exp[ix] + \exp[-ix])/2$  e  $\sin(x) = (\exp[ix] -$



$\exp[-ix])/2i$ . Se rearranjarmos as frações da Eq. (C.41), usando o mínimo múltiplo comum entre elas, chegamos em

$$C = \frac{4u^2}{G} \exp\left[-i\frac{\lambda_+\tau}{2\hbar}\right] \left( \frac{G \cos\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right] + \lambda_- i \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right]}{\lambda_-^2 - G^2} \right), \quad (\text{C.43})$$

$$\sqrt{1 - |C|^2} = \frac{2u}{G} i e^{i\phi} \exp\left[-i\frac{\lambda_+\tau}{2\hbar}\right] \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right], \quad (\text{C.44})$$

se considerarmos que  $G^2 = 4u^2 + \lambda_-^2$ , teremos no denominador da Eq. (C.44)  $\lambda_-^2 - G^2 = 4u^2$ , que pode ser simplificado pelo mesmo termo presente no numerador. Assim, temos

$$C = \frac{1}{G} \exp\left[-i\frac{\lambda_+\tau}{2\hbar}\right] \left( G \cos\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right] + i\lambda_- \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right] \right), \quad (\text{C.45})$$

$$\sqrt{1 - |C|^2} = \frac{2u}{G} i e^{i\phi} \exp\left[-i\frac{\lambda_+\tau}{2\hbar}\right] \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right], \quad (\text{C.46})$$

por fim, manipulando as expressões obtidas para uma melhor visualização, obtemos o sistema de equações cuja solução fornecerá os parâmetros  $(u, \phi, \lambda_1, \lambda_2)$

$$C = \exp\left[-i\frac{\lambda_+\tau}{2\hbar}\right] \left( \cos\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right] + i\frac{\lambda_-}{G} \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right] \right), \quad (\text{C.47})$$

$$\sqrt{1 - |C|^2} = \exp\left[i\left(\phi - \frac{\lambda_+\tau}{2\hbar}\right)\right] \frac{2u}{G} i \sin\left[\frac{G\tau}{2\hbar}\right]. \quad (\text{C.48})$$

veremos na próxima seção a solução desse sistema de equações analiticamente, após a decomposição das partes real e imaginária.