



MÉTODO DE DINÂMICAS EFETIVAS APLICADO NA ANÁLISE
DA INTERAÇÃO QUBIT-QUBIT EM DISPOSITIVOS SUPERCONDUTORES
A interação qubit-qubit no contexto da computação quântica

Autor

ESTÊVÃO VILAS BOAS DE OLIVEIRA



DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA - CCET
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS - UFSCAR

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos como requerimento fundamental para a obtenção do título de MESTRE EM FÍSICA.

FEVEREIRO 2022

Supervisor:

PROF. DR. CELSO JORGE VILLAS-BÔAS

ESTÊVÃO VILAS BOAS DE OLIVEIRA

MÉTODO DE DINÂMICAS EFETIVAS APLICADO NA ANÁLISE
DA INTERAÇÃO QUBIT-QUBIT EM DISPOSITIVOS SUPERCONDUTORES
A interação qubit-qubit no contexto da computação quântica

DEPARTAMENTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos como requerimento fundamental para a obtenção do título de MESTRE EM FÍSICA.

Supervisor: Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Bôas

São Carlos, São Paulo – Brasil, Fevereiro 2022



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Física

Folha de Aprovação

Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Estêvão Villas Boas de Oliveira, realizada em 23/02/2022.

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Celso Jorge Villas Boas (UFSCar)

Prof. Dr. Daniel Zini Rossatto (UNESP)

Prof. Dr. Francisco Paulo Marques Rouxinol (UNICAMP)

RESUMO

Nesta dissertação abordamos alguns aspectos da computação quântica. Em um primeiro momento, detalhamos o algoritmo de Deutsch-Jozsa e mostramos como implementá-lo em computadores quânticos reais da IBM, disponibilizados gratuitamente via acesso remoto na plataforma IBM-Q Experience. A partir da implementação desse algoritmo foi possível comprovar sua vantagem frente às suas contrapartidas clássicas, isto é, que de fato é possível resolver problemas de forma mais eficiente (com menos passos) quando se exploram os princípios quânticos, como estados de superposição e estados emaranhados, nos processos computacionais. No decorrer dos trabalhos, deparamo-nos com algumas questões que nos motivaram a desenvolver a segunda parte do nosso projeto, em particular o problema que envolve operações lógicas com muitos qubits (conhecidas como portas multi-qubits). Tais portas podem ser decompostas em portas mais simples de um e de dois qubits, introduzindo, no entanto, uma complexidade muito maior aos algoritmos. Nesse sentido, buscamos meios eficientes de se implementar portas lógicas de três qubits em sistemas de qubits supercondutores. Para isso, utilizamos de uma técnica de obtenção de hamiltonianos efetivos para derivação das interações desejadas, simplificando a análise do sistema. Tal método aproximativo foi então confrontado com cálculos numéricos utilizando os hamiltonianos sem aproximação, sendo possível verificar a validade das aproximações e comprovar os resultados obtidos analiticamente. Em seguida realizamos a comparação entre os tempos necessários para a implementação de operações simples, como a transferência de uma excitação (1 qubit de informação quântica) entre dois qubits, ora via interação que chamamos de “direta”, em que um qubit auxiliar atua como agente passivo, mediando uma interação efetiva entre os qubits de trabalho (sem que este seja efetivamente populado), ora via interação que chamamos de “indireta”, uma vez que a troca entre os qubits de trabalho exige a transferência de informação para o qubit auxiliar durante o processo. Constatamos que, embora o caso indireto exija mais etapas (portas lógicas), ele é mais vantajoso em questão de tempo de processamento. Por fim, analisamos a fidelidade das operações lógicas levando-se em conta a presença de erros (sistemáticos e aleatórios) no qubit mediador da interação. Na presença de tais erros, a troca da informação quântica via processo direto apresentou melhor fidelidade. Isso se deu pois, nesse regime, com menos passos intermediários e utilizando-se um qubit que apresenta falhas, não é necessário que se exija um controle tão preciso nos parâmetros do sistema.

Palavras-Chave: Interação qubit-qubit, Dinâmicas efetivas, Computação quântica, Dispositivos supercondutores

ABSTRACT

In this dissertation, we approach some aspects of quantum computing. At first, we detail the Deutsch-Jozsa algorithm and show how to implement it in real IBM quantum computers, available free of charge via remote access on the IBM-Q Experience platform. From the implementation of this algorithm, it was possible to prove its advantage over its classical counterparts, i. e., that it is, in fact, possible to solve problems more efficiently (with fewer steps) when exploring quantum principles, such as superposition states and entangled states, in the computational processes. In the course of the work, we came across some issues that motivated us to develop the second part of our project, particularly the problem involving logical operations with many qubits (known as multi-qubit gates). Such gates can be decomposed into simpler one and two-qubit gates, however introducing much greater complexity to the algorithms. In this sense, we look for efficient ways to implement three-qubit logic gates in superconducting qubit systems. For this purpose, we use a technique to obtain effective Hamiltonians to derive the desired interactions, simplifying the analysis of the system. This approximate method was then confronted with numerical calculations using Hamiltonians without approximation, making it possible to verify the approximations' validity and prove the results obtained analytically. Then, we compare the times needed to implement simple operations, such as the transfer of an excitation (1 qubit of quantum information) between two qubits, both via the so-called "direct" interaction, in which an auxiliary qubit is a mediator of the effective interaction (without it being effectively populated) and via the so-called "indirect" interaction, since the exchange between the qubits requires the transfer of information to the auxiliary qubit during the process. Although the indirect case requires more steps (logic gates), it is more advantageous in terms of processing time. Finally, we analyze the fidelity of the logical operations taking into account the presence of errors (systematic and random) in the auxiliary qubit that mediates the interaction. In the presence of such errors, the exchange of quantum information via the direct process showed better fidelity. In this regime, because of the fewer intermediate steps using a qubit that has faults, it is not necessary to demand such precise control of the system parameters.

Keywords: Qubit-qubit interaction, Effective dynamics, Quantum computing, Superconducting devices

Aos meus pais Maurício e Graziela.
Às minhas irmãs Luiza e Suzana.
À minha esposa Bruna.
Aos meus amados cães Luca e Cacao.

AGRADECIMENTOS

Esta dissertação de mestrado foi elaborada a partir do resultado de vários meses de trabalho contextualizados em meio a um infeliz tempo de pandemia, extremamente marcado por longos processos de confinamento, distanciamento social, e por reuniões de caráter unicamente virtual. Durante esse período, houve pessoas que foram fundamentais para que todo esse árduo processo se tornasse uma jornada um pouco mais prazerosa e da qual jamais me esquecerei. Então, ofereço esta seção a todos aqueles que me ajudaram nessa caminhada, mesmo com a triste certeza de que esta minha humilde homenagem nunca fará justiça à real importância que tiveram, e, de certa forma, nunca deixarão de ter. Aqui, em caráter singular, peço licenças ao leitor para me dirigir diretamente a estas pessoas.

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer à minha família: meus pais Maurício e Graziela, minhas irmãs Luiza e Suzana, minha esposa Bruna, e minhas amadas cachorrinhas Luca e Cacau. Posso dizer, com absoluta certeza, que vocês são tudo de mais importante que tenho na minha vida, e que, em todo o processo do meu mestrado, foram aqueles que mais estiveram presentes (no sentido figurado e literal, dado o contexto) no meu cotidiano, me dando suporte, incentivo, e tornando meu dia mais agradável com a companhia de todos vocês.

Gostaria de agradecer, também, ao meu supervisor, o Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Bôas. Celso, desde que eu iniciei minha primeira graduação em 2014, na UFSCar, sempre tive que, dada a curiosidade de alguns, responder que, apesar do nosso sobrenome em comum, não tínhamos uma relação de parentesco. Hoje, posso dizer com orgulho que isso não é mais verdade, pois considero que a influência que você tem em minha vida transcende a nossa relação profissional. Na minha vida acadêmica, além de um excelente professor e supervisor, você é como um pai pra mim, por sempre me ensinar, me apoiar, e me fazer ter a certeza do caminho que escolhi como físico. Eu me sinto extremamente lisonjeado por ter sido seu aluno, e sinto profunda admiração por você, tanto como pessoa, quanto como profissional. Obrigado por todas as conversas, aulas, e discussões (mesmo que virtuais, infelizmente) nesses últimos dois anos.

Por fim, gostaria de agradecer aos demais integrantes e ex-integrantes do grupo de pesquisa: Alan, Romain, Paulo, Luiz, Raphael, Bruno, Taysa, Antônio e Victor. Muito obrigado por toda ajuda e suporte que todos vocês me deram. Eu apreciei cada conversa, conselho e momentos que fizeram desse período o melhor possível. Foi um prazer tê-los como colegas de trabalho e como amigos. Agradeço também ao Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq – Processo 131669/2020-6) pelo suporte financeiro.

SUMÁRIO

	Página
Lista de Figuras	xi
1 Introdução	1
I Implementação de um Algoritmo Quântico em Computadores Quânticos Reais	4
2 Implementação do Algoritmo de Deutsch-Jozsa	5
2.1 Conceitos teórico	5
2.1.1 Ferramental matemático da Mecânica Quântica	5
2.1.2 Sistemas quânticos compostos	7
2.1.3 Elementos de computação quântica	8
2.2 Plataforma IBMQ Experience	10
2.3 O algoritmo de Deutsch	12
2.4 Algoritmos de consulta e o mecanismo de “caixa preta”	15
2.5 Algoritmo de Deutsch-Jozsa	18
2.6 Implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa	20
2.6.1 Deutsch-Jozsa para uma função constante	20
2.6.2 Deutsch-Jozsa para uma função balanceada	21
2.7 Intermissão: considerações até aqui e motivação para os próximos capítulos	25
II Estudo Teórico da Interação Qubit-Qubit	27
3 Dinâmicas efetivas para hamiltonianos oscilantes no tempo	28
3.1 <i>Avatares</i> da dinâmica e o parâmetro tempo	29
3.2 Obtenção do método	33
3.3 Hamiltonianos com dependência temporal harmônica	35
3.4 Aplicação simples – Modelo de Rabi no regime fora da ressonância	39
4 Análise da interação entre dois qubits supercondutores via dinâmica efetiva	42

4.1	Dispositivos Supercondutores	43
4.2	Obtenção do hamiltoniano efetivo para o sistema de dois qubits	46
4.2.1	Qubits Q1 e Q2 em Ressonância – <i>Coupler</i> como um agente passivo	49
4.2.2	Qubits Q1 e Q2 fora de ressonância – <i>Coupler</i> como um agente ativo	51
4.3	Análise dos resultados	55
4.3.1	Sistemas físicos reais – Erros aleatórios e sistemáticos	58
5	Conclusões Gerais e Perspectivas Futuras	62
	Referências Bibliográficas	65
A	Material Suplementar	71
A.1	Propriedades da convolução	71
A.1.1	Comutatividade entre a operação de derivação temporal e a operação de convolução	71
A.1.2	Comutatividade entre a operação de hermiteano conjugado e a operação de convolução	72
A.1.3	Convolução de Operadores com dependência temporal escalar	72
A.2	Série de Dyson	73
A.2.1	Caso 1: O operador hamiltoniano não possui dependência temporal explícita	73
A.2.2	Caso 2: O operador hamiltoniano possui dependência temporal explícita	74
A.3	Relação de Incerteza Energia-Tempo	78
A.4	Fórmula de Zassenhaus	80
A.5	Demonstração: dependência da hemiteanidade do hamiltoniano com relação à unitariedade do operador de evolução temporal	81
B	Passagens Algébricas	82
B.1	Detalhes das passagens matemáticas para o algoritmo de Deutsch – Seção 2.3	82
B.2	Detalhes das passagens matemáticas para o algoritmo de Deutsch-Jozsa – Seção 2.5	84
B.3	Obtenção das equações de movimento para a representação de interação – Seção 3.1	88
B.4	Expansão em série perturbativa da equação de movimento na Seção 3.2	90
B.5	Cálculo dos termos do hamiltoniano efetivo para o problema da Seção 3.3	92
B.6	Obtenção da condição de dinâmicas efetivas para o problema da Seção 3.4	95
B.7	Obtenção da condição de dinâmicas efetivas para o problema da Seção 4.2	96

LISTA DE FIGURAS

FIGURAS	Página
2.1 Esquema representativo de um circuito quântico, em que as linhas simples representam os registros quânticos e as linhas duplas representam os registros clássicos. Cada bloco representa uma operação quântica, e ao final do circuito realiza-se as medidas dos qubits q_0 e q_1 , armazenando-se os resultados no registro clássico. Na Seção 2.2 será detalhada a plataforma utilizada para a construção deste circuito, a IBMQ experience, bem como qual operação quântica é representada por cada bloco.	9
2.2 Ícones e representações referentes às portas lógicas quânticas de um e dois qubits utilizadas e à operação de medição na base computacional Z , disponíveis na IBM Quantum Experience. A operação de medição converte o valor obtido para os estados quânticos dos qubits em bits, e armazena no registro clássico, em que o primeiro qubit (referente ao registro q_0) é o primeiro dígito (menor base de 2) do número binário no registro clássico, e assim por diante, de modo que o resultado da medição do estado $ q_0, q_1\rangle = 1, 0\rangle$, por exemplo, seria o número binário 01.	11
2.3 Topologia do computador quântico IBMQ Manila, em que cada círculo enumerado simboliza 1 qubit, e as ligações entre eles simbolizam as conectividades entre os qubits. A escala de cores representa os erros associados às operações quânticas realizadas neste computador, em que, para os qubits, essa escala está associada à taxa de erros da operação de rotação X , e, para as conexões, está associada à taxa de erros da operação CNOT entre os qubits. Os valores mostrados estão de acordo com a calibração do computador no momento em que os experimentos foram realizados.	11
2.4 Esquema ilustrativo da atuação da operação U_f , isto é, uma “caixa preta” que de alguma forma implementa a função f em seu mecanismo interno. Quando é fornecido uma certa entrada x , a resposta obtida na saída é $f(x)$, ou seja, a função f avaliada no valor x	12
2.5 Simulação do mecanismo interno da operação U_f para a função constante $f_c(x)$ selecionada. A operação, definida a partir das portas lógicas quânticas mostradas, implementa a função $f_c(x)$	21

2.6	Sequência de operações lógicas necessária para a implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa. Na inicialização, os registros quânticos, configurados todos no estado $ 0\rangle$ (padrão), são colocados no estado indicado na Eq. (2.25). Aqui, foi utilizada a operação oracular U_f simulada para implementar a função constante $f_c(x)$	22
2.7	Histograma dos resultados da realização de 8000 experimentos, identicamente preparados no computador quântico IBMQ Manila, na execução do algoritmo de Deutsch-Jozsa para a função constante $f_c(x)$ simulada.	22
2.8	Simulação do mecanismo interno da operação U_f para a função balanceada $f_b(x)$ selecionada. A operação, definida a partir das portas lógicas quânticas mostradas, implementa a função $f_b(x)$	23
2.9	Esquema análogo ao da Figura 2.6, com as operações lógicas necessárias para a implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa, utilizando, aqui, a operação oracular U_f simulada para implementar a função balanceada $f_b(x)$	23
2.10	Histograma dos resultados da realização de 8000 experimentos, identicamente preparados no computador quântico IBMQ Manila, na execução do algoritmo de Deutsch-Jozsa para a função balanceada $f_b(x)$ simulada.	24
3.1	Comportamento das autoenergias real E_{\pm} e efetiva \tilde{E}_{\pm} em função do aumento do parâmetro ξ , para $\eta = 2$ e $g = 1$	41
4.1	(a) Esquema de um circuito LC , composto por um capacitor de capacitância C e um indutor de indutância L ligados em série. (b) Esquema de um circuito LC , composto por um capacitor de capacitância C_c e uma <i>Junção Josephson</i> de capacitância C_j e indutância L_j ligados em série.	43
4.2	(a) Esquema mostrando os diagramas de energia relativos ao oscilador harmônico. O espaçamento entre os níveis é equidistante, com valor $\hbar\omega$. (b) Esquema mostrando os diagramas de energia incluindo efeitos relativos a uma não linearidade no potencial. Diferentemente do oscilador harmônico, em que o espaçamento entre os níveis é equidistante, aqui esse espaçamento é afetado por um fator de anarmonicidade.	45
4.3	Esquema representado um circuito com dois qubits supercondutores Q_1 e Q_2 , acoplados capacitivamente através de uma capacitância C_{12}	46
4.4	(a) Estrutura simplificada de uma amostra experimental de um sistema de qubits supercondutores. Fonte: Referência [18]. (b) Representação esquemática do sistema adotado para simular-se a interação qubit-qubit, com base na amostra experimental utilizada na referência [18]. Os qubits Q_1 e Q_2 estão acoplados um ao outro via um <i>loop</i> supercondutor do tipo SQUID (C), usado como acoplador sintonizável. Fonte: Feito pelo autor.	47

4.5	Frequências dos qubits e do <i>coupler</i> como função do tempo, em particular, no processo de sintonização da frequência do qubit Q_1 . Inicialmente todos os qubits estarão em dessintonia, com $\omega_1 = (\omega - \Omega)$, $\omega_2 = \omega$ e $\omega_c = (\omega + \Omega)$, para certos valores de frequência ω e Ω quaisquer. No instante de tempo t_0 , a frequência do qubit Q_1 é ajustada com o valor $\omega_2 = \omega$. Em seguida, o sistema é evoluído por um intervalo de tempo Δt , e, posteriormente, a frequência de Q_1 é novamente ajustada para seu valor inicial $(\omega - \Omega)$. Aqui, o acoplador C é mantido em dessintonia com relação a Q_1 e Q_2 em todo processo. Conforme mencionado, numa realização experimental, tal processo pode ser executado através de aplicações de pulsos de campos magnéticos externos [25].	49
4.6	Frequências dos qubits e do <i>coupler</i> como função do tempo, em particular, no processo de sintonização da frequência do acoplador C . Inicialmente, todos os qubits estarão em dessintonia, com $\omega_1 = (\omega - \Omega)$, $\omega_2 = \omega$, e $\omega_c = (\omega + \Omega)$, para certos valores de frequências ω e Ω quaisquer. No instante de tempo t_0 , a frequência do acoplador é ajustada com o valor $\omega_c = \omega_1 = (\omega - \Omega)$, o sistema evolui durante um intervalo de tempo Δt_1 . Em seguida, no instante de tempo $t_1 = (t_0 + \Delta t_1)$, a frequência de C é ajustada para $\omega_c = \omega_2 = \omega$, e o sistema evolui por um intervalo de tempo Δt_2 . Finalmente, no instante de tempo $t_2 = (t_1 + \Delta t_2)$, a frequência de C é novamente ajustada para seu valor inicial $\omega_c = (\omega + \Omega)$	52
4.7	População dos estados do sistema calculada para ambos os regimes de interação, em função do tempo. Para ambas as simulações os ajustes experimentais foram configurados como os experimentos realizados na referência [18], em que $\frac{g_c}{g_{12}} \approx 10$ e $\frac{\Omega}{g_c} \approx 20$, com $g_c \approx 100 MHz$ definindo a escala de tempo/frequência do experimento.	56
4.8	Comportamento da relação $\frac{t_{nd}}{t_d}$, entre os tempos de evolução dos regime de interação direta e mediada, em função do parâmetro adimensional ξ , para diferentes valores de η , em escala logarítmica. O ponto em vermelho representa a relação $\frac{t_{nd}}{t_d}$ para os valores dos parâmetros η e ξ utilizado nas simulações mostradas nas Figuras 4.7a e 4.7b.	57
4.9	Frequências dos qubits e do <i>coupler</i> em função do tempo descritas pelas Eqs. (4.63), (4.64), (4.65), relativas ao processo de sintonização da frequência do qubit Q_1 para a interação direta, incluindo-se a limitação experimental de aplicação de campos externos para a alteração da frequência ω_1 , na situação em que o acoplador apresenta erros de natureza sistemática e aleatória.	59
4.10	Frequências dos qubits e do <i>coupler</i> em função do tempo, Eqs. (4.67), (4.68), (4.69), durante o processo de sintonização da frequência do acoplador C na interação não direta, incluindo-se a limitação experimental de aplicação de campos externos para a alteração da frequência ω_c , na situação em que o acoplador apresenta erros de natureza sistemática e aleatória.	59

4.11	Curvas do comportamento da população do estado $ 0\rangle_1 0\rangle_c 1\rangle_2$ ao final das simulações, em função da amplitude do erro imposta, para os diferentes regimes de interação. Os pontos sombreados em cinza são o esboço dos dados obtidos a partir das simulações, enquanto as linhas em cores são as curvas resultantes de um <i>fitting</i> polinomial quadrático desses pontos. As linhas tracejadas e pontilhadas representam os processos de interação direta e não direta, respectivamente, ambos para diferentes valores do parâmetro δ	60
A.1	(a) Região de integração sob as variáveis t_1, t_2 tal que $t_0 < t_2 < t_1$ e $t_0 < t_1 < t$. (b) Região de integração sob as variáveis t_1, t_2 tal que $t_2 < t_1 < t$ e $t_0 < t_2 < t$	76
A.2	Volume de integração sob as variáveis t_1, t_2, t_3 , em que a origem foi transladada para o ponto (t_0, t_0, t_0) para facilitar a visualização. O volume é limitado pelo tetraedro formado a partir da intersecção dos planos $t_1 = t, t_2 = t_1$ e $t_3 = t_2$ para $t_0 < t_3 < t_2 < t_1 < t$	77

INTRODUÇÃO

O conceito de computação quântica se refere à utilização e manipulação de sistemas físicos, regidos pelas leis da mecânica quântica, para se realizar computação, de forma que a principal diferença entre um computador quântico e um computador clássico reside justamente na capacidade do primeiro de se favorecer das propriedades quânticas, como superposição, interferência e emaranhamento de estados, na busca por maior eficiência computacional. Deste modo, a origem desse paradigma nos remete a duas frentes, até então desassociadas, do conhecimento científico: a mecânica quântica e a ciência da computação.

A física quântica datada do início do século XX, com os trabalhos de Max Planck [1], se estabelece definitivamente como teoria moderna nos anos 1920, alicerçada nos trabalhos de Werner Heisenberg [2] e, em paralelo, Erwin Schrödinger [3] sobre a mecânica e cinemática de sistemas físicos como átomos e moléculas. No entanto, o avanço experimental para controle preciso de um único sistema quântico, individualmente, surge apenas em 1970 com a tecnologia de aprisionamento de átomos [4–6]. Tal avanço foi fundamental para que hoje se fizesse possível alcançar a manipulação e controle fino de sistemas quânticos para a computação.

Paralelamente, em 1936, a ciência da computação dava seus passos iniciais com os trabalhos de Alan Turing, mostrando a existência de uma máquina universal que realiza operações tendo por base uma lógica de algoritmos [7]. A partir daí, diversos desafios ao conceito de “máquina de Turing” (termo cunhado em sua homenagem) foram propostos, notadamente por R. Solovay e V. Strassen, mostrando a possibilidade do uso de algoritmos probabilísticos, superando o paradigma determinístico [8].

A computação quântica, então, surge de fato no início da década de 1980 quando Paul Benioff propõe um modelo de computador regido por um sistema quântico microscópico, e que satisfaz o conceito de uma máquina de Turing [9]. Desde seu surgimento, uma das pautas centrais de debate a

respeito do paradigma da computação quântica é a sua eficiência frente à computação clássica, e se um computador quântico poderia resolver problemas que a computação clássica é capaz de resolver, de forma eficiente. Em 1985 David Deutsch respondeu positivamente a esta pergunta [10, 11], e nessa mesma linha, em 1994, Peter Shor mostrou que um computador quântico pode ser útil para a solução de grandes problemas, como a decomposição de um número inteiro em fatores primos, operação que se torna inviável em computadores clássicos quando o número a ser fatorado contém muitos dígitos [12].

Desde então, tem se tornado árdua a busca por novos algoritmos quânticos para a solução de certos problemas que, ou seriam resolvidos de maneira ineficiente ou teriam solução impossível, em termos práticos, por meio da utilização de computadores clássicos. Muito embora, num aspecto geral, as propriedades da mecânica quântica, e uma exploração engenhosa das mesmas, sirvam de combustível para esta busca, conforme já mencionado, elas não são, por si mesmas, prova incontestável da superioridade dos computadores quânticos de maneira absoluta, ao passo que cada caso deve ser minuciosamente examinado de modo a atestar se tal superioridade realmente ocorre. De fato, para a maior parte dos algoritmos quânticos mais conhecidos, incluindo, além dos já mencionados, a busca de Grover [13], inversão de matrizes para sistemas de equações lineares [14], e algumas propostas no campo de *quantum machine learning* [15, 16], a capacidade de se implementar de maneira eficiente as portas lógicas é absolutamente necessária para se manter a vantagem quântica frente aos algoritmos clássicos para as mesmas tarefas.

Na grande maioria dos dispositivos quânticos modernos e baseados em computação quântica por portas, as portas lógicas quânticas multi-qubit são implementadas a partir de sua decomposição em portas universais de 1 ou 2 qubits, pertencentes ao grupo de Clifford [8]. Assim, no que diz respeito à aplicação prática dos algoritmos em termos de sua implementação em sistemas físicos reais, tal capacidade inevitavelmente recai sob o domínio das características específicas de tais sistemas e de um controle preciso das interações entre os entes que codificam a informação quântica, os qubits. Nesse sentido, o principal foco deste trabalho é mostrar, sob um ponto de vista teórico, as sutilezas presentes nestas interações com relação à sua eficiência, apresentando uma investigação minuciosa de uma interação entre dois qubits como forma de simular a implementação de portas lógicas, a fim de se esclarecer os principais pontos de êxito ou revés no controle destas interações. Para isso, o texto será dividido em duas partes distintas.

Na primeira parte, no Capítulo 2, será abordada de maneira breve a implementação prática de um algoritmo simples – o algoritmo de Deutsch-Jozsa – em uma das recentes plataformas para computação quântica em nuvem, e de crescente acesso – a *IBMQ Experience*, com base na referência [11]. Essa abordagem da computação quântica como finalidade prática, ou pelo menos como comprovação dos princípios teóricos, abrirá, então, precedente para a discussão tanto acerca das nuances que permeiam a implementação eficiente dos diversos algoritmos quânticos em sistemas físicos reais, bem como acerca das exigências relacionadas à manutenção de suas vantagens frente aos algoritmos clássicos em contraposição.

Posto esta motivação, a segunda parte será destinada ao estudo teórico de um dos aspectos mais fundamentais no que diz respeito à utilização de um sistema quântico para a realização de operações computacionais: o emprego de entes do sistema para a caracterização da unidade lógica da computação quântica, o qubit, e a interação entre eles. Então, assumindo que essa investigação teórica da interação entre dois qubits envolve o estabelecimento de um sistema específico, caracterizado por um operador hamiltoniano, e da solução de equações de movimento nem sempre elementares do ponto de vista analítico, trataremos como complemento à análise numérica uma abordagem do problema por meio de um método aproximativo.

Tal método tem como base a aplicação de médias temporais para obtenção de dinâmicas efetivas para o sistema, e foi inicialmente introduzido em [17]. Este se mostra conveniente por simplificar a investigação no sentido de ampliar o entendimento e discernimento dos aspectos mais relevantes da dinâmica de forma analítica. Com isso, o Capítulo 3 será destinado ao desenvolvimento minucioso desse método para uma certa classe de operadores hamiltonianos, tanto como forma de complementar sua exposição original quanto como uma maneira de justificar, de forma satisfatória, sua aplicação, a partir da compreensão de seus aspectos e vantagens para o tipo de problema e sistema físico que será investigado.

Particularmente, voltaremos nosso olhar à análise de um dispositivo supercondutor a ser instituído como sistema físico a implementar qubits interagentes, com base no que foi exposto na referência [18]. Assim, o Capítulo 4 será iniciado com uma breve introdução sobre a física envolvida nos dispositivos supercondutores e com a apresentação do sistema específico que servirá de base para a construção do estudo teórico. Em seguida, abordaremos a investigação da transferência de informação quântica nesses qubits em uma série de regimes, cujo contexto e motivação a serem estabelecidos estão fundamentados na tentativa de se abordar o problema tanto de maneira abrangente quanto pragmática.

Por fim, o Capítulo 5 será destinado à apresentação de conclusões mais gerais sobre este trabalho e à introdução de possíveis formas de complementá-lo a partir de estudos e projetos futuros.

Parte I

Implementação de um Algoritmo Quântico em Computadores Quânticos Reais

IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO DE DEUTSCH-JOZSA

2.1 Conceitos teórico

Esta seção será destinada a uma breve apresentação dos fundamentos e conceitos básicos da mecânica quântica e da computação quântica que serão usados ao longo deste capítulo, sendo, assim, indispensáveis para o entendimento das seções que se seguem.

2.1.1 Ferramental matemático da Mecânica Quântica

O primeiro conceito a ser introduzido é a ideia da representação do estado de um sistema físico através de um vetor $|\psi\rangle$, em notação *Bra-ket*², que reside em um espaço vetorial complexo (corpo dado pelos números complexos) composto de vetores ortogonais e normalizados (norma igual à 1). A esse espaço dá-se o nome de *espaço de Hilbert do sistema* e denota-se como \mathcal{H} . Tal espaço vetorial é munido de um produto interno e relação de completeza [19]. O produto interno entre dois elementos $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ escreve-se $\langle\psi|\phi\rangle = (|\psi\rangle, |\phi\rangle)$, este sendo um número definido no corpo de \mathcal{H} , ou seja $\langle\psi|\phi\rangle$ é um número complexo (\mathbb{C}), em geral.

No contexto de computação quântica, os sistemas físicos de interesse são aqueles que podem ser representados por vetores de estado pertencentes a um espaço de Hilbert bidimensional, caracteri-

²A notação *Bra-ket* foi proposta por Paul Dirac e por isso também pode ser referida como notação de Dirac. É muito utilizada no campo da mecânica quântica para representar vetores, produtos internos e produtos externos. O *Ket* é utilizado para representar um vetor coluna

$$|\psi\rangle = [\psi_1 \quad \psi_2 \quad \dots \quad \psi_n]^T,$$

sendo T a operação de transposição de matrizes (\mathbf{M}^T é a transposta da matriz \mathbf{M}). Já o *Bra* representa um vetor no espaço dual de $|\Psi\rangle$, sendo um vetor linha cujos elementos são os complexos conjugados de $|\Psi\rangle$

$$\langle\psi| = [\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \dots \quad \psi_n^*].$$

zando um sistema quântico de dois níveis, o *qubit*. A base ortonormal utilizada na representação dos vetores de estado é a base canônica $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, com representação matricial

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.1)$$

Doravante, a base acima será referida como *base computacional*, sendo $|0\rangle$ e $|1\rangle$ os *estados da base computacional*. Portanto, qualquer vetor de estado $|\psi\rangle$ pode ser, então, escrito como

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (2.2)$$

um estado de superposição entre os vetores da base, em que os coeficientes complexos a e b são denominados amplitudes de probabilidade. Da normalização do vetor de estado, segue que, a partir dessa representação, os coeficientes a e b obedecem à condição $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

Como objetos que atuam sobre tais vetores, definimos operadores sobre o mesmo espaço vetorial, $\mathcal{O} \in \mathcal{H}$, tal que

$$\mathcal{O}|\psi\rangle = |\psi'\rangle, \quad (2.3)$$

com $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}$. Além disso, operadores em \mathcal{H} geram transformações lineares em \mathcal{H} , ou seja, para quaisquer $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ e $a, b \in \mathbb{C}$ vale

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(a|\phi\rangle + b|\psi\rangle) &= a\mathcal{O}|\phi\rangle + b\mathcal{O}|\psi\rangle \\ &= a|\phi'\rangle + b|\psi'\rangle. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dado o conjunto infinito de operadores, destacamos as matrizes de Pauli \mathbf{X} , \mathbf{Y} e \mathbf{Z} ; matrizes 2x2 que, junto à matriz identidade \mathbf{I} , constituem um conjunto que descreve operações em sistemas quânticos de dois níveis, e por isso são de grande importância no campo da computação quântica. Essas matrizes, e o modo com que elas transformam os estados da base computacional são

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{X}|0\rangle = |1\rangle \\ \mathbf{X}|1\rangle = |0\rangle \end{cases}, \quad (2.5a)$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{Y}|0\rangle = i|1\rangle \\ \mathbf{Y}|1\rangle = -i|0\rangle \end{cases}, \quad (2.5b)$$

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{Z}|0\rangle = |0\rangle \\ \mathbf{Z}|1\rangle = -|1\rangle \end{cases}, \quad (2.5c)$$

em que $i = \sqrt{-1}$ é a unidade imaginária.

Ainda, a descrição da evolução temporal de um sistema quântico fechado pode ser dada através do operador de evolução temporal $\mathcal{U}(t)$, ou seja, um operador quântico que leva um vetor de estado $|\psi(0)\rangle$ a um vetor de estado $|\psi(t)\rangle$, isto é,

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t)|\psi(0)\rangle, \quad (2.6)$$

sendo $\mathcal{U}(t)$ determinado pela equação de Schrödinger¹. Uma importante propriedade do operador de evolução temporal $\mathcal{U}(t)$ é a sua unitariedade, ou seja,

$$\mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{U} = \mathbf{I}, \quad (2.7)$$

em que \mathcal{U}^\dagger é o hermiteano conjugado de \mathcal{U} . A implicação direta é

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(0) | \mathcal{U}^\dagger(t) \cdot \mathcal{U}(t) | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \mathbf{I} | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = 1, \end{aligned} \quad (2.8)$$

preservando a condição de normalização [20].

2.1.2 Sistemas quânticos compostos

Em computação, sempre temos que lidar com muitos dados independentes, de modo que os sistemas quânticos, então, devem ser capazes de funcionar sob essas condições. Nesse sentido, é sempre possível gerar estados compostos, ou seja, estados quânticos que representam o estado *conjunto* de dois ou mais qubits. Matematicamente isso é feito via produto tensorial e denotado como

$$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle, \quad (2.9)$$

sendo $|\psi_i\rangle$ o vetor de estado relativo ao i -ésimo qubit com seu espaço de Hilbert \mathcal{H}_i independente. Junto com o estado, o espaço de Hilbert total é também aumentado, sendo $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_{\text{total}}$ tal que $\mathcal{H}_{\text{total}} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n$. Analogamente, uma composição de um conjunto de operações é escrita da seguinte forma

$$\mathbf{O}_T = \mathbf{O}_1 \otimes \mathbf{O}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{O}_n = \bigotimes_{i=1}^n \mathbf{O}_i, \quad (2.10)$$

onde \mathbf{O}_i são operadores que atuam no espaço de Hilbert do i -ésimo qubit. O símbolo de produtória tensorial “ \otimes ” é usado para representar o produto de uma forma compacta. A atuação do operador \mathbf{O}_T no estado $|\Psi\rangle$ definido na Eq. (2.9) é dada por

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= \mathbf{O}_T |\Psi\rangle \\ &= (\mathbf{O}_1 \otimes \mathbf{O}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{O}_n) (|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle) \\ &= (\mathbf{O}_1 |\psi_1\rangle) \otimes (\mathbf{O}_2 |\psi_2\rangle) \otimes \cdots \otimes (\mathbf{O}_n |\psi_n\rangle) \\ &= |\psi'_1\rangle \otimes |\psi'_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi'_n\rangle. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Para alívio de notação, também é possível omitir-se o símbolo “ \otimes ” na representação da composição de espaços vetoriais para os vetores de estado $|\psi_i\rangle$, escrevendo-se $|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \dots |\psi_n\rangle$ ou simplesmente $|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\rangle$.

¹A descrição dinâmica de um sistema quântico envolve aspectos importantes e que merecem um enfoque à parte. Por isso, aqui faremos apenas uma breve menção a respeito dos conceitos que serão necessários para o entendimento dos elementos da computação quântica, destinando a Seção 3.1 para novamente enunciá-los num contexto propício para uma investigação mais detalhada.

2.1.3 Elementos de computação quântica

Além das matrizes de Pauli, existe uma series de operações importantes no contexto da computação quântica, sendo elas atuantes em um ou mais qubits. Uma relevante porta lógica quântica de um qubit é a porta Hadamard, cuja representação matricial e atuação são

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \implies \mathbf{H}|x\rangle = \frac{|0\rangle + (-1)^x |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.12)$$

ou simplesmente,

$$\mathbf{H}|x\rangle = \begin{cases} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = |+\rangle & , \text{ se } x = 0 \\ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = |-\rangle & , \text{ se } x = 1 \end{cases}. \quad (2.13)$$

que resulta na criação de um estado de superposição entre os vetores de estado da base computacional com igual amplitude de probabilidade.

Definindo as operações de dois qubits temos a porta lógica CNOT, ou “não controlado” $\mathbf{C}_x^{(c \rightarrow t)}$, em que c representa o qubit de controle e t o qubit alvo. Sua atuação muda o estado do qubit alvo dependendo do valor do qubit de controle

$$\mathbf{C}_x^{(1 \rightarrow 2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \implies \begin{cases} |00\rangle \rightarrow |00\rangle \\ |01\rangle \rightarrow |01\rangle \\ |10\rangle \rightarrow |11\rangle \\ |11\rangle \rightarrow |10\rangle \end{cases}. \quad (2.14)$$

Ainda, é importante salientar que todas as portas lógicas quânticas podem ser resumidas a um conjunto limitado de portas de 1 e 2 qubits. Foi demonstrado que esse conjunto envolve as chamadas portas Clifford (porta Hadamard, portas de Pauli, a CNOT e a porta de fase \mathbf{S}) somadas às portas de rotação (\mathbf{R}_y e \mathbf{R}_z), conforme definido na referência [8].

Na computação clássica, a sequência de portas lógicas atuando em um sistema pode ser representada na forma de um circuito e a unidade lógica é definida como o *bit*, que assume os valores 0 ou 1. De forma análoga, na computação quântica um circuito quântico é uma maneira de caracterizar o sequenciamento das operações quânticas que atuam na unidade lógica, o *qubit*, com a ressalva de que, nesta, as propriedades quânticas de superposição e emaranhamento surgem como um grande diferencial com relação à computação clássica, conforme será detalhado nas seções seguintes.

A Figura 2.1 mostra o esquema de um circuito quântico, em que cada linha representa um qubit, e a leitura é feita da esquerda para a direita. Na figura mencionada, q é o registro quântico contendo dois qubits, q_0 e q_1 , em que se implementam as operações, sendo que, quando os operadores estão alinhados verticalmente temos a atuação simultânea desses operadores nos seus respectivos qubits. Já o elemento c_2 representa um registro clássico de 2 bits, que irá armazenar a informação resultante de uma medida dos qubits, podendo assumir os valores 00, 01, 10 ou 11. Ao final do

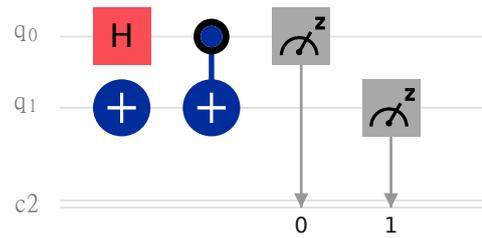


Figura 2.1: Esquema representativo de um circuito quântico, em que as linhas simples representam os registros quânticos e as linhas duplas representam os registros clássicos. Cada bloco representa uma operação quântica, e ao final do circuito realiza-se as medidas dos qubits q_0 e q_1 , armazenando-se os resultados no registro clássico. Na Seção 2.2 será detalhada a plataforma utilizada para a construção deste circuito, a IBMQ experience, bem como qual operação quântica é representada por cada bloco. Fonte: IBM Q [21].

circuito é realizada, então, a operação de medição, definida como sendo a medição dos qubits na base computacional, ou seja, a base Z.

Além disso, uma importante propriedade dos circuitos quânticos é sua reversibilidade, isto é, devido à condição de unitariedade dos operadores quânticos, as operações em um circuito quântico podem ser revertidas simplesmente aplicando o mesmo operador seguidamente, como no exemplo abaixo para um estado $|\psi\rangle = |0\rangle$ e a operação Hadamard atuando sobre esse estado

$$\begin{aligned}
 |0\rangle &\xrightarrow{\text{Hadamard}} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = |+\rangle \\
 |+\rangle &\xrightarrow{\text{Hadamard}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) = |0\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{2.15}$$

Por convenção um circuito é iniciado com todos os qubits no estado $|0\rangle$ e a partir daí as portas lógicas quânticas são implementadas. Tais portas nada mais são do que operadores quânticos que atuam em um sistema composto por um ou mais qubits.

2.2 Plataforma IBMQ Experience

A computação quântica tem se desenvolvido nas últimas décadas e, cada vez mais, grandes empresas de tecnologia como Google, D-Wave, IonQ e IBM entram nesse setor em busca da comprovação da superioridade, de maneira geral, dos computadores quânticos frente aos clássicos, a chamada “supremacia¹ quântica” [22–24]. Neste trabalho nos restringimos ao uso da IBMQ Experience, uma plataforma para computação quântica disponibilizada pela empresa IBM [21]. Gratuita e com uma interface para computação em nuvem, nela temos acesso a diversos computadores quânticos que variam de 5 a 15 qubits. Tais computadores têm como núcleo de processamento sistemas quânticos baseados em dispositivos supercondutores para codificação dos qubits². Além disso é possível acessar os simuladores (computadores clássicos que simulam um computador quântico ideal) com capacidade de 32 a 5000 qubits. A plataforma permite a criação de circuitos tanto em uma interface gráfica, em um modelo de “clique e arraste” das portas lógicas, como a partir de linguagens de programação para computação quântica, notadamente a linguagem QASM [27] e a biblioteca Qiskit [28] para programação em linguagem Python.

Por meio da utilização da interface gráfica podemos clicar nos ícones que representam os operadores quânticos e posicioná-los no circuito para que atuem sobre um qubit e, desse modo, apliquem sobre eles suas operações matemáticas, como ilustra a Figura 2.1. Na Figura 2.2 podemos ver alguns dos ícones disponíveis referentes às operações já mencionadas anteriormente. Após a construção do algoritmo, este pode ser submetido para processamento em um computador quântico. A possibilidade de escolha, para esse experimento na plataforma, do número de *shots*, contagem dos resultados de experimentos identicamente preparados, objetiva aumentar a acurácia estatística dos resultados. Ao final da execução, os resultados são dispostos na forma de um histograma que reflete as probabilidades das possíveis respostas.

O dispositivo utilizado para as implementações descritas nesse artigo foi o IBMQ Manila, um computador quântico com 5 qubits, cuja topologia, que destaca as conexões entre esses qubits, é ilustrada pela Figura 2.3. O número de *shots* escolhido para todas as execuções foi 8000.

Por fim, cabe ainda a menção de que os computadores quânticos, sendo sistemas físicos não ideais, apresentam erros associados a processos de dissipação e decoerência, inerentes a um sistema quântico não perfeitamente isolado³. Ainda, a plataforma fornece uma documentação com um rico

¹No contexto da computação quântica e complexidade de algoritmos, o conceito de “superioridade” difere do conceito de “supremacia”. A superioridade se refere à capacidade de um computador quântico necessitar de um tempo menor para executar uma mesma tarefa que um computador clássico já realiza, e a supremacia se refere à capacidade de o computador quântico possibilitar a realização de tarefas impossíveis, em termos práticos, de serem realizadas em um computador clássico.

²Sistemas de qubits supercondutores têm se mostrado promissores na implementação de algoritmos e simulações quânticas na atual era da tecnologia de computadores quânticos, a era *NISQ* (*noisy intermediate scale quantum*) [25, 26]. A física envolvida nestes sistemas e alguns de seus aspectos significativos serão discutidos na Seção 4.

³Processos de dissipação e decoerência são resultados da interação de um sistema quântico com o ambiente externo, e têm como principal consequência a perda de algumas propriedades quânticas do sistema, como por exemplo, a unitariedade das operações descritas de acordo com as Eqs. (2.7) e (2.8), e a superposição coerente de estados descrita na Eq. (2.2). Uma discussão mais completa sobre esse aspecto dos computadores quânticos e da plataforma IBMQ é

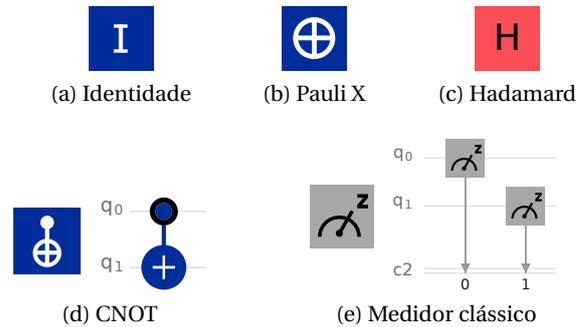


Figura 2.2: Ícones e representações referentes às portas lógicas quânticas de um e dois qubits utilizadas e à operação de medição na base computacional Z, disponíveis na IBM Quantum Experience. A operação de medição converte o valor obtido para os estados quânticos dos qubits em bits, e armazena no registro clássico, em que o primeiro qubit (referente ao registro q_0) é o primeiro dígito (menor base de 2) do número binário no registro clássico, e assim por diante, de modo que o resultado da medição do estado $|q_0, q_1\rangle = |1, 0\rangle$, por exemplo, seria o número binário 01. Fonte: IBM Q [21] e editada pelos autores.

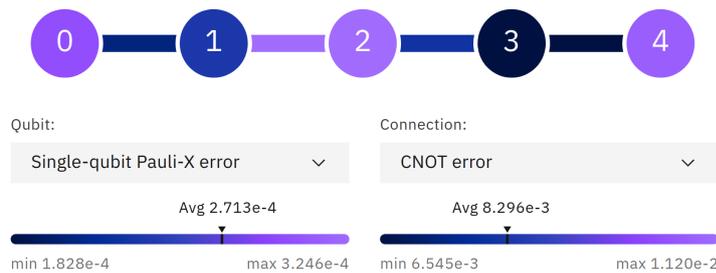


Figura 2.3: Topologia do computador quântico IBMQ Manila, em que cada círculo enumerado simboliza 1 qubit, e as ligações entre eles simbolizam as conectividades entre os qubits. A escala de cores representa os erros associados às operações quânticas realizadas neste computador, em que, para os qubits, essa escala está associada à taxa de erros da operação de rotação X, e, para as conexões, está associada à taxa de erros da operação CNOT entre os qubits. Os valores mostrados estão de acordo com a calibração do computador no momento em que os experimentos foram realizados.

Fonte: IBM Q [21].

manual de instruções para os usuários, disponível em [31].

2.3 O algoritmo de Deutsch

O algoritmo de Deutsch se propõe a utilizar da propriedade quântica da superposição coerente de estados, algo inexistente em dispositivos clássicos, para então determinar, a partir de uma única medida, se uma dada função $f(x)$ é constante ou balanceada.

Seja $f(x)$ uma função binária tal que $f : \{0, 1\} \rightarrow \{0, 1\}$. Se $f(x)$ é balanceada temos as opções $f(0) = 0, f(1) = 1$ ou $f(0) = 1, f(1) = 0$. Caso ela seja constante temos $f(0) = f(1) = 0$ ou $f(0) = f(1) = 1$. Para ambos os casos, em um computador clássico, seria necessária a avaliação da função $f(x)$ para todos os dois valores x de entrada para determinar com certeza se a função é constante ou balanceada. Já num computador quântico veremos que, devido às propriedades de superposição de estados quânticos, é possível que a função $f(x)$ seja avaliada para todos os dois valores de x em paralelo e simultaneamente, e ainda, a partir da propriedade de interferência quântica, é possível que seja determinado, com certeza, por meio de uma única medida, se $f(x)$ é constante ou balanceada.

Para a construção do algoritmo serão necessários dois registros quânticos de 1 qubit, o primeiro para representar as entradas x e o segundo para representar os valores possíveis da função $f(x)$, da forma $|x\rangle |f(x)\rangle$. Ainda, definimos a operação unitária U_f cuja atuação em um estado é dada por

$$U_f |x\rangle |y\rangle = |x\rangle |y \oplus f(x)\rangle, \quad (2.16)$$

em que $x, y \in \{0, 1\}$ e o símbolo “ \oplus ” representar a soma em módulo 2 [32]. No contexto do algoritmo de Deutsch, a atuação do operador U_f no estado $|x\rangle$ representa a avaliação do valor da função f para a entrada x , e armazenamento deste resultado no segundo registro quântico. Entretanto, diferente das operações quânticas já definidas na Seção 2.1, não nos preocuparemos, por enquanto, com a representação matricial do operador U_f , nem com os detalhes do mecanismo interno por trás da implementação deste. Iremos tratá-lo apenas como uma “caixa preta” ou *blackbox*, em inglês, cujo mecanismo interno, não importa qual, implementa a operação da Eq. (2.16), esquematizada na Figura 2.4. A única coisa que assumiremos será que a operação U_f nos é dada, e munidos dela, implementaremos o algoritmo de Deutsch para avaliar se a função $f(x)$ é constante ou balanceada. Nas seções que seguirão, discutiremos a respeito desta suposição, fornecendo mais detalhes acerca desta “caixa preta”.

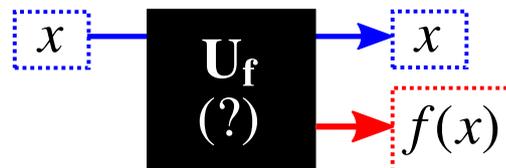


Figura 2.4: Esquema ilustrativo da atuação da operação U_f , isto é, uma “caixa preta” que de alguma forma implementa a função f em seu mecanismo interno. Quando é fornecido uma certa entrada x , a resposta obtida na saída é $f(x)$, ou seja, a função f avaliada no valor x .

Fonte: Elaborado pelos autores.

Prosseguindo, será necessário um registro clássico de um bit para, ao final do algoritmo, armazenar o resultado de uma medição do registro de 1 qubit que representa a função $f(x)$. O vetor de estado inicial é então iniciado com o primeiro qubit no estado $|0\rangle$ e o segundo no estado $|1\rangle$

$$|\psi^{(0)}\rangle = |0\rangle|1\rangle. \quad (2.17)$$

Aplicando então a operação Hadamard em ambos os registros, colocamos ambos os qubits em um estado de superposição de todos os estados da base computacional ($|0\rangle$ e $|1\rangle$), como mostrado na Eq. (2.12),

$$\begin{aligned} |\psi^{(1)}\rangle &= (\mathbf{H} \otimes \mathbf{H}) |\psi^{(0)}\rangle = (\mathbf{H}|0\rangle) \otimes (\mathbf{H}|1\rangle) \\ &= |+\rangle|-\rangle. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Assim, aplicando em seguida a operação \mathbf{U}_f , temos o fenômeno do paralelismo quântico em ação, já que a função $f(x)$ será calculada para $x = 0$ e $x = 1$, simultaneamente. Assim

$$|\psi^{(2)}\rangle = \mathbf{U}_f |\psi^{(1)}\rangle = \mathbf{U}_f |+\rangle|-\rangle. \quad (2.19)$$

Mas

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_f |x\rangle \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} &= |x\rangle \frac{|0 \oplus f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \begin{cases} |x\rangle \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} & \text{se } f(x) = 0, \\ |x\rangle \frac{|1\rangle - |0\rangle}{\sqrt{2}} & \text{se } f(x) = 1, \end{cases} \end{aligned} \quad (2.20)$$

implicando que

$$\mathbf{U}_f |x\rangle|-\rangle = (-1)^{f(x)} |x\rangle|-\rangle, \quad (2.21)$$

Logo, a Eq. (2.19) fica

$$|\psi^{(2)}\rangle = \frac{(-1)^{f(0)}|0\rangle + (-1)^{f(1)}|1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |-\rangle. \quad (2.22)$$

Por fim, aplicamos a operação Hadamard no primeiro registro

$$\begin{aligned} |\psi^{(3)}\rangle &= (\mathbf{H} \otimes \mathbf{I}) |\psi^{(2)}\rangle \\ &= \left[(-1)^{f(0)} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{2} + (-1)^{f(1)} \frac{|0\rangle - |1\rangle}{2} \right] \otimes |-\rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

É nesta etapa que a interferência entre os estados quânticos atua no sistema, fazendo com que os estados que não representam a resposta esperada se interfiram destrutivamente, e que o estado cuja medida representa a resposta para o problema da função $f(x)$ tenha sua amplitude de probabilidade aumentada. O estado final gerado é, então, do tipo

$$|\psi^{(3)}\rangle = (-1)^{f(0)} |y\rangle \otimes |-\rangle, \quad (2.24)$$

em que

$$|y\rangle = \begin{cases} |0\rangle, & \text{para } f(x) \text{ constante,} \\ |1\rangle, & \text{para } f(x) \text{ balanceada,} \end{cases}$$

ou seja, uma medida no primeiro registro teria como resultado o qubit no estado 0, caso a função fosse *constante*, ou no estado 1, caso a função fosse *balanceada*. Assim, em uma única medida deste primeiro registro é possível determinar a propriedade global da função $f(x)$. No apêndice [B.1](#) apresentamos em detalhes as passagens matemáticas do algoritmo de Deutsch, que levam ao resultado final apresentado na Eq. (2.24).

2.4 Algoritmos de consulta e o mecanismo de “caixa preta”

Na seção anterior vimos que, utilizando o Algoritmo de Deutsch, é possível determinar se uma função binária de duas entradas $f(x) : \{0, 1\} \rightarrow \{0, 1\}$ é constante ou balanceada, a partir da operação U_f , em apenas uma avaliação dessa função, o que, num circuito quântico, é representado pelo ato da medida. Entretanto, nada foi mencionado a respeito da estrutura, representação matricial, ou mecanismo por trás dessa operação, assumindo apenas que ela consiste em uma “caixa preta” que atua conforme a Figura 2.4.

Nesse contexto, tal caixa preta pode ser entendida como um agente que, de algum modo, tem um conhecimento acerca da função $f(x)$, sendo, então, capaz de implementá-la a partir de algum mecanismo o qual ainda não conhecemos. Essa definição caracteriza um operador Oráculo, presente na categoria dos chamados Algoritmos Quânticos de Consulta, ou *Quantum Query Algorithms*, em inglês, tal como os já mencionados algoritmos de Shor e Grover. Nessa categoria de algoritmos o mecanismo de obtenção da resposta do problema inclui consultas a esse Oráculo. No algoritmo de Grover para busca em uma lista não estruturada por exemplo, este operador, a partir de uma certa entrada fornecida, nos devolve como saída, “sim”, se a entrada é o elemento buscado, ou “não”, caso contrário¹. Esse comportamento binário é facilmente traduzido no contexto da computação, tanto clássica quanto quântica, e, para o operador Oráculo do algoritmo de Deutsch, a “resposta” é 0 ou 1, representando os possíveis valores da função binária dependendo da entrada fornecida na consulta. De certa forma, tal definição introduz uma série de dúvidas no que diz respeito à “transparência” do mecanismo de funcionamento do algoritmo de Deutsch e de como implementá-lo na prática.

Para exemplificar o ponto acima, suponha que tenhamos em mãos uma certa função, cuja característica (constante ou balanceada) pretendemos determinar a partir do algoritmo de Deutsch. Além da representação das variáveis x e da função f em vetores de estado, e da implementação das operações Hadamard, já detalhadas na Seção 2.1.3, a construção do algoritmo compreenderia, também, a implementação da operação U_f , que de certa forma representa a implementação da função $f(x)$. Contudo, isso exigiria um conhecimento prévio desta função! Antes de mais nada, a dúvida que permanece acerca deste paradoxal limbo de recursividade é: se para implementar o algoritmo de Deutsch, com a finalidade de determinar uma característica da função, precisamos de antemão conhecer a função para construir a operação U_f , qual a necessidade, ou ainda, a utilidade de se implementar o algoritmo?

Este questionamento, apesar de absolutamente pertinente, é, para nosso alívio, resultado de um equívoco com relação ao entendimento dos algoritmos de consulta, sua definição e utilidade no contexto da computação quântica. Do que já foi dito até aqui é evidente que o operador Oráculo, que implementa a operação U_f , de fato tem conhecimento acerca da função $f(x)$, sendo que, para

¹Uma interessante analogia que ilustra bem este caso é o mecanismo “chave-fechadura”, em que apesar de a fechadura (Oráculo), devido à sua estrutura interna, “saber” qual das chaves num molho (lista) a destranca, ela não nos aponta de prontidão qual é a correta, exigindo que façamos uma consulta para cada uma das chaves, individualmente – no caso não quântico pelo menos. A fechadura apenas nos retorna “sim” (destrancando) ou “não” (emperrando) a respeito da chave com a qual fazemos a consulta.

cada função teríamos um mecanismo interno diferente. É evidente, também, que se quiséssemos construir tal operador, precisaríamos, necessariamente, conhecer a função para qual desejamos implementar U_f .

Entretanto, a intenção de um algoritmo de consulta é apenas analisar a capacidade de um computador quântico, posto que o operador Oráculo, construído por um terceiro, é fornecido. A complexidade computacional, ou seja, o número de operações lógicas ou tempo de processamento, para um algoritmo de consulta é então definida em termos do número de consultas ao Oráculo.

A motivação para a necessidade do operador Oracular fica mais palpável quando nos atentamos para o fato de que, para um processo análogo num computador clássico e com a mesma finalidade do algoritmo de Deutsch, um mecanismo que implementasse $f(x)$ também seria indispensável. A diferença – além das propriedades da mecânica quântica, é claro – seria que, neste caso, para uma função binária com 2 entradas, seriam necessárias 2 consultas a esse operador Oráculo. À primeira vista, no entanto, tal motivação não é tão direta pois no contexto clássico esse processo já se tornou um tanto quanto trivial para nós. Uma certa função $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, por exemplo, quando escrita da forma

$$f(x) = x^2 + 3x + 1,$$

define, implicitamente, um algoritmo, ou seja, um conjunto de passos que precisamos seguir a fim de calcular a função para uma determinada entrada x , e nesse sentido a “operação U_f ” seria implementada da mesma maneira – seja ela em uma calculadora clássica, ou até mesmo em nossas mentes. Tomando $x = 2$, para o exemplo acima, teríamos

Entrada: $x = 2$

Procedimento:

1. Multiplicar 2 por ele mesmo e armazenar o resultado;
2. Multiplicar 2 pelo número 3, somar com o resultado anterior e armazenar o resultado;
3. Adicionar 1 ao resultado anterior e armazenar;
4. Retornar o valor armazenado.

Saída: $f(x = 2) = 11$

Nesse sentido, supondo que sejamos nós o terceiro agente e que tenhamos a intenção de propor uma disputa entre um computador quântico e um computador clássico, com objetivo de determinar qual é mais rápido em avaliar se uma função binária, com 2 variáveis de entrada, é constante ou balanceada. Nós, como agentes externos, iremos determinar qual é a função, construir o operador oráculo e equipar ambos computadores antes de dar a largada. O computador clássico necessitará

de 2 consultas ao oráculo, enquanto o computador quântico, utilizando o algoritmo de Deutsch, necessitará apenas de uma consulta, vencendo a disputa. Isso pois, em suma, a essência deste algoritmo é a utilização do paralelismo quântico, em que a operação U_f é aplicada uma única vez, e simultaneamente, para todos os possíveis valores de x , em superposição.

Assim, a vantagem de se definir a complexidade do algoritmo em termos de um Oráculo é justamente demonstrar a superioridade do computador quântico frente aos computadores clássicos, na realização de uma certa tarefa, estando estes nas mesmas condições, munidos do mesmo recurso (o Oráculo), nos privando dos detalhes de parte do processo (a construção e mecanismo interno da operação oracular).

2.5 Algoritmo de Deutsch-Jozsa

O algoritmo de Deutsch-Jozsa, resultado de uma junção dos trabalhos de David Deutsch e Richard Jozsa [33], se propõe, assim como seu precursor, o algoritmo de Deutsch, a utilizar a propriedade quântica da superposição coerente de estados para obter vantagem em relação à execução de uma mesma tarefa em um dispositivo clássico. Nesse sentido o algoritmo de Deutsch-Jozsa pode ser entendido como uma generalização do algoritmo de Deutsch, em que, agora, a função $f(x)$ a ser avaliada permite N entradas em seu domínio. Seguindo essa motivação, é possível extrair, então, uma propriedade global desta função $f(x)$, aplicada em N valores, em uma única avaliação, usando o método da computação por paralelismo quântico. Aqui, são necessários n qubits para representar as $N = 2^n$ possíveis entradas. Assim, de maneira análoga à introduzida na Seção 2.3, para a construção do algoritmo serão necessários dois registros quânticos, o primeiro com $n = \log_2 N$ qubits para representar as entradas x , e o segundo registro com 1 qubit para representar os valores possíveis da função $f(x)$, da forma $|x\rangle|f(x)\rangle$. Da mesma forma, é definida, também, a operação unitária \mathbf{U}_f cuja atuação é dada pela Eq. (2.16).

O sistema é então iniciado com todos os qubits do primeiro registro no estado $|0\rangle$ e o qubit do segundo registro no estado $|1\rangle$

$$\begin{aligned} |\psi^{(0)}\rangle &= \overbrace{|0, 0, \dots, 0\rangle}^{n \text{ vezes}} |1\rangle = \overbrace{|0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle}^{n \text{ vezes}} \otimes |1\rangle \\ &= \underbrace{|0\rangle^{\otimes n}}_x \otimes \underbrace{|1\rangle}_{f(x)}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Novamente, para gerar uma superposição entre todos os estados da base, implementamos portas Hadamard em todos os qubits de ambos os registros (como descrito na Seção 2.1.3). Assim,

$$\begin{aligned} |\psi^{(1)}\rangle &= (\mathbf{H}^{\otimes n} \otimes \mathbf{H}) |0\rangle^{\otimes n} |1\rangle = (\mathbf{H}|0\rangle)^{\otimes n} \otimes (\mathbf{H}|1\rangle) \\ &= |+\rangle^{\otimes n} |-\rangle, \end{aligned} \quad (2.26)$$

em que o primeiro registro está em uma superposição, de igual amplitude de probabilidade, de todos os possíveis estados de x , da forma

$$|+\rangle^{\otimes n} = \sum_{x=0}^{2^n-1} \frac{|x\rangle}{\sqrt{2^n}}. \quad (2.27)$$

Assim, a Eq. (2.26) fica

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} \frac{|x\rangle}{\sqrt{2^n}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (2.28)$$

Dando prosseguimento, aplicando a operação \mathbf{U}_f , agora para uma função com N entradas, temos

$$\begin{aligned} |\psi^{(2)}\rangle &= \mathbf{U}_f |\psi^{(1)}\rangle \\ &= \sum_{x=0}^{2^n-1} \frac{|x\rangle}{\sqrt{2^n}} \left(\frac{|0 \oplus f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle}{\sqrt{2}} \right). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Considerando que

$$|0 \oplus f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle = \begin{cases} |0\rangle - |1\rangle & , \text{ se } f(x) = 0 \\ (-1)(|0\rangle - |1\rangle) & , \text{ se } f(x) = 1 \end{cases}, \quad (2.30)$$

podemos chegar ao estado final da operação U_f

$$|\psi^{(2)}\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} \frac{|x\rangle}{\sqrt{2^n}} \otimes |-\rangle. \quad (2.31)$$

Deve-se, agora, aplicar a operação Hadamard no primeiro registro, resultando em

$$\begin{aligned} |\psi^{(3)}\rangle &= (\mathbf{H}^{\otimes n} \otimes \mathbf{I}) |\psi^{(2)}\rangle \\ &= \left(\sum_{x=0}^{2^n-1} \frac{\mathbf{H}^{\otimes n} |x\rangle}{\sqrt{2^n}} \right) \otimes |-\rangle. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Aqui, de maneira análoga ao que foi mostrado na Seção 2.3, a interferência entre os estados quânticos atua no sistema gerando o estado cuja medida representa a resposta para o problema da função $f(x)$. Especificamente, teremos um estado final do tipo

$$|\psi^{(3)}\rangle = (-1)^{\alpha_y} |y\rangle \otimes |-\rangle, \quad (2.33)$$

em que α_y é uma constante que pode assumir os valores 0 ou 1, e

$$\begin{cases} |y\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle, & \text{para } f(x) \text{ constante,} \\ |y\rangle \neq |0, 0, \dots, 0\rangle, & \text{para } f(x) \text{ balanceada,} \end{cases}$$

ou seja, uma medida no primeiro registro teria como resultado todos os n qubits no estado 0, caso a função seja *constante*, ou pelo menos um dos n qubits no estado 1, caso a função seja *balanceada*. Assim, em uma única medida deste primeiro registro é possível determinar a propriedade global da função $f(x)$. No Apêndice B.2 apresentamos em detalhes as passagens matemáticas do algoritmo de Deutsch-Jozsa, que levam ao resultado final apresentado na Eq.(2.33).

2.6 Implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa

Em essência, o algoritmo de Deutsch-Jozsa se beneficia do paralelismo quântico na aplicação da operação U_f , gerando um estado no qual cada vetor de estado que representa uma entrada x está emaranhado com o vetor de estado que representa o valor da função $f(x)$ para aquela entrada, da forma

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \xrightarrow{U_f} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle |f(x)\rangle. \quad (2.34)$$

Ainda, é feito com que esses estados se interfiram destrutivamente, levando a um estado final cuja medida fornece o resposta para o problema.

O objetivo desta seção é mostrar, passo a passo, a implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa utilizando o computador quântico da IBM. Aqui, a intenção é utilizar o algoritmo como prova de princípio, e não como fim em si mesmo, ou seja, ele será utilizado não para avaliar de maneira eficiente uma função desconhecida, mas sim para demonstrar a eficiência do computador quântico, frente aos computadores clássicos, na tarefa de se avaliar uma determinada função. Nesse sentido, nós faremos o papel do terceiro agente, como mencionado na Seção 2.4, selecionando a função, preparando a respectiva operação oracular U_f e equipando o computador quântico.

Serão preparados exemplos para duas funções, uma constante e outra balanceada, sendo ambas da forma $f : \{0, 1\}^3 \rightarrow \{0, 1\}$, ou seja, $N = 2^n = 8$ possíveis entradas, com $n = 3$ qubits para codificar essas entradas. Assim, serão necessários: (i) um registro quântico com 3 qubits para codificar as variáveis de entrada x ; (ii) um registro quântico com 1 qubit para armazenar $f(x)$; e (iii) um registro clássico com 3 bits para a medida final do registro das entradas. Ainda, para cada função, iremos utilizar determinadas portas lógicas para simular a respectiva operação oracular. O código em linguagem QASM utilizado para a implementação dos algoritmos estão disponíveis em um repositório online no GitHub [34].

2.6.1 Deutsch-Jozsa para uma função constante

Consideremos, inicialmente, uma função constante $f_c : \{0, 1\}^3 \rightarrow \{0, 1\}$ tal que $f_c(x) = 1$ para qualquer $x \in \{0, 7\}$, cuja Tabela 2.1 relaciona os valores de saída da função para as possíveis entradas, e a Figura 2.5 mostra uma simulação da operação oracular, que implementa a função $f_c(x)$, utilizando-se portas lógicas quânticas.

Assim, equipando o computador quântico com a operação oracular, e implementando o algoritmo, conforme mostrado na Figura 2.6, obtemos os resultados, esquematizados no histograma da Figura 2.7. Da análise deste, o resultado mais notório é o de que em $\approx 95\%$ dos experimentos encontramos como saída do algoritmo o estado $|x_2 x_1 x_0\rangle = |000\rangle$. Ainda, observamos a ocorrência de probabilidades não nulas para resultados não esperados, relacionadas aos erros intrínsecos ao computador quântico, conforme mencionado ao final da Seção 2.2. A partir do exame destes resulta-

Tabela 2.1: Tabela verdade da função constante $f_c(x)$, com as possíveis entradas (em representação decimal no primeiro bloco, e em representação binária, no segundo bloco) com os respectivos valores da função.

Entrada				Saída
x	x_2	x_1	x_0	$f_c(x)$
0	0	0	0	1
1	0	0	1	1
2	0	1	0	1
3	0	1	1	1
4	1	0	0	1
5	1	0	1	1
6	1	1	0	1
7	1	1	1	1

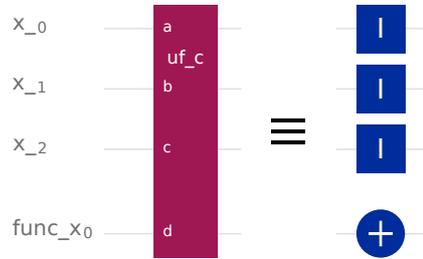


Figura 2.5: Simulação do mecanismo interno da operação U_f para a função constante $f_c(x)$ selecionada. A operação, definida a partir das portas lógicas quânticas mostradas, implementa a função $f_c(x)$.

Fonte: IBM Q [21] e editada pelos autores.

dos, assumindo certa condescendência com relação aos erros citados¹ e nos atendo à interpretação do resultado mais expressivo ($\approx 95\%$ de ocorrência do estado $|000\rangle$), podemos confirmar a ação do algoritmo de Deutsch na determinação de uma função constante, em apenas uma única medida.

2.6.2 Deutsch-Jozsa para uma função balanceada

Consideremos, agora, uma função balanceada $f_b : \{0, 1\}^3 \rightarrow \{0, 1\}$ tal que

$$f_b(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq 3, \\ 1 & \text{se } x > 3, \end{cases} \quad (2.35)$$

cuja Tabela 2.2 relaciona os valores de saída da função para as possíveis entradas, e a Figura 2.8 mostra uma simulação da operação oracular, que implementa a função $f_b(x)$, utilizando-se de portas lógicas quânticas.

¹Apesar de inevitáveis, os erros intrínsecos aos computadores quânticos podem ser minimizados. Protocolos de mitigação de erros podem ser encontrados na documentação fornecida pela plataforma [28, 31].

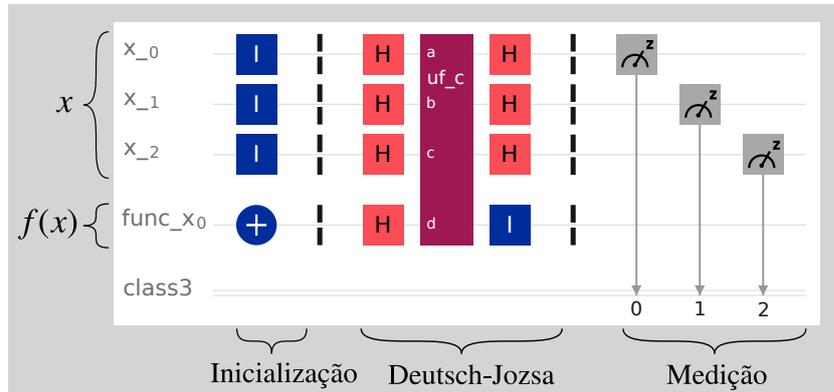


Figura 2.6: Sequência de operações lógicas necessária para a implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa. Na inicialização, os registros quânticos, configurados todos no estado $|0\rangle$ (padrão), são colocados no estado indicado na Eq. (2.25). Aqui, foi utilizada a operação oracular U_f simulada para implementar a função constante $f_c(x)$.

Fonte: IBM Q [21] e editada pelos autores.

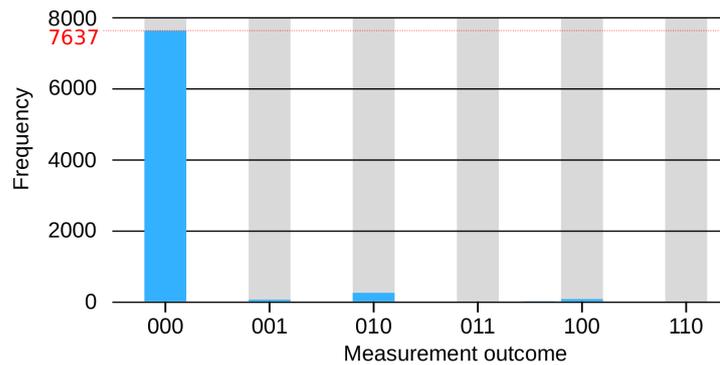


Figura 2.7: Histograma dos resultados da realização de 8000 experimentos, identicamente preparados no computador quântico IBMQ Manila, na execução do algoritmo de Deutsch-Jozsa para a função constante $f_c(x)$ simulada.

Fonte: IBM Q [21] e editada pelos autores.

Assim, equipando o computador quântico com a operação oracular e implementando o algoritmo, conforme mostrado na Figura 2.9, obtemos os resultados, tal como esquematizados no histograma da Figura 2.10. Novamente, percebemos que o resultado mais expressivo mostra a obtenção do estado final $|x_2 x_1 x_0\rangle = |100\rangle$ em $\approx 93\%$ dos 8000 experimentos, e que há ocorrência de probabilidades não nulas para resultados não esperados. Outra vez, sendo condescendentes com os erros intrínsecos, vemos que, como pelo menos um dos 3 qubits se encontra num estado diferente de $|0\rangle$, podemos atestar a performance do algoritmo de Deutsch na determinação de uma função balanceada em apenas uma única medida.

Tabela 2.2: Tabela verdade da função balanceada $f_b(x)$ com as possíveis entradas (em representação decimal no primeiro bloco e em representação binária no segundo bloco) e com os respectivos valores da função, explicitados no terceiro bloco.

Entrada				Saída
x	x_2	x_1	x_0	$f_b(x)$
0	0	0	0	0
1	0	0	1	0
2	0	1	0	0
3	0	1	1	0
4	1	0	0	1
5	1	0	1	1
6	1	1	0	1
7	1	1	1	1

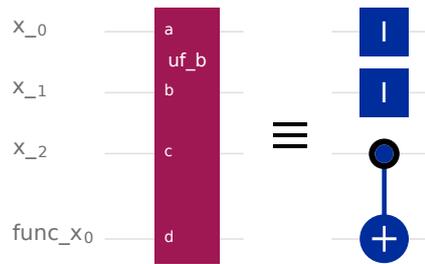


Figura 2.8: Simulação do mecanismo interno da operação U_f para a função balanceada $f_b(x)$ selecionada. A operação, definida a partir das portas lógicas quânticas mostradas, implementa a função $f_b(x)$.

Fonte: IBM Q [21] e editada pelos autores.

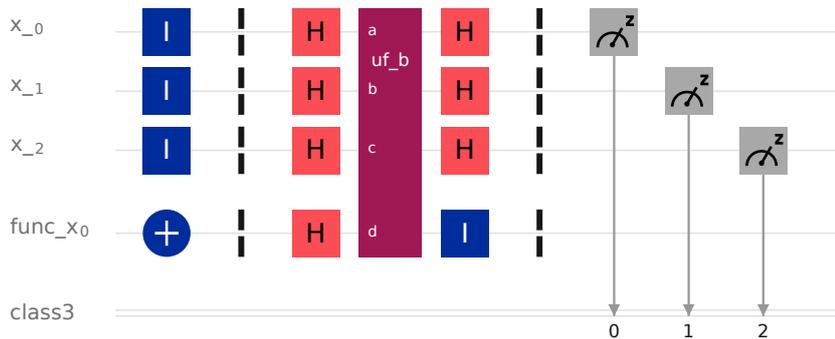


Figura 2.9: Esquema análogo ao da Figura 2.6, com as operações lógicas necessárias para a implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa, utilizando, aqui, a operação oracular U_f simulada para implementar a função balanceada $f_b(x)$.

Fonte: IBM Q [21] e editada pelos autores.

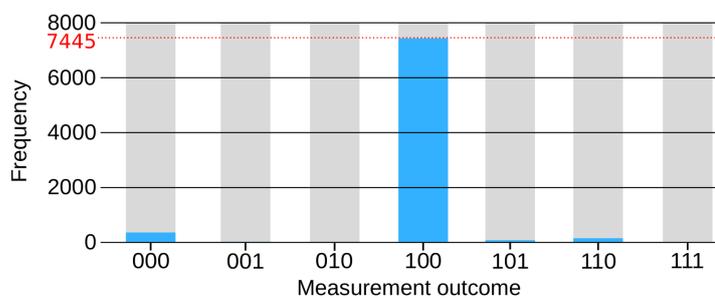


Figura 2.10: Histograma dos resultados da realização de 8000 experimentos, identicamente preparados no computador quântico IBMQ Manila, na execução do algoritmo de Deutsch-Jozsa para a função balanceada $f_b(x)$ simulada.

Fonte: IBM Q [21] e editada pelos autores.

2.7 Intermissão: considerações até aqui e motivação para os próximos capítulos

Neste capítulo foram introduzidos os fundamentos e aspectos básicos da computação quântica, dando como exemplos os algoritmos de Deutsch e Deutsch-Jozsa do ponto de vista tanto teórico, apresentando seu desenvolvimento formal, quanto experimental, a partir da implementação prática nos computadores quânticos da IBM disponíveis gratuitamente na plataforma IBM Quantum Experience. Deste modo, agora estamos em posição de colocar em suspeição certos aspectos e sutilezas relativas não só aos algoritmos apresentados aqui, mas também a uma grande parcela dos principais e mais conhecidos algoritmos quânticos em geral.

O primeiro questionamento, apresentado de maneira tão capciosa quanto provocativa na Seção 2.4, diz respeito à utilidade dos algoritmos quânticos, em especial do algoritmo de Deutsch-Jozsa, na solução prática de problemas, o que de um modo geral seria o principal fomento à investigação destes. Apesar de ser oportuno (e tentador) colocar à prova a finalidade prática deste algoritmo (ou mesmo de qualquer outro), a única resposta prudente que nos cabe aqui é a de que, no contexto em que foi introduzido, é possível inferir apenas que este não exibiu um fim em si mesmo, mas sim, o propósito de talvez servir como parte de algum processo computacional, ou mesmo como prova de princípios, ou seja, mostrar a eficiência de um computador quântico numa circunstância específica.

Entretanto, a garantia dessa eficiência para o algoritmo em questão requer que o computador quântico esteja equipado com algum operador oracular pertinente ao problema. De certa forma, essa exigência geral dos algoritmos quânticos de consulta camufla parte do impasse presente na tarefa de obter o domínio completo de sua complexidade e de atribuir seu valor prático. Isto, pois a responsabilidade do entendimento pleno do problema é transferida totalmente a um agente desconhecido, dependente do problema em questão, e cuja existência é assumida a priori. Do ponto de vista pragmático, a construção deste instrumento envolve a determinação de aspectos elementares do problema como um todo, e a elaboração de um mecanismo que armazene e transfira tais informações ao computador quântico de forma tão eficiente quanto se exija. Nesse sentido, existem propostas a respeito da necessidade de utilização de uma memória de acesso rápido quântica, ou QRAM (*Quantum Rapid Access Memory*), para implementação destas operações de “caixa preta” e a busca por arquiteturas de QRAM que sejam eficientes na realização do processo almejado [35–37]. Ainda, dentre os pivôs que motivam essa busca, além dos algoritmos quânticos de consulta mais conhecidos como o de Deutsch-Jozsa, de Shor e o de Grover [38, 39], cabe citar alguns algoritmos no campo de *quantum machine learning* [15, 16] e para preparação de estados iniciais [40–43].

Ademais, essas colocações sobre a operação oracular, incluindo a forma como a definimos e a implementamos neste trabalho, traz à tona um aspecto de extrema relevância e cuja pertinência envolve também os principais algoritmos mencionados anteriormente: as operações multi-qubits. Da observação das Figuras 2.6 e 2.9 notamos que o mecanismo interno do operador oráculo não somente é arbitrário e dependente do problema em questão, como também é assumido ser de

tal forma que age de maneira simultânea nos 4 qubits do sistema. Nesse contexto, portas lógicas quânticas que atuem em 2 ou mais qubits são uma demanda frequente não só em operadores oráculo, mas também em parte dos principais e mais conhecidos algoritmos quânticos, como o de inversão de matrizes [14], além dos anteriormente citados. No entanto, conforme mencionado na Seção 1, os dispositivos quânticos atuais e baseados em computação quântica por portas se valem das portas lógicas quânticas universais de 1 ou 2 qubits, pertencentes ao grupo de Clifford [8], para a implementação aproximada de portas lógicas quânticas multi-qubit. Tal fato foi exposto na Seção 2.2 em que foi apresentado na Figura 2.3 a topologia do processador de um dos computadores quânticos da IBM baseado em dispositivos supercondutores, a conectividade entre seus pares de qubits, e o erro associado à implementação destas portas lógicas universais. Logo, a implementação de todo e qualquer algoritmo nesses dispositivos requer, inevitavelmente, a decomposição das operações multi-qubit.

No que diz respeito à complexidade dos algoritmos quânticos, relacionada ao número de operações executadas, o fato de que para uma única porta lógica de n qubits são exigidas, em sua decomposição, da ordem de $O(n^2)$ operações de até 2 qubits [8], coloca à prova a eficiência efetiva dos algoritmos quânticos que demandam tais operações. Portanto, é justificável assumirmos que, dentre os aspectos mais fundamentais da computação quântica e relativos à sua execução prática em dispositivos físicos reais, a realização de portas lógicas de 1 ou 2 qubits ocupa uma posição central nas questões dignas de uma investigação aprofundada. Assim, tendo em vista todas as considerações feitas nesta seção, é apropriado notar que a mera busca por uma implementação e aplicação práticas de um algoritmo simples colocou em evidência a importância e a necessidade de se investigar os elementos mais básicos referentes à computação quântica. Em especial, motivados por tais colocações, o estudo teórico e análise de interações entre dois qubits em dispositivos supercondutores terão destaque neste trabalho a partir daqui.

Parte II

Estudo Teórico da Interação Qubit-Qubit

DINÂMICAS EFETIVAS PARA HAMILTONIANOS OSCILANTES NO TEMPO

Este capítulo apresentará o desenvolvimento formal de um método aproximativo baseado em médias temporais, originalmente exposto em [17], com o objetivo de complementar a análise numérica das interações qubit-qubit, em sistemas de dispositivos supercondutores, que será feita no Capítulo 4. Tanto a motivação quanto a utilidade prática da abordagem do problema a partir da aplicação deste método serão elucidados e devidamente justificados ao longo deste capítulo.

3.1 *Avatares* da dinâmica e o parâmetro tempo

A análise da dinâmica de um sistema quântico envolve a investigação da forma com que determinados aspectos desse sistema – as propriedades observáveis – evoluem e se modificam em função do tempo, com a descrição dessa evolução podendo ser representada, ou “encarnada”, em diferentes *avatares*¹, de modo que os atributos de agente “promotor” e “padeedor” da dinâmica são relativos às diferentes representações. Conforme mencionado no Capítulo 1, duas destas foram formuladas de maneira independente e contemporânea (década de 1920) por Heisenberg e Schrödinger [2, 3].

Na primeira, as propriedades observáveis do sistema quântico são representadas por operadores (matrizes) A que evoluem segundo a equação de movimento de Heisenberg

$$i\hbar \frac{dA(t)}{dt} = [A(t), \mathcal{H}], \quad (3.1)$$

em que i é a unidade imaginária, \hbar é a constante de Planck reduzida e \mathcal{H} é o operador hamiltoniano, que rege a dinâmica do sistema [46].

Na segunda, o sistema quântico fechado é representado por um vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ contido no *espaço de Hilbert*, isolado e não suscetível a efeitos de dissipação e decoerência, conforme mencionado na Seção 2.1.1, e sua evolução é regida pela equação de Schrödinger [46]

$$\mathcal{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle. \quad (3.2)$$

Aqui, tendo em vista a interpretação probabilística do vetor de onda $|\psi(t)\rangle$ com a exigência de sua norma unitária em cada instante de tempo, da mesma forma introduzida em (2.8), temos que

$$\|\psi(t_0)\|^2 = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \|\psi(t)\|^2, \quad (3.3)$$

para t_0 o instante de tempo inicial, possibilitando a definição da evolução temporal desse vetor de estado a partir da aplicação de uma certa operação unitária, da forma

$$\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \cdot \mathcal{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle \quad (3.4)$$

$$\implies |\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (3.5)$$

em que $\mathcal{U}(t, t_0)$ é o operador de evolução temporal que leva o estado $|\psi(t_0)\rangle$ ao estado $|\psi(t)\rangle$, com $\mathcal{U}(t, t_0) \cdot \mathcal{U}(t, t_0)^\dagger = \mathbf{I}$, e $\mathcal{U}(t = t_0, t_0) = \mathbf{I}$, para \mathbf{I} a matriz identidade. A substituição da Eq. (3.5) na Eq. (3.2) leva a

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot \mathcal{U}(t, t_0), \quad (3.6)$$

¹A palavra *Avatar*, com origem do sânscrito, *avatāra*, significa “descida”. No contexto religioso, *Avatar* é a manifestação corporal de um Deus na Terra, a reencarnação de um Ser imortal supremo na forma humana ou animal. Especialmente no hinduísmo, representa a reencarnação da divindade *Vixnu*, um dos principais deuses do panteão Hindu e responsável pela sustentação do Universo, que vem ao mundo nas suas diversas formas, ou *avatares* [44, 45]. O termo *Avatar* é utilizado na referência [46], como uma analogia à sua utilização original, para designar a maneira como a teoria quântica, com manifestação física primordial à concepção humana da realidade – “Ser supremo”, que habita “o panteão criado pela Mãe Natureza” – pode ser representada – “encarnada” ou “transfigurada” – em termos de diferentes formas da linguagem descritiva, ou “mecânica”, inerente e limitada à capacidade do intelecto humano.

que é a equação diferencial matricial para tal operador de evolução temporal. Dado (3.6), a solução da equação de Heisenberg (3.1) fica

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \cdot \mathbf{A}(t_0) \cdot \mathbf{U}(t, t_0), \quad (3.7)$$

em que $\mathbf{A}(t_0)$ representa a propriedade observável do sistema no instante inicial. A partir da comparação entre as representações da dinâmica de um sistema quântico apresentadas, vemos que, na representação de Heisenberg, os observáveis, dados em termos de matrizes $\mathbf{A}(t)$, são os agentes dinâmicos, com os vetores de estado constantes no tempo, enquanto na representação de Schrödinger o ente passível da evolução é o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$, sendo os observáveis constantes. Deste modo, o valor esperado – objeto decorrente da interpretação estatística da teoria quântica – para uma medição do observável \mathbf{A}

$$\langle \mathbf{A} \rangle(t) = \underbrace{\langle \psi(t_0) | \mathbf{A}(t) | \psi(t_0) \rangle}_{\text{Heisenberg}} = \langle \psi(t_0) | \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \cdot \mathbf{A}(t_0) \cdot \mathbf{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \underbrace{\langle \psi(t) | \mathbf{A}(t_0) | \psi(t) \rangle}_{\text{Schrödinger}} \quad (3.8)$$

é independente de representação. Para ambas, tal evolução se dá através da aplicação do operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t, t_0)$, cuja determinação, dado um operador hamiltoniano \mathcal{H} que governa a dinâmica do sistema, se faz a partir da Eq. (3.6).

Ainda podemos introduzir uma importante representação da mecânica quântica, por virtude de sua conveniente utilidade no decorrer deste capítulo, que se mostra, de certa forma, intermediária às representações de Schrödinger e de Heisenberg, uma vez que a atribuição de “agente dinâmico” do sistema é compartilhada entre os vetores de estado e os observáveis. Supondo então um problema em que o hamiltoniano do sistema é separável na forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)}, \quad (3.9)$$

em que $\mathcal{H}^{(0)}$ é diagonal na base dos autoestados $|n\rangle$ da energia, sem dependência temporal explícita, e cujo os autovalores de energia E_n seguem da equação de autovalor – também conhecida como *equação de Schrödinger independente do tempo* [20] – dada por

$$\mathcal{H}^{(0)} |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (3.10)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$, e $\mathcal{H}^{(1)}$ é algum potencial de interação. Assim, podemos definir um operador evolução $\mathbf{U}^{(0)}(t, t_0)$ obtido a partir da solução da Eq. (3.6) para o problema associado somente a $\mathcal{H}^{(0)}$,

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}^{(0)}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}^{(0)} \cdot \mathbf{U}^{(0)}(t, t_0), \quad (3.11)$$

que pode ser escrito diretamente como

$$\mathbf{U}^{(0)}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathcal{H}^{(0)}}, \quad (3.12)$$

posto que $\mathcal{H}^{(0)}$ não depende explicitamente do tempo, conforme demonstrado no Apêndice A.2. Inserindo então a relação de identidade $\mathcal{U}^{(0)}(t, t_0) \cdot \mathcal{U}^{(0)\dagger}(t, t_0) = \mathbf{I}$ nas Eqs. (3.1) e (3.2) (vide Apêndice B.3 para maior detalhamento das passagens algébricas) e definindo

$$\mathcal{H}_I(t) = \mathcal{U}^{(0)\dagger}(t, t_0) \cdot \mathcal{H}^{(1)} \cdot \mathcal{U}^{(0)}(t, t_0), \quad (3.13)$$

$$|\psi(t)\rangle_I = \mathcal{U}^{(0)\dagger}(t, t_0) |\psi(t)\rangle, \quad (3.14)$$

obtemos

$$\mathcal{H}_I(t) |\psi(t)\rangle_I = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I, \quad (3.15)$$

e,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{A}_I(t) = [\mathbf{A}_I(t), \mathcal{H}^{(0)}], \quad (3.16)$$

com $\mathbf{A}_I(t) = \mathcal{U}^{(0)\dagger}(t, t_0) \cdot \mathbf{A}(t_0) \cdot \mathcal{U}^{(0)}(t, t_0)$. Essa nova representação é conhecida como *Representação de interação* exatamente pelo fato de que a transformação introduzida pelo operador $\mathcal{U}^{(0)}(t, t_0)$ é semelhante a uma mudança de referencial na análise do processo dinâmico, em que, neste contexto, o novo vetor de estado $|\psi(t)\rangle_I$ do sistema tem sua evolução, com descrição semelhante à de Schrödinger, governada pelo termo $\mathcal{H}_I(t)$ referente ao potencial de interação $\mathcal{H}^{(1)}$, enquanto o termo $\mathcal{H}^{(0)}$ do hamiltoniano se torna responsável apenas pela introdução de uma fase dinâmica. Nesse mesmo sentido, os novos observáveis físicos $\mathbf{A}_I(t)$ evoluem segundo uma representação semelhante à de Heisenberg mas com controle relacionado apenas ao hamiltoniano $\mathcal{H}^{(0)}$.

Uma equiparação das diferentes representações – ou *avatares* – da dinâmica de um sistema quântico indica que as mesmas podem se revelar como maneiras distintas, porém equivalentes, de se descrever quais entes físicos pertinentes ao problema se alteram com relação ao parâmetro tempo. Assim, fica notório que, no contexto construído até aqui, cada uma destas apresenta um certo tipo de conveniência com relação às quantidades físicas que se deseja realçar ou analisar a partir da solução das equações de movimento. Entretanto, na grande maioria dos problemas em mecânica quântica, a solução exata dessas equações, nas diferentes representações, se torna inviável, quando não impossível, tornando conveniente a introdução de métodos aproximativos em tais casos. Uma equiparação das diferentes representações – ou *avatares* – da dinâmica de um sistema quântico indica que as mesmas podem se revelar como maneiras distintas, porém equivalentes, de se descrever quais entes físicos pertinentes ao problema se alteram com relação ao parâmetro tempo. Assim, fica notório que, no contexto construído até aqui, cada uma destas apresenta um certo tipo de conveniência com relação às quantidades físicas que se deseja realçar ou analisar a partir da solução das equações de movimento. Entretanto, na grande maioria dos problemas em mecânica quântica a solução exata destas equações, nas diferentes representações, se torna inviável, quando não impossível, tornando conveniente a introdução de métodos aproximativos em tais casos.

Ainda, é importante enfatizar que a variável tempo para este tipo de problema, apesar de não constituir um observável físico no sentido proposto na construção da teoria, não só é inerente ao

estudo da dinâmica como também é um parâmetro passível de uma investigação mais aprofundada. De fato, aspectos distintos do problema podem se manifestar de acordo com a perspectiva com que se examina os entes do sistema com relação a este parâmetro, em seus diferentes domínios e escalas consideradas. Notadamente, quando evocamos a representação de interação, as Eqs. (3.15) e (3.16) sugerem uma distinção entre os elementos da dinâmica que evoluem segundo a escala de tempo determinada por $\mathcal{H}^{(0)}$ daqueles que são afetados numa escala de tempo distinta introduzida pelo potencial de interação $\mathcal{H}^{(1)}$.

Nessa lógica, posto que o operador hamiltoniano resume em si todos os elementos intrínsecos à dinâmica de um sistema, é legítimo que a inclusão de um método aproximativo que compreenda a influência dos aspectos do parâmetro tempo – em especial, as escalas temporais específicas – no processo dinâmico seja estabelecida a partir de modificações estruturais em tal operador. Conforme será mostrado no decorrer deste trabalho, no que concerne a dependência temporal de \mathcal{H} – que vincula a integração das equações de movimento, na variável tempo, à análise de um sistema – a aplicação de tal método aproximativo não apenas traz simplificações ao problema, como também evidencia aspectos qualitativos e termos que efetivamente contribuem para a dinâmica.

Dentre as categorias dos procedimentos aproximativos, o método de médias temporais, com aplicação já consolidada em certos problemas em mecânica clássica [47] e em sistemas dinâmicos [48], detém atributos que, em essência, vão de encontro ao que se propõem – investigação das consequências geradas pela ponderação das diferentes escalas temporais no processo dinâmico – sendo, portanto, um candidato promissor para assumir, neste trabalho, o protagonismo enquanto promotor das modificações estruturais e simplificações mencionadas. Logo, com essa perspectiva em mente, esta seção será destinada à apresentação e desenvolvimento de um mecanismo, introduzido em [17], de obtenção da dinâmica efetiva de um sistema com base na inclusão de um método de médias temporais, tendo como sujeito da análise hamiltonianos com forma funcional de acordo com a Eq. (3.9), que, na representação de interação, apresentam oscilação temporal nas quais as escalas de tempo com relação ao $\mathcal{H}^{(0)}$ – problema resolvível em termos de autoenergias – e com relação ao $\mathcal{H}^{(1)}$ – potencial de interação cuja influência, determinante para a dinâmica, se deseja analisar – se manifestam na evolução dos entes dinâmicos de forma categoricamente distintas.

3.2 Obtenção do método

De início, consideremos que a média temporal de um dado operador $\mathbf{O} = \mathbf{O}(t)$ possa ser introduzida de maneira formal como

$$\overline{\mathbf{O}(t)} = [f * \mathbf{O}](t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') \mathbf{O}(t'), \quad (3.17)$$

denotando a convolução do operador $\mathbf{O}(t)$ com uma certa função $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt' f(t-t') = 1. \quad (3.18)$$

Tal função é responsável por fazer a ponderação da escala temporal na qual se analisa a dinâmica, e representa, neste contexto, uma generalização de funções com propriedades de *filtragem* já conhecidas e com ampla utilização, como por exemplo a *delta de Dirac* $\delta(t-t')$ ou simplesmente a função constante num dado intervalo

$$f(t) = \begin{cases} \frac{1}{T}, & \text{se } t \in [0, T], \\ 0, & \text{se } t \notin [0, T]. \end{cases}$$

Supondo então um sistema cujo hamiltoniano possa ser separado conforme a Eq. (3.9), o que se busca é, dado o problema conhecido em termos das autoenergias e autoestados de $\mathcal{H}^{(0)}$, simplificar a investigação da influência do termo de interação $\mathcal{H}^{(1)}$ na evolução do sistema. Em particular, quando o ente sob investigação é o vetor de estado, a representação de interação, conforme mostrado na Seção 3.1 anterior, se mostra conveniente por delegar a evolução deste a $\mathcal{H}^{(1)}$, evidenciando os efeitos introduzidos por este termo. Dada a equação de movimento (3.15) que descreve a evolução do vetor de estado nesta representação, podemos introduzir, de forma análoga ao que foi feito em (3.6), um operador de evolução $\mathcal{U}(t, t_0)$ que leva $|\psi(t_0)\rangle_I$ a $|\psi(t)\rangle_I$, sendo determinado pela equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}(t, t_0), \quad (3.19)$$

com $\mathcal{H}_I(t)$ dado por (3.13). Assim, a aplicação da média temporal, definida por (3.17), na Eq. (3.19) leva à

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\mathcal{U}(t, t_0)} = -\frac{i}{\hbar} \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}(t, t_0)}. \quad (3.20)$$

Introduzindo então a igualdade $\frac{\partial}{\partial t} \overline{\mathcal{U}(t, t_0)} = \frac{\partial}{\partial t} \overline{\mathcal{U}(t, t_0)}$, demonstrada no Apêndice A.1, a Eq. (3.20) fica

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\mathcal{U}(t, t_0)} = -\frac{i}{\hbar} \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}(t, t_0)}. \quad (3.21)$$

O passo seguinte consiste em, através da comparação entre as Eqs. (3.19) e (3.21), associar um hamiltoniano efetivo que governa a dinâmica para o operador evolução convoluído $\overline{\mathcal{U}(t, t_0)}$, de modo que, para tal operador, a Equação de Schrödinger fica

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\mathcal{U}(t, t_0)} = -\frac{i}{\hbar} \overline{\mathcal{H}_{\text{eff}}(t) \cdot \mathcal{U}(t, t_0)}. \quad (3.22)$$

Essa passagem levanta a hipótese de que, ao considerarmos os efeitos, em média, de uma evolução temporal resultante da aplicação do operador $\overline{\mathcal{U}(t, t_0)}$, existe um certo hamiltoniano $\mathcal{H}_{\text{eff}}(t)$ que governa essa dinâmica efetiva e que resume em si todos esses efeitos. Assim, das Eqs. (3.21) e (3.22), estabelecemos a igualdade

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(t) \cdot \overline{\mathcal{U}(t, t_0)} = \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}(t, t_0)}. \quad (3.23)$$

Aqui, uma das formas de obtenção do hamiltoniano efetivo $\mathcal{H}_{\text{eff}}(t)$ é por meio da realização de uma expansão perturbativa da Eq. (3.23) considerando-se a representação em série de Dyson do operador evolução temporal $\mathcal{U}(t, t_0)$ (vide no Apêndice A.2), de modo que, tomando os termos até primeira ordem, teremos

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(t) = \overline{\mathcal{H}_I(t)} + \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_1(t, t_0)} - \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_1(t, t_0)}}, \quad (3.24)$$

em que definimos

$$\mathcal{U}_1(t, t_0) \equiv \mathcal{T} \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}_I(t'), \quad (3.25)$$

conforme demonstrado no Apêndice B.4. Antes de darmos prosseguimento, é importante ressaltar que, embora $\mathcal{U}(t, t_0)$ seja unitário, $\overline{\mathcal{U}(t, t_0)}$, em geral, não o é. Isso faz com que a suposição da Eq. (3.22) seja negligente no que diz respeito à imposição de uma condição explícita de exigência da hermiticidade de $\mathcal{H}_{\text{eff}}(t)$. Deste modo, a troca

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(t) \rightarrow \frac{1}{2} \left[\mathcal{H}_{\text{eff}}(t) + \mathcal{H}_{\text{eff}}(t)^\dagger \right], \quad (3.26)$$

para que se tome somente a parte hermiteana desse operador, se faz necessária, implicando em

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(t) = \frac{1}{2} \left\{ \overline{\mathcal{H}_I(t)} + \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_1(t, t_0)} - \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_1(t, t_0)}} + \text{h.c.} \right\}, \quad (3.27)$$

em que “h.c.” simboliza o hermiteano conjugado do primeiro termo¹. Dado que $\overline{\mathcal{O}(t)}^\dagger = \overline{\mathcal{O}^\dagger(t)}$, para um operador $\mathcal{O}(t)$ qualquer, como mostrado no Apêndice A.1, e também que $\mathcal{U}_1^\dagger(t, t_0) = -\mathcal{U}_1(t, t_0)$, com base na Eq. (3.25), o hermiteano conjugado do termo em (3.27) fica

$$\left[\overline{\mathcal{H}_I(t)} + \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_1(t, t_0)} - \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_1(t, t_0)}} \right]^\dagger = \overline{\mathcal{H}_I(t)} - \overline{\mathcal{U}_1(t, t_0) \cdot \mathcal{H}_I(t)} + \overline{\overline{\mathcal{U}_1(t, t_0)} \cdot \mathcal{H}_I(t)}. \quad (3.28)$$

Assim, substituindo (3.28) em (3.27) temos, finalmente,

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(t) = \overline{\mathcal{H}_I(t)} + \frac{1}{2} \left\{ \left[\overline{\mathcal{H}_I(t), \mathcal{U}_1(t, t_0)} \right] - \left[\overline{\mathcal{H}_I(t), \overline{\mathcal{U}_1(t, t_0)}} \right] \right\} \quad (3.29)$$

a equação para obtenção do hamiltoniano efetivo para o termo de interação do sistema $\mathcal{H}_I(t)$, na representação de interação, que engloba os efeitos médios relacionados a tal termo.

¹Aqui, cabe mencionar que, conforme demonstrado no Apêndice A.5, a imposição da unitariedade do operador de evolução $\mathcal{U}(t, t_0)$ na equação de movimento Eq. (3.19) (ou mesmo nas análogas (3.6) e (3.11), apresentadas anteriormente) garante a manutenção da hermiticidade do operador hamiltoniano. Assim, na referência [17] propõe-se o reestabelecimento desta hermiteanidade a partir da operação de eliminação direta das partes não hermiteanas de \mathcal{H}_{eff} , da forma (3.26). Tal operação, apesar de justificável, se mostra um tanto quanto *ad-hoc*. Este problema é contornado com maior rigor na referência [49] utilizando, na dedução da dinâmica efetiva, o formalismo de matriz densidade.

3.3 Hamiltonianos com dependência temporal harmônica

Após obtida a Eq. (3.29), o que se busca agora é a sua aplicação para grupos de operadores hamiltonianos cujos termos $\mathcal{H}_I(t)$ e $\mathcal{U}_1(t, t_0)$ apresentam uma forma funcional mais explícita. Em especial, neste trabalho, damos enfoque ao grupo de hamiltonianos que apresentam rápidas oscilações temporais. Seja, então, $\mathcal{H}_I(t)$ um hamiltoniano que na representação de interação assume a forma

$$\mathcal{H}_I(t) = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger + \sum_{i \geq 1} \left[e^{i\omega_i t} \mathbf{A}_i + e^{-i\omega_i t} \mathbf{A}_i^\dagger \right], \quad (3.30)$$

em que definimos $t_0 = 0$, sendo \mathbf{A}_i operadores quaisquer com elementos constantes, e $\omega_i > 0$, para $i \geq 1$, e $\omega_i \neq \omega_j$, para $i \neq j$, as frequências de oscilação.

Aqui, apesar de laboriosa, a etapa do cálculo dos termos da Eq. (3.29) para o hamiltoniano $\mathcal{H}_I(t)$ da Eq. (3.30) se mostra extremamente relevante por trazer à tona, com certo grau de sutileza, uma interpretação física bastante significativa com relação ao método aproximativo e sua finalidade. Por isso, nesta seção nos ateremos apenas aos resultados principais, destinando os detalhes das passagens algébricas para o Apêndice B.5.

Aplicando (3.17) para o $\mathcal{H}_I(t)$ da Eq. (3.30), temos que

$$\overline{\mathcal{H}_I(t)} = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger + \sum_{i \geq 1} \left[\mathcal{S}_i(t) \mathbf{A}_i + \mathcal{S}_i^*(t) \mathbf{A}_i^\dagger \right], \quad (3.31)$$

em que definimos

$$\mathcal{S}_i(t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') e^{i\omega_i t'}. \quad (3.32)$$

Aqui, antes de prosseguirmos, é interessante que analisemos a integral representada pelo termo $\mathcal{S}_i(t)$, a fim de assimilarmos o raciocínio envolvido, também, no cálculo dos demais termos. Observando-se a Eq. (3.32), percebemos que o cálculo direto de $\mathcal{S}_i(t)$ está vinculado ao conhecimento da forma funcional explícita da função $f(t-t')$. Contudo, é possível nos embasar nas propriedades gerais dessa função para prosseguirmos com a análise do comportamento da integral. De início, havíamos assumido que tal função seria responsável por “filtrar” termos que oscilam com uma frequência muito alta com relação a uma certa escala de tempo, a ser estabelecida. Aqui, retomando as Eqs. (3.9) e (3.13), vemos que os operadores \mathbf{A}_i em (3.30), que correspondem a observáveis ligados a um certo potencial $\mathcal{H}^{(1)}$, têm, na representação de interação, a evolução guiada pelo termo $\mathcal{H}^{(0)}$ do hamiltoniano completo do sistema, uma vez que

$$e^{i\omega_i t} \mathbf{A}_i = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}^{(0)} t} \mathbf{A}_i e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}^{(0)} t} = \{\mathbf{A}_i\}_I(t) \quad (3.33)$$

é a solução da equação de movimento de Heisenberg (3.16) para o observável \mathbf{A}_i , como definido na Seção 3.1. Da forma como definida, então, vemos que essa evolução é do tipo oscilatória com período $\sim \omega_i^{-1}$, com $\omega_i \neq 0$ para $i \geq 1$. Ainda, levando-se em consideração a relação de incerteza energia-tempo – vide Apêndice A.3 – podemos assumir que, a tal observável, está associada uma

escala de tempo típica, τ_{A_i} , para a qual seu valor médio $\langle A_i \rangle$ sofre variação da ordem do seu desvio quadrático médio $\langle \sigma_{A_i} \rangle$. Essa escala de tempo tem como limite inferior um certo τ , definido como

$$\tau \equiv \frac{\hbar}{2 \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle}, \quad (3.34)$$

de modo que

$$\tau_{A_i} \geq \tau = \frac{\hbar}{2 \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle}, \quad (3.35)$$

sendo $\langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle$ o desvio padrão para o operador $\mathcal{H}^{(1)}$, mensurado com relação à base $\{|n\rangle\}$ de autoestados do operador $\mathcal{H}^{(0)}$, que governa a evolução dos observáveis A_i na representação de interação. Neste contexto, portanto, se τ_{A_i} é muito superior a $\sim \omega_i^{-1}$, temos que o termo oscilante $e^{i\omega_i t} A_i$ de \mathcal{H}_I terá, em média, pouca contribuição na dinâmica. Em termos práticos, podemos introduzir em (3.32) uma mudança do tipo $t' = \tau_{A_i} u$, de modo a reescalar a variável de integração levando-se em conta a escala de tempo específica associada ao observável A_i . Assim, temos que

$$\mathcal{J}_i(t) = \tau_{A_i} \int_{-\infty}^{+\infty} du f(t - \tau_{A_i} u) e^{i(\omega_i \tau_{A_i}) u}. \quad (3.36)$$

Ainda, a condição (3.18) faz com que a função $f(t - t') \equiv f(t - \tau_{A_i} u)$ seja integrável em todo seu domínio, fazendo com que, pelo *lema de Riemann-Lebesgue* [50, 51], tenhamos

$$\lim_{\omega_i \tau_{A_i} \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} du f(t - \tau_{A_i} u) e^{i(\omega_i \tau_{A_i}) u} = 0 \quad \implies \quad \lim_{\omega_i \tau_{A_i} \rightarrow \infty} \mathcal{J}_i(t) = 0. \quad (3.37)$$

Nesse sentido, levando-se em conta (3.34) e (3.35) e que $\omega_i \tau \gg 1 \implies \omega_i \tau_{A_i} \gg 1$, é legítimo que tomemos o resultado

$$\mathcal{J}_i(t) \Big|_{\omega_i \tau \gg 1} \approx \mathcal{J}_i(t) \Big|_{\omega_i \tau_{A_i} \gg 1} \approx 0 \quad (3.38)$$

como uma boa aproximação para os termos que oscilam rapidamente, com certa frequência ω_i tal que

$$\omega_i \tau \gg 1 \quad \implies \quad \frac{\hbar \omega_i}{2 \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle} \gg 1. \quad (3.39)$$

Portanto, respeitada a condição (3.39) acima, a Eq. (3.31) fica

$$\overline{\mathcal{H}_I(t)} = A_0 + A_0^\dagger. \quad (3.40)$$

Prosseguindo com o cálculo dos termos em (3.29), temos agora, segundo a Eq. (B.34), que

$$\mathcal{U}_1(t) = \sum_{i \geq 1} \left[\frac{1 - e^{i\omega_i t}}{\hbar \omega_i} A_i - \frac{1 - e^{-i\omega_i t}}{\hbar \omega_i} A_i^\dagger \right] + (A_0 + A_0^\dagger) t, \quad (3.41)$$

de modo que a consequente aplicação de (3.17) leva à equação

$$\begin{aligned}\overline{\mathcal{U}_1(t)} &= \sum_{i \geq 1} \left(\frac{1 - \mathcal{I}_i(t)}{\hbar \omega_i} \mathbf{A}_i - \frac{1 - \mathcal{I}_i^*(t)}{\hbar \omega_i} \mathbf{A}_i^\dagger \right) - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) \bar{t} \\ &= \sum_{i \geq 1} \frac{1}{\hbar \omega_i} (\mathbf{A}_i - \mathbf{A}_i^\dagger) - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) \bar{t},\end{aligned}\quad (3.42)$$

em que na última passagem agregou-se o mesmo raciocínio utilizado para o cálculo do resultado (3.38). Deste modo, a partir das Eqs. (3.40) e (3.42) teremos,

$$\left[\overline{\mathcal{H}_I(t)}, \overline{\mathcal{U}_1(t)} \right] = \sum_{i \geq 1} \frac{1}{\hbar \omega_i} \left[\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \mathbf{A}_i - \mathbf{A}_i^\dagger \right]. \quad (3.43)$$

Ainda, pelos mesmos procedimentos

$$\begin{aligned}\left[\overline{\mathcal{H}_I(t)}, \overline{\mathcal{U}_1(t)} \right] &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') [\mathcal{H}_I(t'), \mathcal{U}_1(t')] \\ &= \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} \frac{\mathcal{K}_{ij}(t)}{\hbar \omega_{ij}} \left[\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger \right] + \sum_{i \geq 1} \frac{1}{\hbar \omega_i} \left[\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \mathbf{A}_i - \mathbf{A}_i^\dagger \right],\end{aligned}\quad (3.44)$$

em que definimos

$$\mathcal{K}_{ij}(t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') e^{i(\omega_i - \omega_j)t'}, \quad (3.45)$$

e

$$\frac{1}{\omega_{ij}} \equiv \left(\frac{1}{\omega_i} + \frac{1}{\omega_j} \right). \quad (3.46)$$

Aqui, a análise da integral (3.45), apesar de empregar raciocínio similar ao utilizado na obtenção do resultado da Eq. (3.38), apresenta uma sutileza com relação às considerações a respeito do termo $(\omega_i - \omega_j)$ na exponencial. Muito embora já se tenha exigido que as frequências ω_i e ω_j , para $i, j \geq 1$, cumpram a condição (3.39), de maneira individual, a diferença entre elas torna a integração fortemente dependente de condições adicionais com relação a essas frequências. Assim, introduzindo a mudança de variável $t' = \tau u$, sendo τ definido por (3.34), temos

$$\mathcal{K}_{ij}(t) = \tau \int_{-\infty}^{+\infty} du f(t - \tau u) e^{i(\omega_i - \omega_j)\tau u} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } |\omega_i - \omega_j| \tau \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (3.47)$$

Por fim, substituindo as Eqs. (3.40), (3.43) e (3.44) na Eq. (3.29), temos como resultado

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} \frac{\mathcal{K}_{ij}(t)}{2\hbar \omega_{ij}} \left[\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger \right] + \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \quad (3.48)$$

o hamiltoniano efetivo da dinâmica para um hamiltoniano com dependência temporal oscilatória na representação de interação, conforme a Eq. (3.30), quando suas frequências de oscilação ω_i obedecem à condição (3.39). Neste trabalho, para os problemas adotados, é possível assumirmos que $|\omega_i - \omega_j| \tau$ será, também, ≥ 1 , para quaisquer $i, j > 1$, de modo que a troca do termo $\mathcal{K}_{ij}(t)$ pela

delta de Kronecker δ_{ij} se torna conveniente, do ponto de vista prático, fazendo com que a Eq. (3.48) seja reescrita como

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{i \geq 1} \frac{1}{\hbar \omega_i} [A_i, A_i^\dagger] + A_0 + A_0^\dagger. \quad (3.49)$$

Ainda, com o propósito de estender a condição (3.39) a todo o conjunto de frequências ω_i e todos os possíveis valores de $\langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle$ medidos na base de autoenergias, podemos, então, reescrevê-la como

$$\frac{\hbar}{2} \left(\frac{\min_{\forall i \geq 1} \omega_i}{\max_{\forall n=0,1,2,\dots} \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle} \right) \gg 1. \quad (3.50)$$

A relação (3.50) acima é um resultado central no que diz respeito à categorização do conjunto de problemas considerados bons candidatos para a análise via dinâmicas efetivas. Esta, estabelece nada mais do que uma condição formal para identificar e quantificar a distinção entre a influência das diferentes escalas de tempo presentes na evolução de um sistema físico¹, conforme mencionado na Seção 3.1.

¹Um resultado semelhante a (3.50) é obtido na referência [52], em um outro contexto, utilizando-se de argumentos diferentes. Nessa referência, ao ser avaliada a norma da diferença entre os operadores de evolução temporal, o real e o efetivo, é possível estabelecer um limite superior para o erro relacionado a essa diferença e, conseqüentemente, uma condição de validade para essa dinâmica efetiva representada por tal operador de evolução temporal.

3.4 Aplicação simples – Modelo de Rabi no regime fora da ressonância

No início deste capítulo mencionamos a respeito da relativa escassez de problemas em mecânica quântica cujas equações de movimento possam ser resolvidas exatamente, trazendo à tona a relevância dos métodos aproximativos. Isso, de certa forma, serviu como motivação para o desenvolvimento do método aproximativo, baseados em médias temporais, de dinâmicas efetivas para hamiltonianos oscilantes. Nesta seção, no entanto, iremos abordar um sistema em específico, que possui solução exata, como prova de princípio na aplicação do método de dinâmicas efetivas. O problema em questão se trata de um sistema de dois níveis sujeito à um potencial com oscilação sinusoidal cujo hamiltoniano, dado conforme a Eq. (3.9), é

$$\mathcal{H}(t) = \underbrace{\hbar\omega_0 |0\rangle\langle 0| + \hbar\omega_1 |1\rangle\langle 1|}_{\mathcal{H}^{(0)}} + \underbrace{\hbar g e^{i\omega t} |0\rangle\langle 1| + \hbar g e^{-i\omega t} |1\rangle\langle 0|}_{\mathcal{H}^{(1)}(t)}, \quad (3.51)$$

em que $\hbar\omega_0$ e $\hbar\omega_1$, com $\omega_0, \omega_1 > 0$, representam a energia dos estados fundamental, $|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}^T$, e excitado, $|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}^T$, respectivamente, e $g \in \mathbb{R}$ sendo um termo relacionado à intensidade do potencial, com $\omega > 0$ sua frequência de oscilação.

Aqui, cabe mencionar que esse problema pode ser interpretado como uma versão simplificada do *modelo de Rabi* [53] que, em sua aplicação mais conhecida, é utilizado para descrever um sistema de dois níveis (átomo com dois estados, spin eletrônico, spin nuclear, etc) em interação com a radiação eletromagnética clássica (campos elétrico e/ou magnético clássicos)¹. Sua solução exata em termos da evolução das populações dos níveis fundamental e excitado, em função do tempo, leva à conhecida *fórmula de Rabi* ou *ciclo de Rabi*. Uma discussão mais elaborada desta perspectiva do problema, principalmente no que diz respeito ao regime de ressonância entre as frequências de transição de níveis e oscilação da radiação (isto é, $\omega_{10} \equiv \omega_1 - \omega_0 \approx \omega$), é apresentada na referência [20]. Nesta seção, vamos nos ater à comparação das soluções exata e aproximada (via dinâmicas efetivas) para as autoenergias de $\mathcal{H}(t)$ no regime em que tal radiação é pouco intensa e oscila fora da ressonância com a frequência de transição de níveis.

A solução exata deste problema, em termos da obtenção das autoenergias de $\mathcal{H}(t)$, assumindo-se que este segue uma equação de autovalor conforme (3.10), é

$$\mathcal{H}(t) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad \Longrightarrow \quad \begin{vmatrix} \hbar\omega_0 - E & \hbar g e^{i\omega t} \\ \hbar g e^{-i\omega t} & \hbar\omega_1 - E \end{vmatrix} = 0, \quad (3.52)$$

¹A formulação mais rigorosa desse modelo, que inclui a forma quantizada do campo eletromagnético no operador hamiltoniano do sistema, embora não possua solução exata, também pode ser analisada via métodos aproximativos, podendo, dentre os mais conhecidos e vastamente aplicados, ser destacado a *aproximação de onda girante* (RWA – *Rotating Wave Approximation*). Este, consiste na eliminação dos termos no hamiltoniano que, devido à rápida oscilação, têm pouca contribuição, em média, na dinâmica. Como resultado, obtém-se a derivação do *modelo de Jaynes-Cummings* [54], que possui solução exata e é exaustivamente empregado na descrição de sistemas quânticos de interação entre radiação e matéria no contexto da óptica quântica, especialmente em eletrodinâmica quântica em cavidades [55]. A RWA, por se caracterizar como um método aproximativo por médias temporais, pode ser concebida como uma variante do método apresentado neste trabalho, conforme mostrado nas referências [17, 52].

$$\implies E_{\pm} = \bar{E} \pm \frac{\hbar}{2} (\omega_{10}^2 + 4g^2)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.53)$$

sendo $\bar{E} \equiv \frac{\hbar}{2} (\omega_0 + \omega_1)$.

Ainda, podemos obter as autoenergias aproximadas \tilde{E}_{\pm} a partir da aplicação da aproximação por dinâmica efetiva para a análise do problema. Assim, segundo a Eq. (3.13), temos, na representação de interação,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I(t) &= e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}^{(0)} t} \mathcal{H}^{(1)}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}^{(0)} t} \\ &= e^{i t (\omega_0 |0\rangle\langle 0| + \omega_1 |1\rangle\langle 1|)} [\hbar g e^{i \omega t} |0\rangle\langle 1| + \hbar g e^{-i \omega t} |1\rangle\langle 0|] e^{-i t (\omega_0 |0\rangle\langle 0| + \omega_1 |1\rangle\langle 1|)}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

em que, aqui, como $[|0\rangle\langle 0|, |1\rangle\langle 1|] = 0$, podemos aplicar a fórmula de Zassenhaus – vide Apêndice A.4 – levando à

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I(t) &= \hbar g e^{i \omega t} e^{i \omega_0 t |0\rangle\langle 0|} e^{i \omega_1 t |1\rangle\langle 1|} |0\rangle\langle 1| e^{-i \omega_0 t |0\rangle\langle 0|} e^{-i \omega_1 t |1\rangle\langle 1|} + \text{h.c.} \\ &= \hbar g e^{i (\omega_{10} - \omega) t} |1\rangle\langle 0| + \hbar g e^{-i (\omega_{10} - \omega) t} |0\rangle\langle 1| \\ &= \hbar g e^{i \Omega t} |1\rangle\langle 0| + \hbar g e^{-i \Omega t} |0\rangle\langle 1|, \end{aligned} \quad (3.55)$$

definindo $\Omega \equiv \omega_{10} - \omega$ como a dessintonia entre a frequência de oscilação do potencial externo e a frequência de transição entre os níveis fundamental e excitado do sistema, assumindo, por questão de simplicidade, $\omega_{10} \geq \omega$. Uma vez que o hamiltoniano \mathcal{H}_I da Eq. (3.55) tem a forma funcional análoga à Eq. (3.30), podemos então obter o hamiltoniano efetivo do sistema, a partir de (3.49), como

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{\hbar g^2}{\Omega} [|1\rangle\langle 0|, |0\rangle\langle 1|] = \frac{\hbar g^2}{\Omega} (|1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0|), \quad (3.56)$$

dado que a condição (3.50), aqui traduzida como $\frac{\Omega}{g} \gg 1$ (vide Apêndice B.6), é respeitada. Assim, o hamiltoniano efetivo do sistema na representação de Schrödinger fica simplesmente

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \hbar \left(\omega_0 - \frac{g^2}{\Omega} \right) |0\rangle\langle 0| + \hbar \left(\omega_1 + \frac{g^2}{\Omega} \right) |1\rangle\langle 1| \\ &= \bar{E} - \frac{\hbar}{2} \left(\omega_{10} + \frac{2g^2}{\Omega} \right) |0\rangle\langle 0| + \frac{\hbar}{2} \left(\omega_{10} + \frac{2g^2}{\Omega} \right) |1\rangle\langle 1|, \end{aligned} \quad (3.57)$$

onde, no regime fora da ressonância e acoplamento fraco ($\frac{\Omega}{g} \gg 1$), notamos a ausência da dependência temporal explícita e a presença, apenas, de um deslocamento de $\frac{\hbar g^2}{\Omega}$ na energia dos autoestados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ devido ao potencial de interação. Este fenômeno é conhecido como *efeito Autler–Townes*, que corresponde à versão dinâmica do *efeito Stark* [56, 57], em que os campos elétricos apresentam oscilação temporal (por esse motivo, esse efeito também é conhecido como *AC Stark shift*) [17, 58]. As autoenergias aproximadas são, portanto, dadas por

$$\tilde{E}_{\pm} = \bar{E} \pm \frac{\hbar}{2} \left(\omega_{10} + \frac{2g^2}{\Omega} \right). \quad (3.58)$$

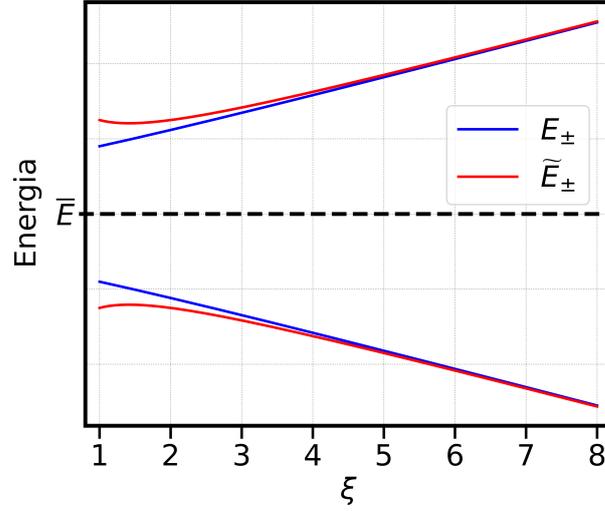


Figura 3.1: Comportamento das autoenergias real E_{\pm} e efetiva \tilde{E}_{\pm} em função do aumento do parâmetro ξ , para $\eta = 2$ e $g = 1$.

Fonte: Os dados foram gerados e compilados utilizando as bibliotecas Python 3 [59], QuTiP [60, 61] e Matplotlib [62].

Aqui, podemos definir os parâmetros adimensionais $\frac{\Omega}{g} \equiv \xi$ e $\frac{\omega}{g} \equiv \eta$, sendo este último, relativo às características do potencial $\mathcal{H}^{(1)}$, podendo, para o regime de acoplamento fraco e rápida oscilação, ser assumido como $\eta = \text{constante} > 0$. Logo, as Eqs. (3.53) e (3.58) ficam

$$E_{\pm} = \bar{E}_{\pm} \pm \frac{\hbar g}{2} \left[(\xi + \eta)^2 + 4 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.59)$$

$$\tilde{E}_{\pm} = \bar{E}_{\pm} \pm \frac{\hbar g}{2} \left[\xi + \eta + \frac{2}{\xi} \right], \quad (3.60)$$

cujos comportamentos em função de ξ são mostrados no gráfico da Figura 3.1. Da análise desta, é possível notar que E_{\pm} tende a \tilde{E}_{\pm} à medida que a condição (3.50), ou seja, $\xi \gg 1$, é satisfeita. De fato, uma expansão em séries de potência da diferença entre as Eqs. (3.59) e (3.60) leva à

$$|E_{\pm} - \tilde{E}_{\pm}|_{\xi \gg 1} = \frac{2\eta}{\xi^2} + O\left(\frac{1}{\xi^3}\right), \quad (3.61)$$

que tende a zero quando $\xi \rightarrow \infty$, mostrando a validade, em seu apropriado regime, da aproximação por dinâmicas efetivas¹.

¹Aqui, é importante ressaltar que no contexto deste problema em específico – interação átomo/campo – existe ainda uma condição implícita de que $\eta = \text{constante}$ seja menor que ξ . O fato de que $\frac{\eta}{\xi} < 1$ está atrelado à exigência de que a magnitude da dessintonia Ω átomo/campo seja apreciável também com relação à oscilação ω do próprio campo.

ANÁLISE DA INTERAÇÃO ENTRE DOIS QUBITS SUPERCONDUTORES VIA DINÂMICA EFETIVA

Neste capítulo será abordado, em detalhes, o processo de uma interação entre dois qubits na troca de uma excitação. Tal processo será tomado como um modelo simples para simular e investigar os pormenores que se dão no intercâmbio de informação quântica numa porta lógica de dois qubits. Aqui, a interação qubit-qubit, que pertence ao âmbito de aspectos mais elementares dessas portas lógicas, terá sua exploração fundamentada no método de dinâmicas efetivas abordado no Capítulo 3, postas suas já mencionadas vantagens com relação ao foco e realce justamente desses aspectos elementares, e que de fato contribuem para a dinâmica. Ainda, inspirados pela física envolvida nos computadores quânticos da IBM, sobretudo aquele utilizado para a implementação do algoritmo de Deutsch-Jozsa no Capítulo 2, adotaremos um dispositivo supercondutor como sistema físico do modelo, haja vista o caráter promissor desses dispositivos na implementação de algoritmos e simulações quânticas na era *NISQ* (*noisy intermediate scale quantum*) [25, 26], conforme já mencionado. Em especial, o sistema mostrado na referência [18] é um bom candidato devido à sua propícia correspondência com as características desejadas para o modelo – sistema de dois qubits supercondutores interagentes, cujo tempo relacionado a processos de dissipação e decoerência são maiores que os tempos de interação por ordens de grandeza. Nesse sentido, na primeira seção deste capítulo será feita uma breve introdução à física dos dispositivos supercondutores, com foco nos qubits de carga, análogos ao do sistema apresentado em [18] e tomado como modelo. Na segunda seção será calculado o hamiltoniano efetivo do sistema de interesse nos diferentes regimes de interação. Por fim, na última seção, apresentaremos os resultados referentes às simulações das interações realizadas e suas implicações.

4.1 Dispositivos Supercondutores

Nesta seção será abordada, de maneira breve e resumida, a física de dispositivos supercondutores, apenas no que diz respeito aos aspectos necessários para o melhor entendimento dos elementos do sistema a ser adotado como modelo físico para implementação das simulações, apresentado na Seção 4.2 que se segue. Para uma leitura mais aprofundada sobre a física de dispositivos supercondutores e sua aplicação em eletrodinâmica quântica de circuitos, as referências [25, 63–67] constituem um bom material. De maneira geral, esses dispositivos são circuitos eletrônicos mantidos abaixo de uma certa temperatura crítica, causando a extinção dos efeitos resistivos à corrente elétrica nos materiais condutores – efeitos dissipativos – e, conseqüentemente, o surgimento de fenômenos quânticos, como a supercondutividade¹. Com isso, há o aparecimento de correntes elétricas, que percorrem o circuito permanentemente, sem necessidade de uma fonte, e, por conseqüência, de fluxos de campo magnético no material.

Desse modo, de maneira elementar, iremos analisar um circuito eletrônico, que no regime ideal, manifesta esses efeitos, o circuito LC , composto por um capacitor de capacitância C e um indutor de indutância L , mostrado na Figura 4.1a, que age como um oscilador harmônico. Aqui, a hamiltoniana que descreve o circuito, associada à energia total do sistema, é dada pela soma das energias E_C e E_L armazenadas no capacitor e no indutor, respectivamente, da forma

$$\mathcal{H} = E_C + E_L = \frac{q^2}{2C} + \frac{\Phi^2}{2L} = \frac{L\omega^2}{2}q^2 + \frac{1}{2L}\Phi^2, \quad (4.1)$$

com q sendo a carga do capacitor, Φ o fluxo de campo magnético do indutor, e $\omega \equiv \frac{1}{\sqrt{LC}}$ a frequência natural de oscilação do sistema, relativo a seu comportamento como oscilador harmônico, nas variáveis q e Φ .

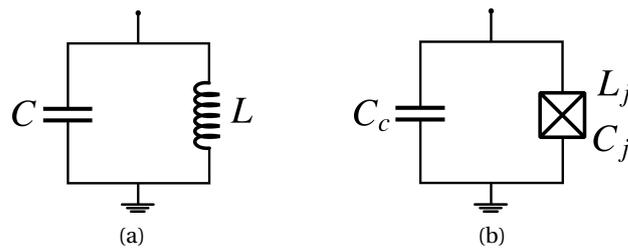


Figura 4.1: **(a)** Esquema de um circuito LC , composto por um capacitor de capacitância C e um indutor de indutância L ligados em série. **(b)** Esquema de um circuito LC , composto por um capacitor de capacitância C_c e uma *Junção Josephson* de capacitância C_j e indutância L_j ligados em série.

Fonte: Feito pelo autor.

¹A origem do fenômeno da supercondutividade está ligada à formação dos *pares de Cooper*, um par de elétrons – férmions – ligados, com comportamento bosônico. A explicação da origem física deste fenômeno é descrita de maneira detalhada pela *Teoria BCS (Bardeen–Cooper–Schrieffer)*, que adentra o campo da física da matéria condensada, cuja abordagem formal foge dos objetivos deste trabalho. Recomendam-se as referências [26, 68], para uma leitura aprofundada neste assunto.

Tomando-se, então, a carga q e o fluxo Φ como variáveis canonicamente conjugadas, a quantização do sistema é feita trocando-se tais variáveis pelos respectivos operadores quânticos

$$q \rightarrow \mathbf{q}, \quad (4.2)$$

$$\Phi \rightarrow \mathbf{\Phi}, \quad (4.3)$$

e substituindo-se os parênteses de Poisson pela imposição da relação de comutação

$$[\mathbf{q}, \mathbf{\Phi}] = i\hbar I. \quad (4.4)$$

O operador hamiltoniano do sistema fica, então,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2L}\mathbf{\Phi}^2 + \frac{L\omega^2}{2}\mathbf{q}^2. \quad (4.5)$$

Aqui, a fim de se determinar a matriz \mathcal{H} , diagonal com relação às autoenergias, com \mathbf{q} e $\mathbf{\Phi}$ obedecendo a relação (4.4), é conveniente introduzirmos a substituição linear [46]

$$\mathbf{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar L\omega}}(L\omega\mathbf{q} + i\mathbf{\Phi}), \quad (4.6)$$

$$\mathbf{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar L\omega}}(L\omega\mathbf{q} - i\mathbf{\Phi}), \quad (4.7)$$

de modo que a relação de comutação (4.4) fica

$$\begin{aligned} [\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar L\omega}}(L\omega\mathbf{q} + i\mathbf{\Phi}), \frac{1}{\sqrt{2\hbar L\omega}}(L\omega\mathbf{q} - i\mathbf{\Phi}) \right] \\ &= \frac{1}{2\hbar L\omega} [L\omega\mathbf{q} + i\mathbf{\Phi}, L\omega\mathbf{q} - i\mathbf{\Phi}] \\ &= \frac{i}{2\hbar} (-[\mathbf{q}, \mathbf{\Phi}] + [\mathbf{\Phi}, \mathbf{q}]) \\ &= -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{q}, \mathbf{\Phi}] \\ &= I. \end{aligned} \quad (4.8)$$

e as variáveis \mathbf{q} e $\mathbf{\Phi}$ ficam

$$\mathbf{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2L\omega}}(\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger) \quad \text{e} \quad \mathbf{\Phi} = i\sqrt{\frac{\hbar L\omega}{2}}(\mathbf{a} - \mathbf{a}^\dagger). \quad (4.9)$$

Substituindo, então, os resultados (4.8) e (4.9) em (4.5)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{\hbar\omega}{4} \left[(\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger)^2 - (\mathbf{a} - \mathbf{a}^\dagger)^2 \right] \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \left[\mathbf{a}^2 + \mathbf{a}^{\dagger 2} + \mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a}^\dagger\mathbf{a} - \mathbf{a}^2 - \mathbf{a}^{\dagger 2} + \mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a}^\dagger\mathbf{a} \right] \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left[\underbrace{\mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger}_{I + \mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}} + \mathbf{a}^\dagger\mathbf{a} \right] \\ &= \hbar\omega \left(\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a} + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (4.10)$$

que descreve um oscilador harmônico quântico de frequência natural de oscilação ω e energia $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, com $n = 0, 1, 2$ sendo o autovalor do operador número $N = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$. A Figura 4.2a apresenta um diagrama dos níveis de energia para o oscilador harmônico quântico. Neste contexto, a baixa temperatura T mencionada, necessária para o aparecimento dos efeitos quânticos é tal que $\kappa_B T \ll \hbar\omega$, sendo κ_B a constante de Boltzmann.

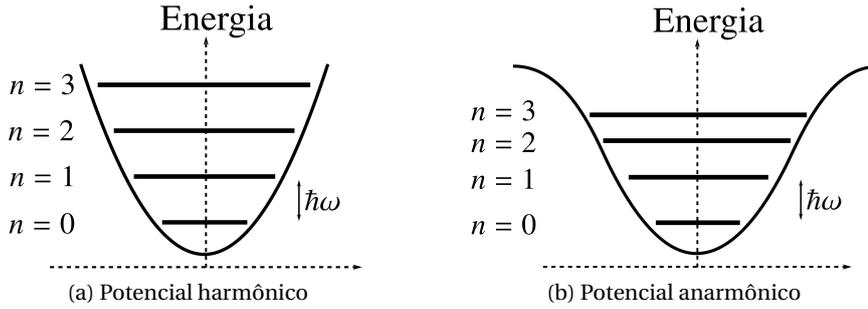


Figura 4.2: **(a)** Esquema mostrando os diagramas de energia relativos ao oscilador harmônico. O espaçamento entre os níveis é equidistante, com valor $\hbar\omega$. **(b)** Esquema mostrando os diagramas de energia incluindo efeitos relativos a uma não linearidade no potencial. Diferentemente do oscilador harmônico, em que o espaçamento entre os níveis é equidistante, aqui esse espaçamento é afetado por um fator de anarmonicidade.

Fonte: Feito pelo autor.

Aqui, no entanto, conforme pode ser observado na Figura 4.2a, o espaçamento equidistante entre os níveis faz com que o circuito LC não possa operar como um qubit. Tal situação pode ser remediada a partir da introdução de uma não linearidade no potencial, tornando-o anarmônico. Isso pode ser feito através da utilização de uma *Junção Josephson* [69], que consiste numa união de dois materiais supercondutores separados por um isolante, nesse circuito, conforme esquematizado na Figura 4.1b. Essa barreira faz com que haja uma diferença de fase das funções de onda que descrevem o fluxo de corrente em cada um dos supercondutores, o que implica na introdução de uma não linearidade no potencial e, conseqüentemente, um espaçamento não equidistante dos níveis de energia, conforme mostrado na Figura 4.2b. O operador hamiltoniano fica, então,

$$\mathcal{H} = \frac{q^2}{2C_s} - E_j \cos(\kappa_J \Phi), \quad (4.11)$$

em que $C_s \equiv C_c + C_j$ é a soma das capacitâncias do capacitor e da Junção Josephson e o segundo termo da equação é relativo à contribuição não linear, com $E_j \equiv \frac{1}{\kappa_J^2 L_j}$ sendo a *Energia Josephson*, L_j a *indutância Josephson*, e κ_J a *constante Josephson* [69]. Fazendo-se uma expansão da função *coseno* em polinômio de Taylor, numa aproximação até termos de quarta ordem, e introduzindo-se, novamente, as substituições (4.6) e (4.7) em (4.11), temos, após certa manipulação algébrica e aproximações,

$$\mathcal{H} = \hbar\omega \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \hbar \frac{\alpha}{2} \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{a}, \quad (4.12)$$

em que agora a frequência natural de oscilação é $\omega = \sqrt{8E_J E_C} - E_C$, e $\alpha = -E_C$ é o termo de anarmonicidade ligado ao potencial, para $E_C = \frac{q_0^2}{2C_S}$, com q_0 a carga elemental fundamental [70]. Aqui, a troca de uma única Junção Josephson por um *loop* supercondutor com duas dessas junções ligadas em paralelo – também conhecido com *SQUID loop* – faz com que a frequência efetiva de operação do qubit possa ser sintonizada pela aplicação de fluxos de campos magnéticos através do *loop* [25, 65]. Ainda, dois ou mais qubits podem ser acoplados capacitivamente, conforme o esquema da Figura 4.3, sendo essa interação, já representada em termos de operadores de criação e aniquilação, dada por

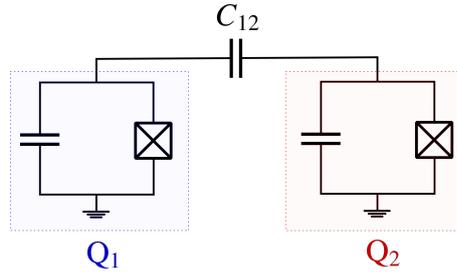


Figura 4.3: Esquema representado um circuito com dois qubits supercondutores Q_1 e Q_2 , acoplados capacitivamente através de uma capacitância C_{12} .

Fonte: Feito pelo autor.

$$V_{12} = \hbar g_{12} (\mathbf{a}_1^\dagger \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2^\dagger), \quad (4.13)$$

com g_{12} o fator associado à capacitância de acoplamento entre esses qubits [25, 65, 70].

4.2 Obtenção do hamiltoniano efetivo para o sistema de dois qubits

Nesta seção, estabeleceremos a escolha do dispositivo supercondutor que servirá de base para a aplicação da análise, via dinâmicas efetivas, da interação entre qubit-qubit. Conforme mencionado, a realização e implementação experimental desse sistema está mostrada na referência [18], sendo este constituído por três componentes supercondutores, como mostrado na Figura 4.4a e ilustrado esquematicamente na Figura 4.4b. O hamiltoniano que governa a dinâmica desse sistema pode ser expresso como

$$\frac{\mathcal{H}}{\hbar} = \underbrace{\sum_{i=1,2,c} \left(\omega_i \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_i + \frac{\alpha_i}{2} \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_i \mathbf{a}_i \right)}_{\mathcal{H}^{(0)}} + \underbrace{\sum_{i=1,2} g_{ic} (\mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_c + \mathbf{a}_i \mathbf{a}_c^\dagger) + g_{12} (\mathbf{a}_1^\dagger \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2^\dagger)}_{\mathcal{H}^{(1)}}, \quad (4.14)$$

com \mathbf{a}_i^\dagger e \mathbf{a}_i sendo os correspondentes operadores de criação e aniquilação no i -ésimo subespaço do espaço de Fock, g_{ic} denotando o acoplamento entre o i -ésimo qubit e o *Coupler*, e g_{12} sendo o acoplamento capacitivo entre os qubits Q_1 e Q_2 . Dentro das considerações feitas sobre esses parâmetros, baseadas no *setup* experimental da referência [18], podemos assumir que $g_{1c} \approx g_{2c}$, de modo que, sem perda de generalidade, podemos alterar ambos, g_{1c} e g_{2c} , por certo $g_c \equiv \sqrt{g_{1c} g_{2c}}$,

onde, em geral, $g_c > g_{12}$. Aqui, os termos $\mathcal{H}^{(0)}$ e $\mathcal{H}^{(1)}$ são designados conforme a definição na Eq. (3.9). O primeiro termo da soma em $\mathcal{H}^{(0)}$ corresponde ao espectro de energia do i -ésimo qubit, com $\hbar\omega_i$ sendo a diferença de energia entre os estados fundamental $|0\rangle_i$ e primeiro excitado $|1\rangle_i$, e α_i sendo correspondente ao fator de anarmonicidade desse i -ésimo qubit, conforme (4.12). A partir do uso de fluxos de campos externos, Φ , é possível sintonizar as frequências ω_1 e ω_c para os qubits Q_1 e C , enquanto a frequência ω_2 do qubit Q_2 é mantida fixa. O último termo em (4.14) ($\mathcal{H}^{(1)}$) denota a energia da interação capacitiva entre os entes que compõem o sistema, conforme (4.13).

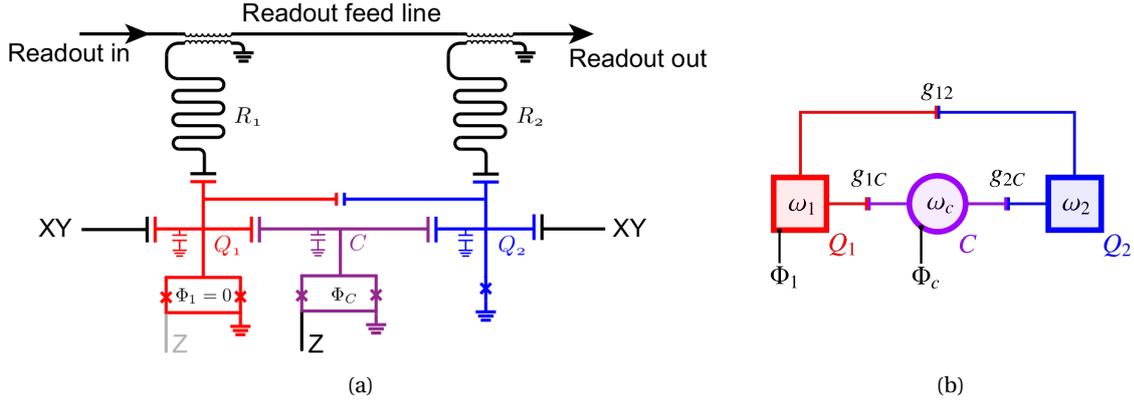


Figura 4.4: **(a)** Estrutura simplificada de uma amostra experimental de um sistema de qubits supercondutores. Fonte: Referência [18]. **(b)** Representação esquemática do sistema adotado para simular-se a interação qubit-qubit, com base na amostra experimental utilizada na referência [18]. Os qubits Q_1 e Q_2 estão acoplados um ao outro via um *loop* supercondutor do tipo SQUID (C), usado como acoplador sintonizável. Fonte: Feito pelo autor.

Para os propósitos visados neste trabalho podemos considerar que o potencial em todos os elementos do sistema apresenta alta anarmonicidade e, assim, a dinâmica estará restrita aos dois estados de menor energia. Nesse caso, tais elementos comportam-se como sistemas de dois níveis, ou seja, qubits, de modo que podemos substituir os operadores bosônicos \mathbf{a}_i e \mathbf{a}_i^\dagger pelas matrizes de Pauli¹

$$\mathbf{a}_i \rightarrow \sigma_{(i)}^- \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{a}_i^\dagger \rightarrow \sigma_{(i)}^+ \equiv \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.15)$$

Aqui, definimos $|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ e $|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}^T$ os estados fundamental e excitado, respectivamente. Além disso, o *shift* na energia foi feito de modo a colocar o estado fundamental com energia zero, resultando que $\sigma_{(i)}^+ \sigma_{(i)}^- = \sigma_{(i)}^{11}$ denota o operador população do primeiro estado excitado.

¹Durante o texto manteremos implícita a atuação de cada operador $\sigma_{(i)}^\pm$ apenas no seu respectivo subespaço tensorial. A rigor, tal termo deve ser entendido como

$$\sigma_{(i)}^\pm \Rightarrow \bigotimes_{j=1}^N \left[(1 - \delta_{ij}) \mathbf{I} + \delta_{ij} (X \pm iY) \right],$$

em que \mathbf{I} , X e Y são, respectivamente, as matrizes identidade, Pauli X e Pauli Y de dimensão 2×2 , conforme introduzido na Seção 2.1.1.

Assim, a Eq. (4.14) fica

$$\frac{\mathcal{H}}{\hbar} = \underbrace{\sum_{i=1,2,c} \omega_i \sigma_{(i)}^{11}}_{\mathcal{H}^{(0)}} + g_c \underbrace{\sum_{i=1,2} (\sigma_{(i)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(i)}^- \sigma_{(c)}^+)}_{\mathcal{H}^{(1)}} + g_{12} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+), \quad (4.16)$$

de maneira que temos em mãos o operador hamiltoniano completo que descreve as interações entre os três qubits supercondutores considerados. Para proceder nossa análise, é conveniente inspecionarmos a Eq. (4.16) dentro do escopo do método de dinâmicas efetivas, apresentado no Capítulo 3, em que seremos capazes de dar foco aos termos que efetivamente contribuem para a dinâmica. De início, mudando para a representação de interação, o hamiltoniano (4.16) pode, de maneira análoga à (3.13), ser escrito como

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_I(t)}{\hbar} &= \mathbf{U}^\dagger(t) \mathcal{H}^{(1)} \mathbf{U}(t) \\ &= g_c \sum_{i=1,2} \mathbf{U}^\dagger(t) (\sigma_{(i)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(i)}^- \sigma_{(c)}^+) \mathbf{U}(t) + g_{12} \mathbf{U}^\dagger(t) (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+) \mathbf{U}(t), \end{aligned} \quad (4.17)$$

onde

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{U}_1(t) \mathbf{U}_2(t) \mathbf{U}_c(t) = e^{-i\omega_1 \sigma_{(1)}^{11} t} e^{-i\omega_2 \sigma_{(2)}^{11} t} e^{-i\omega_c \sigma_{(c)}^{11} t}, \quad (4.18)$$

e com i sendo a unidade imaginária, de modo que,

$$\frac{\mathcal{H}_I(t)}{\hbar} = g_c \sum_{i=1,2} \left(\mathbf{U}_i^\dagger(t) \sigma_{(i)}^+ \mathbf{U}_i(t) \mathbf{U}_c^\dagger(t) \sigma_{(c)}^- \mathbf{U}_c(t) + \text{h.c.} \right) + g_{12} \left(\mathbf{U}_1^\dagger(t) \sigma_{(1)}^+ \mathbf{U}_1(t) \mathbf{U}_2^\dagger(t) \sigma_{(2)}^- \mathbf{U}_2(t) + \text{h.c.} \right). \quad (4.19)$$

Uma vez que $\mathbf{U}(t)$ comuta com $\mathcal{H}^{(0)}$, implicando que $[\mathbf{U}_i(t), \mathcal{H}^{(0)}] = 0$, os termos da forma $\mathbf{U}_i^\dagger(t) \sigma_{(i)}^- \mathbf{U}_i(t)$ e $\mathbf{U}_i^\dagger(t) \sigma_{(i)}^+ \mathbf{U}_i(t)$ podem ser determinados diretamente

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_i^\dagger(t) \sigma_{(i)}^- \mathbf{U}_i(t) &= e^{i\omega_i \sigma_{(i)}^{11} t} |0\rangle\langle 1|_i e^{-i\omega_i \sigma_{(i)}^{11} t} = e^{-i\omega_i t} \sigma_{(i)}^-, \\ \mathbf{U}_i^\dagger(t) \sigma_{(i)}^+ \mathbf{U}_i(t) &= e^{i\omega_i \sigma_{(i)}^{11} t} |1\rangle\langle 0|_i e^{-i\omega_i \sigma_{(i)}^{11} t} = e^{i\omega_i t} \sigma_{(i)}^+, \end{aligned} \quad (4.20)$$

e, portanto, o hamiltoniano do sistema, na representação de interação, fica

$$\frac{\mathcal{H}_I(t)}{\hbar} = g_c (e^{i\omega_{1c} t} \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + e^{i\omega_{2c} t} \sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.}) + g_{12} (e^{i\omega_{12} t} \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \text{h.c.}), \quad (4.21)$$

onde definimos $\omega_{ij} \equiv \omega_i - \omega_j$ a dessintonia entre o i -ésimo e o j -ésimo qubits. Conforme apresentado na Seção 3.3, hamiltonianos na representação de interação com dependência temporal oscilatória, assim como (4.21), cuja forma funcional pode ser escrita conforme a Eq. (3.30), podem ser analisados a partir do método aproximativo de dinâmicas efetivas aplicando-se a transformação mostrada na Eq. (3.49), assegurada a condição (3.50). De agora em diante iremos analisar como se comporta a dinâmica efetiva do sistema de acordo com a escolha da relação entre as frequências ω_1 , ω_2 e ω_c . Em particular, as duas seções seguintes serão dedicadas ao exame das interações entre os qubits Q_1 e Q_2 , especificamente a transferência de uma excitação do primeiro para o segundo, dentro da perspectiva de dois regimes distintos: (A) Q_1 e Q_2 em ressonância, isso é, $\omega_1 = \omega_2 \implies \omega_{12} = 0$; e (B) Q_1 e Q_2 fora de ressonância, ou seja, $\omega_1 \neq \omega_2 \implies \omega_{12} \neq 0$.

4.2.1 Qubits Q1 e Q2 em Ressonância – *Coupler* como um agente passivo

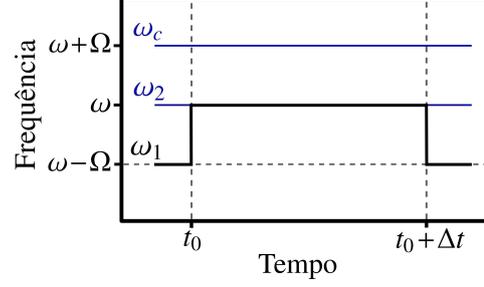


Figura 4.5: Frequências dos qubits e do *coupler* como função do tempo, em particular, no processo de sintonização da frequência do qubit Q_1 . Inicialmente todos os qubits estarão em dessintonia, com $\omega_1 = (\omega - \Omega)$, $\omega_2 = \omega$ e $\omega_c = (\omega + \Omega)$, para certos valores de frequência ω e Ω quaisquer. No instante de tempo t_0 , a frequência do qubit Q_1 é ajustada com o valor $\omega_2 = \omega$. Em seguida, o sistema é evoluído por um intervalo de tempo Δt , e, posteriormente, a frequência de Q_1 é novamente ajustada para seu valor inicial $(\omega - \Omega)$. Aqui, o acoplador C é mantido em dessintonia com relação a Q_1 e Q_2 em todo processo. Conforme mencionado, numa realização experimental, tal processo pode ser executado através de aplicações de pulsos de campos magnéticos externos [25].

Fonte: Feito pelo autor.

No primeiro regime, consideraremos uma evolução do sistema quando Q_1 e Q_2 estão em ressonância, de modo que as restrições para as frequências dos elementos do dispositivo supercondutor, ilustradas na Figura 4.5, são ajustadas como

$$\omega_1(t) = \begin{cases} \omega - \Omega, & \text{se } 0 \leq t < t_0 \text{ ou } t \geq t_0 + \Delta t, \\ \omega, & \text{se } t_0 \leq t < t_0 + \Delta t, \end{cases} \quad (4.22)$$

$$\omega_2(t) = \omega, \quad (4.23)$$

$$\omega_c(t) = \omega + \Omega, \quad (4.24)$$

para certos valores de frequência ω e Ω quaisquer. Durante o processo de sintonia entre Q_1 e Q_2 teremos, portanto, $\omega_{12} = 0$ e $\omega_{1c} = \omega_{2c} = -\Omega$, e a Eq. (4.21) fica

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_I(t)}{\hbar} &= g_c \left(e^{-i\Omega t} \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + e^{-i\Omega t} \sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.} \right) + g_{12} \left(\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \text{h.c.} \right) \\ &= \left[e^{-i\Omega t} g_c \left(\sigma_{(1)}^+ + \sigma_{(2)}^+ \right) \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.} \right] + g_{12} \left(\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \text{h.c.} \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Aplicando então (3.49), a dinâmica efetiva na representação de interação fica

$$\begin{aligned}
 \frac{\mathcal{H}_{\text{eff}}}{\hbar} &= -\frac{g_c^2}{\Omega} [(\sigma_{(1)}^+ + \sigma_{(2)}^+) \sigma_{(c)}^-, (\sigma_{(1)}^- + \sigma_{(2)}^-) \sigma_{(c)}^+] + g_{12} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+) \\
 &= -\frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^+ + \sigma_{(2)}^+) (\sigma_{(1)}^- + \sigma_{(2)}^-) \sigma_{(c)}^{00} + \frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^- + \sigma_{(2)}^-) (\sigma_{(1)}^+ + \sigma_{(2)}^+) \sigma_{(c)}^{11} + g_{12} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+) \\
 &= -\frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11} + \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+) \sigma_{(c)}^{00} + \frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^{00} + \sigma_{(2)}^{00} + \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+) \sigma_{(c)}^{11} + g_{12} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+) \\
 &= -\frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11}) \sigma_{(c)}^{00} + \frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^{00} + \sigma_{(2)}^{00}) \sigma_{(c)}^{11} - \frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+) (\sigma_{(c)}^{00} - \sigma_{(c)}^{11}) + g_{12} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+) \\
 &= -\frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11}) \sigma_{(c)}^{00} + \frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^{00} + \sigma_{(2)}^{00}) \sigma_{(c)}^{11} + \left(g_{12} I^{(c)} - \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^z \right) (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+), \tag{4.26}
 \end{aligned}$$

e, retornando à representação de Schrödinger

$$\frac{\mathcal{H}}{\hbar} = \omega (\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11}) + \omega_c \sigma_{(c)}^{11} - \frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11}) \sigma_{(c)}^{00} + \frac{g_c^2}{\Omega} (\sigma_{(1)}^{00} + \sigma_{(2)}^{00}) \sigma_{(c)}^{11} + \left(g_{12} I^{(c)} - \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^z \right) (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+). \tag{4.27}$$

Da Eq. (4.27) podemos perceber que os termos de troca aparecem apenas entre os qubits Q_1 e Q_2 , e o hamiltoniano do sistema se torna separável com relação ao acoplador C . Aqui, nota-se que quando os dois qubits estão em ressonância, estes terão um acoplamento efetivo, devido à interação direta, dado por

$$\widetilde{g}_{12} = \left(g_{12} - (-1)^{n_c} \frac{g_c^2}{\Omega} \right), \tag{4.28}$$

em que $n_c = 0, 1$ denota o número de excitações em C . Esse acoplamento efetivo \widetilde{g}_{12} tem forte dependência com a escolha sutil de dessintonia Ω e com o número de excitações n_c do *coupler*. Uma interessante e completa abordagem nas implicações dessa dependência é apresentada nas referências [71–73]. Por simplicidade, iremos apenas considerar a escolha específica em que $n_c = 0$, de modo que os termos na Eq. (4.27) proporcionais a $\sigma_{(c)}^{11}$ podem ser negligenciados, levando a Eq. (4.27) a ser reescrita como

$$\frac{\mathcal{H}_A}{\hbar} = \widetilde{\omega} (\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11}) + \widetilde{g}_{12} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+), \tag{4.29}$$

com $\widetilde{\omega} \equiv \left(\omega - \frac{g_c^2}{\Omega} \right)$ e $\widetilde{g}_{12} \equiv \left(g_{12} - \frac{g_c^2}{\Omega} \right)$.

Ademais, assumindo que, inicialmente, Q_1 é preparado no estado excitado e Q_2 no estado fundamental, o estado inicial do sistema é

$$|\psi(t_0)\rangle = |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2. \tag{4.30}$$

Então, evoluindo-se o estado inicial (4.30) durante um certo intervalo de tempo Δt , a partir da atuação do operador de evolução temporal – vide Apêndice A.2 Eq. (A.13) – para o hamiltoniano da Eq. (4.29), o estado fica

$$\begin{aligned}
 |\psi(t_0 + \Delta t)\rangle &\approx e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_A \Delta t} |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2 \\
 &= e^{-i\Delta t \left[\widetilde{\omega} (\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11}) + \widetilde{g}_{12} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+) \right]} |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2. \tag{4.31}
 \end{aligned}$$

Usando a fórmula de Zassenhaus – vide Apêndice A.4 – e o fato de que $[\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11}, \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+] = 0$

$$\begin{aligned}
 |\psi(t_0 + \Delta t)\rangle &= e^{-i\tilde{\omega}\Delta t(\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11})} e^{-i\tilde{g}_{12}\Delta t(\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+)} |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2 \\
 &= e^{-i\tilde{g}_{12}\Delta t(\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+)} e^{-i\tilde{\omega}\Delta t\sigma_{(1)}^{11}} e^{-i\tilde{\omega}\Delta t\sigma_{(2)}^{11}} |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2 \\
 &= e^{-i\tilde{\omega}\Delta t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\tilde{g}_{12}\Delta t)^n}{n!} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+)^n |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2 \\
 &= e^{-i\tilde{\omega}\Delta t} \left[|1\rangle_1 |0\rangle_2 - i\tilde{g}_{12}\Delta t |0\rangle_1 |1\rangle_2 - \frac{(\tilde{g}_{12}\Delta t)^2}{2} |1\rangle_1 |0\rangle_2 + i\frac{(\tilde{g}_{12}\Delta t)^3}{6} |0\rangle_1 |1\rangle_2 + \dots \right] |0\rangle_c \\
 &= e^{-i\tilde{\omega}\Delta t} [\cos(\tilde{g}_{12}\Delta t) |1\rangle_1 |0\rangle_2 - i\sin(\tilde{g}_{12}\Delta t) |0\rangle_1 |1\rangle_2] |0\rangle_c. \tag{4.32}
 \end{aligned}$$

Ajustando-se $\Delta t = \frac{\pi}{2\tilde{g}_{12}}$ o estado final será

$$|\psi(t_0 + \Delta t)\rangle = e^{i\varphi} |0\rangle_1 |0\rangle_c |1\rangle_2, \tag{4.33}$$

onde $\varphi \equiv \frac{\pi}{2} \left(3 - \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{g}_{12}} \right)$. Portanto, tomando o *coupler* apenas como um qubit auxiliar, o processo completo de transferência da informação (excitação) de um qubit (Q_1) a outro (Q_2) através da interação direta entre eles pode ser representado, a menos de uma fase global, como

$$|10\rangle \xrightarrow{\Delta t} |01\rangle. \tag{4.34}$$

4.2.2 Qubits Q1 e Q2 fora de ressonância – *Coupler* como um agente ativo

A outra possibilidade de se realizar a transferência da excitação do qubit Q_1 para o qubit Q_2 quando os mesmos estão fora de ressonância, ou seja, $\omega_1 \neq \omega_2$, é considerar um processo em duas etapas: (i) No instante de tempo t_0 a frequência do *coupler* é alterada de modo que $\omega_c = \omega_1 = (\omega - \Omega)$ e permitimos o sistema evoluir durante um intervalo de tempo Δt_1 , a fim de que a excitação seja transferida de Q_1 para C ; (ii) Em seguida, no instante de tempo $t_1 = (t_0 + \Delta t_1)$, ajustamos a frequência do *coupler* para $\omega_c = \omega_2 = \omega$ e deixamos que o sistema evolua, durante um intervalo de tempo Δt_2 , de modo que a excitação seja transferida de C para Q_2 . Consequentemente, após a evolução completa do sistema, no instante de tempo $t_2 = (t_1 + \Delta t_2)$, o processo irá gerar uma transferência indireta da informação de Q_1 para Q_2 , mediada por C . As relações,

$$\omega_1(t) = \omega - \Omega, \tag{4.35}$$

$$\omega_2(t) = \omega, \tag{4.36}$$

$$\omega_c(t) = \begin{cases} \omega + \Omega, & \text{se } 0 \leq t < t_0 \text{ ou } t \geq t_2, \\ \omega - \Omega, & \text{se } t_0 \leq t < t_1, \\ \omega, & \text{se } t_1 \leq t < t_2, \end{cases} \tag{4.37}$$

bem como a Figura 4.6, mostram o processo de sintonia da frequência ω_c do *coupler*.

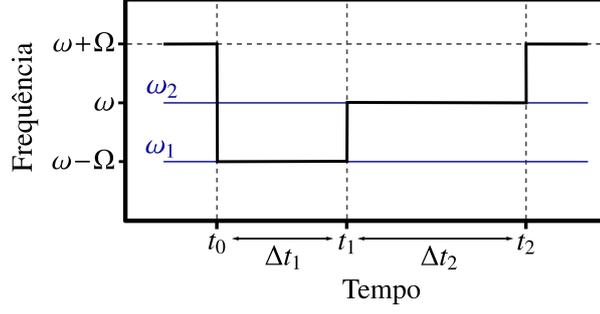


Figura 4.6: Frequências dos qubits e do *coupler* como função do tempo, em particular, no processo de sintonização da frequência do acoplador C . Inicialmente, todos os qubits estarão em dessintonia, com $\omega_1 = (\omega - \Omega)$, $\omega_2 = \omega$, e $\omega_c = (\omega + \Omega)$, para certos valores de frequências ω e Ω quaisquer. No instante de tempo t_0 , a frequência do acoplador é ajustada com o valor $\omega_c = \omega_1 = (\omega - \Omega)$, o sistema evolui durante um intervalo de tempo Δt_1 . Em seguida, no instante de tempo $t_1 = (t_0 + \Delta t_1)$, a frequência de C é ajustada para $\omega_c = \omega_2 = \omega$, e o sistema evolui por um intervalo de tempo Δt_2 . Finalmente, no instante de tempo $t_2 = (t_1 + \Delta t_2)$, a frequência de C é novamente ajustada para seu valor inicial $\omega_c = (\omega + \Omega)$.

Fonte: Feito pelo autor.

Assim, do instante de tempo t_0 ao t_1 teremos $\omega_1 = \omega_c = (\omega - \Omega)$ implicando que $\omega_{1c} = 0$ e que $\omega_{12} = -\omega_{2c} = -\Omega$, e a Eq. (4.21) fica

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_I(t)}{\hbar} &= g_c (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + e^{i\Omega t} \sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.}) + g_{12} (e^{-i\Omega t} \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \text{h.c.}) \\ &= [e^{-i\Omega t} (g_{12} \sigma_{(1)}^+ + g_c \sigma_{(c)}^+) \sigma_{(2)}^- + \text{h.c.}] + g_c (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.}). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Novamente, aplicando (3.49), a dinâmica efetiva na representação de interação será

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_{\text{eff}}}{\hbar} &= -\frac{1}{\Omega} [(g_{12} \sigma_{(1)}^+ + g_c \sigma_{(c)}^+) \sigma_{(2)}^-, (g_{12} \sigma_{(1)}^- + g_c \sigma_{(c)}^-) \sigma_{(2)}^+] + g_c (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.}) \\ &= -\frac{1}{\Omega} [(g_{12} \sigma_{(1)}^+ + g_c \sigma_{(c)}^+) (g_{12} \sigma_{(1)}^- + g_c \sigma_{(c)}^-) \sigma_{(2)}^{00} - (g_{12} \sigma_{(1)}^- + g_c \sigma_{(c)}^-) (g_{12} \sigma_{(1)}^+ + g_c \sigma_{(c)}^+) \sigma_{(2)}^{11}] + g_c (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.}) \\ &= -\left(\frac{g_{12}^2}{\Omega} \sigma_{(1)}^{11} + \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^{11} \right) \sigma_{(2)}^{00} + \left(\frac{g_{12}^2}{\Omega} \sigma_{(1)}^{00} + \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^{00} \right) \sigma_{(2)}^{11} + \left(g_c I^{(2)} - \frac{g_{12} g_c}{\Omega} \sigma_{(2)}^z \right) (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^+), \end{aligned} \quad (4.39)$$

e, retornando à representação de Schrödinger,

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_{B_1}}{\hbar} &= \omega_1 (\sigma_{(1)}^{11} + \sigma_{(c)}^{11}) + \omega_2 \sigma_{(2)}^{11} - \left(\frac{g_{12}^2}{\Omega} \sigma_{(1)}^{11} + \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^{11} \right) \sigma_{(2)}^{00} + \left(\frac{g_{12}^2}{\Omega} \sigma_{(1)}^{00} + \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^{00} \right) \sigma_{(2)}^{11} \\ &\quad + \left(g_c I^{(2)} - \frac{g_{12} g_c}{\Omega} \sigma_{(2)}^z \right) (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^+). \end{aligned} \quad (4.40)$$

A partir da inspeção da Eq. (4.40), notamos que os termos de troca aparecem apenas entre os Q_1 e C , e o sistema é separável com relação ao qubit Q_2 , e visto que este não apresenta excitações no estado inicial da Eq. (4.30), os termos proporcionais a $\sigma_{(2)}^{11}$ podem ser negligenciados, levando à equação

$$\frac{\mathcal{H}_{B_1}}{\hbar} = \tilde{\omega}_1 \sigma_{(1)}^{11} + \tilde{\omega}_c \sigma_{(c)}^{11} + \tilde{g}_{1c} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^+), \quad (4.41)$$

em que $\widetilde{\omega}_1 \equiv \left(\omega_1 - \frac{g_{12}^2}{\Omega}\right)$, $\widetilde{\omega}_c \equiv \left(\omega_c - \frac{g_c^2}{\Omega}\right)$, e $\widetilde{g}_{1c} \equiv \left(g_c - \frac{g_{12}g_c}{\Omega}\right)$, com o último sendo o acoplamento efetivo entre Q_1 e C . Assim, tomando as mesmas considerações feitas na Seção 4.2.1, temos que, evoluindo-se o estado inicial (4.30) durante um certo intervalo de tempo Δt_1 , a partir da atuação do operador de evolução temporal para o hamiltoniano da Eq. (4.41), o estado fica

$$\begin{aligned} |\psi(t_1)\rangle &= \mathcal{U}(t_1, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ &\approx e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_{B_1} \Delta t_1} |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2 \\ &= e^{-i\Delta t_1 \left[\widetilde{\omega}_1 \sigma_{(1)}^{11} + \widetilde{\omega}_c \sigma_{(c)}^{11} + \widetilde{g}_{1c} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^+) \right]} |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Usando a fórmula de Zassenhaus e o fato de que os termos de energia e os termos de troca na Eq. (4.41) comutam,

$$\begin{aligned} |\psi(t_1)\rangle &= e^{-i\Delta t_1 (\widetilde{\omega}_1 \sigma_{(1)}^{11} + \widetilde{\omega}_c \sigma_{(c)}^{11})} e^{-i\widetilde{g}_{1c} \Delta t_1 (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^+)} |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2 \\ &= e^{-i\widetilde{g}_{1c} \Delta t_1 (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^+)} e^{-i\widetilde{\omega}_1 \Delta t_1 \sigma_{(1)}^{11}} e^{-i\widetilde{\omega}_c \Delta t_1 \sigma_{(c)}^{11}} |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2 \\ &= e^{-i\widetilde{\omega}_1 \Delta t_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\widetilde{g}_{1c} \Delta t_1)^n}{n!} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^+)^n |1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2 \\ &= e^{-i\widetilde{\omega}_1 \Delta t_1} \left[|1\rangle_1 |0\rangle_c - i\widetilde{g}_{1c} \Delta t_1 |0\rangle_1 |1\rangle_c - \frac{(\widetilde{g}_{1c} \Delta t_1)^2}{2} |1\rangle_1 |0\rangle_c + i \frac{(\widetilde{g}_{1c} \Delta t_1)^3}{6} |0\rangle_1 |1\rangle_c + \dots \right] |0\rangle_2 \\ &= e^{-i\widetilde{\omega}_1 \Delta t_1} [\cos(\widetilde{g}_{1c} \Delta t_1) |1\rangle_1 |0\rangle_c - i \sin(\widetilde{g}_{1c} \Delta t_1) |0\rangle_1 |1\rangle_c] |0\rangle_2. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Ajustando-se $\Delta t_1 = \frac{\pi}{2\widetilde{g}_{1c}}$, o estado será, no instante de tempo $t_1 = (t_0 + \Delta t_1)$,

$$|\psi(t_1)\rangle = e^{i\varphi_1} |0\rangle_1 |1\rangle_c |0\rangle_2, \quad (4.44)$$

onde $\varphi_1 \equiv \frac{\pi}{2} \left(3 - \frac{\widetilde{\omega}_1}{\widetilde{g}_{1c}}\right)$.

Dando prosseguimento, do instante de tempo t_1 ao instante t_2 , o acoplador é colocado em ressonância com o qubit Q_2 , ou seja, $\omega_c = \omega_2 = \omega$, implicando que $\omega_{2c} = 0$ e que $\omega_{12} = \omega_{1c} = -\Omega$. Assim, a Eq. (4.21) fica

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_I(t)}{\hbar} &= g_c (e^{-i\Omega t} \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.}) + g_{12} (e^{-i\Omega t} \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \text{h.c.}) \\ &= [e^{-i\Omega t} (g_{12} \sigma_{(2)}^- + g_c \sigma_{(c)}^-) \sigma_{(1)}^+ + \text{h.c.}] + g_c (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^- \sigma_{(c)}^+), \end{aligned} \quad (4.45)$$

e aplicando a Eq. (3.49), a dinâmica efetiva na representação de interação fica

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_{\text{eff}}}{\hbar} &= -\frac{1}{\Omega} [(g_{12} \sigma_{(2)}^- + g_c \sigma_{(c)}^-) \sigma_{(1)}^+, (g_{12} \sigma_{(2)}^+ + g_c \sigma_{(c)}^+) \sigma_{(1)}^-] + g_c (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.}) \\ &= -\frac{1}{\Omega} [(g_{12} \sigma_{(2)}^- + g_c \sigma_{(c)}^-) (g_{12} \sigma_{(2)}^+ + g_c \sigma_{(c)}^+) \sigma_{(1)}^{11} - (g_{12} \sigma_{(2)}^+ + g_c \sigma_{(c)}^+) (g_{12} \sigma_{(2)}^- + g_c \sigma_{(c)}^-) \sigma_{(1)}^{00}] + g_c (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \text{h.c.}) \\ &= -\left(\frac{g_{12}^2}{\Omega} \sigma_{(2)}^{00} + \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^{00} \right) \sigma_{(1)}^{11} + \left(\frac{g_{12}^2}{\Omega} \sigma_{(2)}^{11} + \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^{11} \right) \sigma_{(1)}^{00} + \left(g_c I^{(1)} + \frac{g_{12} g_c}{\Omega} \sigma_{(1)}^z \right) (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^- \sigma_{(c)}^+). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Retornando, então, à representação de Schrödinger, temos

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}_{B_2}}{\hbar} = & \omega_1 \sigma_{(1)}^{11} + \omega_2 (\sigma_{(c)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11}) + \left(\frac{g_{12}^2}{\Omega} \sigma_{(2)}^{11} + \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^{11} \right) \sigma_{(1)}^{00} - \left(\frac{g_{12}^2}{\Omega} \sigma_{(2)}^{00} + \frac{g_c^2}{\Omega} \sigma_{(c)}^{00} \right) \sigma_{(1)}^{11} \\ & + \left(g_c I^{(1)} + \frac{g_{12} g_c}{\Omega} \sigma_{(1)}^z \right) (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^- \sigma_{(c)}^+). \end{aligned} \quad (4.47)$$

Uma vez que não há mais excitação no qubit Q_1 no estado Eq. (4.44), os termos proporcionais a $\sigma_{(1)}^{11}$ podem ser negligenciados, levando à equação

$$\frac{\mathcal{H}_{B_2}}{\hbar} = \widetilde{\omega}_2 \sigma_{(2)}^{11} + \widetilde{\omega}_c \sigma_{(c)}^{11} + \widetilde{g}_{2c} (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^- \sigma_{(c)}^+), \quad (4.48)$$

em que $\widetilde{\omega}_2 \equiv \left(\omega_2 + \frac{g_{12}^2}{\Omega} \right)$, $\widetilde{\omega}_c \equiv \left(\omega_c + \frac{g_c^2}{\Omega} \right)$, e $\widetilde{g}_{2c} \equiv \left(g_c + \frac{g_{12} g_c}{\Omega} \right)$, com o último sendo o acoplamento efetivo entre Q_2 e C . Evoluindo-se, então, o estado inicial (4.44) durante um certo intervalo de tempo Δt_2 , a partir da atuação do operador de evolução temporal para o hamiltoniano da Eq. (4.48), o estado fica

$$\begin{aligned} |\psi(t_2)\rangle &= \mathcal{U}(t_2, t_1) |\psi(t_1)\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_{B_2} \Delta t_2} |0\rangle_1 |1\rangle_c |0\rangle_2 \\ &= e^{-i \Delta t_2 [\widetilde{\omega}_2 \sigma_{(2)}^{11} + \widetilde{\omega}_c \sigma_{(c)}^{11} + \widetilde{g}_{2c} (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^- \sigma_{(c)}^+)]} |0\rangle_1 |1\rangle_c |0\rangle_2. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Novamente, usando a fórmula de Zassenhaus e o fato de que os termos de energia e os termos de troca na Eq. (4.48) comutam,

$$\begin{aligned} |\psi(t_2)\rangle &= e^{-i \Delta t_2 (\widetilde{\omega}_2 \sigma_{(2)}^{11} + \widetilde{\omega}_c \sigma_{(c)}^{11})} e^{-i \widetilde{g}_{2c} \Delta t_2 (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^- \sigma_{(c)}^+)} |0\rangle_1 |1\rangle_c |0\rangle_2 \\ &= e^{-i \widetilde{g}_{2c} \Delta t_2 (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^- \sigma_{(c)}^+)} e^{-i \widetilde{\omega}_2 \Delta t_2 \sigma_{(2)}^{11}} e^{-i \widetilde{\omega}_c \Delta t_2 \sigma_{(c)}^{11}} |0\rangle_1 |1\rangle_c |0\rangle_2 \\ &= e^{-i \widetilde{\omega}_c \Delta t_2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i \widetilde{g}_{2c} \Delta t_2)^n}{n!} (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^- \sigma_{(c)}^+)^n |0\rangle_1 |1\rangle_c |0\rangle_2 \\ &= e^{-i \widetilde{\omega}_c \Delta t_2} \left[|1\rangle_c |0\rangle_2 - i \widetilde{g}_{2c} \Delta t_2 |0\rangle_c |1\rangle_2 - \frac{(\widetilde{g}_{2c} \Delta t_2)^2}{2} |1\rangle_c |0\rangle_2 + i \frac{(\widetilde{g}_{2c} \Delta t_2)^3}{6} |0\rangle_c |1\rangle_2 + \dots \right] |0\rangle_1 \\ &= e^{-i \widetilde{\omega}_c \Delta t_2} [\cos(\widetilde{g}_{2c} \Delta t_2) |1\rangle_c |0\rangle_2 - i \sin(\widetilde{g}_{2c} \Delta t_2) |0\rangle_c |1\rangle_2] |0\rangle_1. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Ajustando-se $\Delta t_2 = \frac{\pi}{2 \widetilde{g}_{2c}}$ o estado será, no instante de tempo $t_2 = (t_1 + \Delta t_2)$,

$$|\psi(t_2)\rangle = e^{i \varphi_2} |0\rangle_1 |0\rangle_c |1\rangle_2, \quad (4.51)$$

onde $\varphi_2 \equiv \frac{\pi}{2} \left(3 - \frac{\widetilde{\omega}_c}{\widetilde{g}_{2c}} \right)$.

Disso, segue que o processo completo de transferência da informação (excitação) de um qubit (Q_1) a outro (Q_2), assim como o tempo envolvido, podem ser representados como

$$|1\rangle_1 |0\rangle_c |0\rangle_2 \xrightarrow{\Delta t_1} e^{i \varphi_1} |0\rangle_1 |1\rangle_c |0\rangle_2 \xrightarrow{\Delta t_2} e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)} |0\rangle_1 |0\rangle_c |1\rangle_2, \quad (4.52)$$

ou simplesmente

$$|10\rangle \xrightarrow{\Delta t_1 + \Delta t_2} |01\rangle, \quad (4.53)$$

a menos de uma fase global, e considerando-se o acoplador C como um qubit auxiliar.

4.3 Análise dos resultados

Na Seção 4.2, a Eq. (4.21) correspondente ao hamiltoniano, na representação de interação, que rege a dinâmica do sistema de qubits supercondutores, mostrado na Figura 4.4b, foi inspecionada via abordagem por dinâmicas efetivas, visando-se à obtenção de termos que contribuíssem de fato para a evolução do sistema, no sentido discutido na Seção 3.3, para os regimes de interação tanto direta quanto não direta entre os qubits Q_1 e Q_2 . Dentro desse escopo foi possível a determinação dos parâmetros temporais da evolução do sistema bem, como termos de acoplamentos efetivos para ambos os regimes. Para o regime de interação direta obtivemos

$$t_d \equiv \Delta t = \frac{\pi}{2\widetilde{g}_{12d}}, \quad (4.54)$$

para

$$\widetilde{g}_{12d} \equiv g_{12} + \frac{g_c^2}{\Omega}, \quad (4.55)$$

com t_d e \widetilde{g}_{12d} sendo o tempo necessário para a troca de uma excitação e o acoplamento efetivo, respectivamente, entre os qubits. Já para o regime de interação não direta obtivemos

$$t_{nd} \equiv \Delta t_1 + \Delta t_2 = \frac{\pi}{2\widetilde{g}_{1c}} + \frac{\pi}{2\widetilde{g}_{2c}}, \quad (4.56)$$

para

$$\widetilde{g}_{1c} \equiv g_c - \frac{g_{12}g_c}{\Omega} \quad \text{e} \quad \widetilde{g}_{2c} \equiv g_c + \frac{g_{12}g_c}{\Omega}, \quad (4.57)$$

com t_{nd} sendo o tempo necessário para a troca de uma excitação, e \widetilde{g}_{1c} e \widetilde{g}_{2c} os acoplamentos efetivos entre Q_1 e C , e, Q_2 e C , respectivamente. Aqui, as duas últimas equações podem ser sumarizadas como

$$t_{nd} \equiv \frac{\pi}{2\widetilde{g}_{12nd}}, \quad (4.58)$$

para

$$\frac{1}{\widetilde{g}_{12nd}} \equiv \frac{1}{\widetilde{g}_{1c}} + \frac{1}{\widetilde{g}_{2c}} = \frac{2\Omega^2}{g_c\Omega^2 - g_{12}^2g_c}, \quad (4.59)$$

com \widetilde{g}_{12nd} sendo um termo com atributo de acoplamento efetivo entre Q_1 e Q_2 quando estes interagem indiretamente.

Agora, é então possível simular a dinâmica do sistema, governada pelo hamiltoniano completo (4.16), partindo-se do estado inicial da Eq. (4.30), e utilizando-se como parâmetros as funções de controle das frequências e os tempos de evolução das Eqs. (4.22), (4.23), (4.24) e (4.54) – para o regime de interação direta – e (4.35), (4.36), (4.37) e (4.58) – para o regime de interação não direta. Ainda, fundamentados pelo que foi mostrado na referência [18], podemos assumir com razoabilidade que $g_{12} \approx 10^{-1}g_c$, bem como $\Omega \approx 20g_c$.

As populações, como função do tempo, dos estados gerados nas simulações com relação aos estados envolvidos nos regimes, tanto de interação direta quanto de interação não direta entre Q_1 e Q_2 – Eqs. (4.34), e (4.53), respectivamente – são mostradas na Figura 4.7. Da análise desta, podemos prontamente notar um maior tempo gasto na troca de uma excitação entre os qubits quando o acoplador C se comporta apenas como um agente passivo (4.7a), com relação à situação em que este media a interação (4.7b). Isso indica uma possível vantagem do segundo processo com relação ao primeiro, no que diz respeito à transferência dessa excitação. De fato, a partir das Eqs. (4.54) e (4.55)

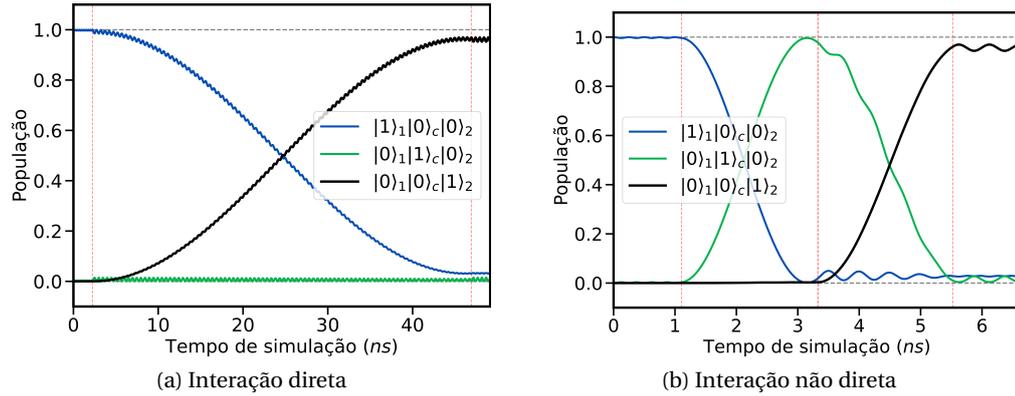


Figura 4.7: População dos estados do sistema calculada para ambos os regimes de interação, em função do tempo. Para ambas as simulações os ajustes experimentais foram configurados como os experimentos realizados na referência [18], em que $\frac{g_c}{g_{12}} \approx 10$ e $\frac{\Omega}{g_c} \approx 20$, com $g_c \approx 100\text{MHz}$ definindo a escala de tempo/frequência do experimento.

Fonte: Os dados foram gerados e compilados utilizando as bibliotecas Python 3, [59] QuTiP [60, 61] e Matplotlib [62].

e Eqs. (4.58) e (4.59), teremos que a relação entre os tempos de evolução nos dois regimes é

$$\frac{t_{nd}}{t_d} = \frac{\widetilde{g}_{12_d}}{\widetilde{g}_{12_{nd}}} = \frac{2g_{12}\Omega^2 + 2g_c^2\Omega}{g_c\Omega^2 - g_{12}^2g_c}. \quad (4.60)$$

Adicionalmente, assumiremos $\frac{g_c}{g_{12}} \equiv \eta = \text{constante}$, estendendo a nossa análise a um maior intervalo de relações entre os acoplamentos. Também iremos definir o parâmetro adimensional $\xi \equiv \frac{\Omega}{g_c}$, levando à relação

$$\frac{t_{nd}}{t_d} = \frac{2\eta\xi^2 + 2\eta^2\xi}{\eta^2\xi^2 - 1}, \quad (4.61)$$

cujo comportamento em função de ξ , e para diferentes valores de η , é mostrado no gráfico da Figura 4.8. Da análise deste, nota-se o rápido decréscimo da relação $\frac{t_{nd}}{t_d}$ quando ambos, ξ e η , crescem. Além disso, é crucial recordar que todo o desenvolvimento da simulação dos processos (4.34) e (4.53), usando os parâmetros temporais de evolução t_d e t_{nd} , foi calcado na imposição da condição indispensável (3.50), relativa à análise por dinâmicas efetivas. Aqui, tal condição é traduzida justamente na exigência de que $\xi \gg 1$, conforme a relação (B.69) demonstrada no Apêndice B.7, e

assim, sua imposição na Eq. (4.61) leva à aproximação

$$\left. \frac{t_{nd}}{t_d} \right|_{\xi \gg 1} \approx \frac{2}{\eta} + \frac{2}{\xi}, \quad (4.62)$$

que tem comportamento assintótico do tipo η^{-1} . Mais uma vez, recorrendo às bases experimentais já mencionadas, é legítimo presumirmos que, para sistemas físicos análogos ao apresentado aqui, g_c será sempre maior que g_{12} por, pelo menos, uma ordem de magnitude. Conseqüentemente, dentro dessas condições, a relação $\frac{t_{nd}}{t_d}$ será sempre menor que a unidade, indicando o aspecto absoluto da vantagem de uma interação mediada, em oposto a uma interação direta, no processo de transferência de uma excitação entre os qubits Q_1 to Q_2 – região abaixo da linha pontilhada no gráfico da Figura 4.8.

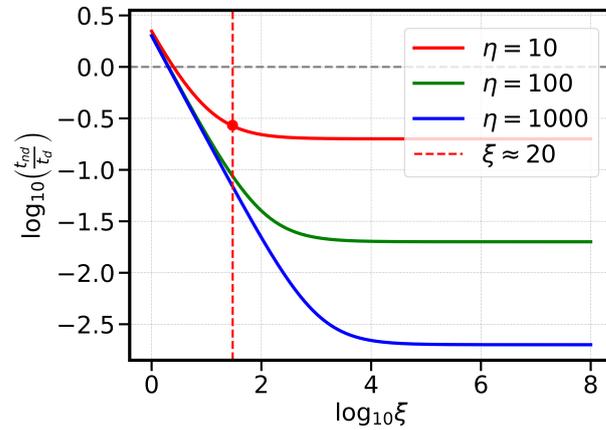


Figura 4.8: Comportamento da relação $\frac{t_{nd}}{t_d}$, entre os tempos de evolução dos regime de interação direta e mediada, em função do parâmetro adimensional ξ , para diferentes valores de η , em escala logarítmica. O ponto em vermelho representa a relação $\frac{t_{nd}}{t_d}$ para os valores dos parâmetros η e ξ utilizado nas simulações mostradas nas Figuras 4.7a e 4.7b.

Fonte: Os dados foram gerados e compilados utilizando as bibliotecas Python 3, [59] QuTiP [60, 61] e Matplotlib [62].

No entanto, apesar de no quesito tempo o processo mediado ser mais vantajoso, no que diz respeito ao quesito recurso, vemos que este se mostrou mais custoso, uma vez que são feitas as exigências de que o qubit intermediário – nesse caso o acoplador – possa ser acuradamente controlado, seja populado e opere como agente ativo. Assim, podemos especular que, levando em consideração ambos os quesitos – tempo e recurso – o caráter absoluto da vantagem do processo mediado possa ser colocado à prova. A situação torna-se ainda mais problemática se admitimos que o qubit intermediário pode apresentar falhas, fazendo com que sua utilização como agente ativo gere uma maior propagação de erros e, conseqüentemente, uma menor fidelidade na transferência da informação quântica.

4.3.1 Sistemas físicos reais – Erros aleatórios e sistemáticos

Até aqui, lidamos com o sistema físico da Figura 4.4b negligenciando qualquer tipo de erro associado à natureza física deste. Então, a fim de consolidar os resultados apresentados até aqui, é importante que investiguemos tal sistema com relação a forma como erros associados ao processo afetariam as previsões feitas. Primeiramente, no que diz respeito a erros associados a processos de dissipação e decoerência, os resultados experimentais das referências [18, 74], que serviram de embasamento até aqui, mostra que dentro da escala de tempo considerada (10 – 100ns), tais erros não terão influência apreciável na dinâmica, já que a escala típica deste se dá em torno de 10μs. Portanto, para as simulações, podemos nos ater apenas às considerações de: (i) erros de natureza aleatória, manifestados como flutuações na frequência; (ii) erros de natureza sistemática, incorporados como um *shift* na frequência com relação ao valor de base; e (iii) erros associados à limitação experimental com relação à implementação da curvas que regem a variação das frequências, como mostrado nas Figuras 4.5 e 4.6. É interessante ressaltar que os erros do tipo (i) e (ii) serão impostos apenas ao acoplador, visto que, aqui, o interesse é avaliar como as falhas no mediador da interação afetam a fidelidade do processo, tanto em sua atuação como agente passivo quanto como agente ativo.

Dessa forma, a fim de se introduzir os erros mencionados no processo de interação direta entre Q_1 e Q_2 , as Eqs. (4.22), (4.23), (4.24), que regem o comportamento das frequências ω_1 , ω_2 e ω_c , deverão ser trocadas por

$$\omega_1(t) = \omega - \Omega + \frac{\Omega}{2} \tanh\left(\frac{4}{\delta}(t - t_0)\right) - \frac{\Omega}{2} \tanh\left(\frac{4}{\delta}(t - t_0 - t_d)\right) \quad (4.63)$$

$$\omega_2(t) = \omega, \quad (4.64)$$

$$\omega_c(t) = \omega + \Omega(1 + \Gamma_t), \quad (4.65)$$

em que t_d é dado pela Eq. (4.54), δ é o parâmetro de suavidade da curva – para $\delta \rightarrow 0$ recuperamos as curvas esboçadas nas Figuras 4.5 e 4.6 – e Γ_t é a função que agrega os erros sistemático e aleatório, e é representada da forma

$$\Gamma_t = \underbrace{\frac{1}{2} \cdot \chi}_{\text{Erro Sist.}} + \underbrace{(-1)^{\kappa_t} \cdot \epsilon_t \cdot \chi}_{\text{Erro Alea.}}, \quad (4.66)$$

sendo o primeiro e o segundo termos responsáveis pela contribuição dos erros de natureza sistemática e aleatória, respectivamente. Em (4.66) χ é a amplitude do erro, $\kappa_t = 0, 1$ é uma variável aleatória binária e ϵ_t é uma variável aleatória dentro do intervalo [0, 1], em que os subíndices t se referem à dependência temporal, em que tais variáveis aleatórias são ressorteadas em cada passo de iteração na simulação. A Figura 4.9 ilustra o comportamento das funções (4.63), (4.64) e (4.65).

Do mesmo modo, para processo de interação não direta entre Q_1 e Q_2 , ilustrado na Figura 4.10,

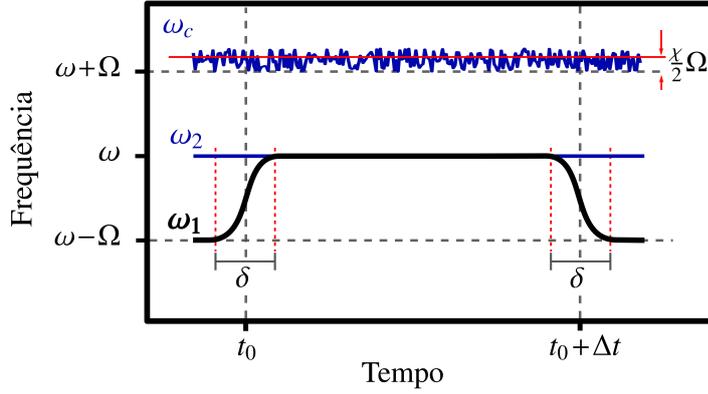


Figura 4.9: Frequências dos qubits e do *coupler* em função do tempo descritas pelas Eqs. (4.63), (4.64), (4.65), relativas ao processo de sintonização da frequência do qubit Q_1 para a interação direta, incluindo-se a limitação experimental de aplicação de campos externos para a alteração da frequência ω_1 , na situação em que o acoplador apresenta erros de natureza sistemática e aleatória. Fonte: Feito pelo autor.

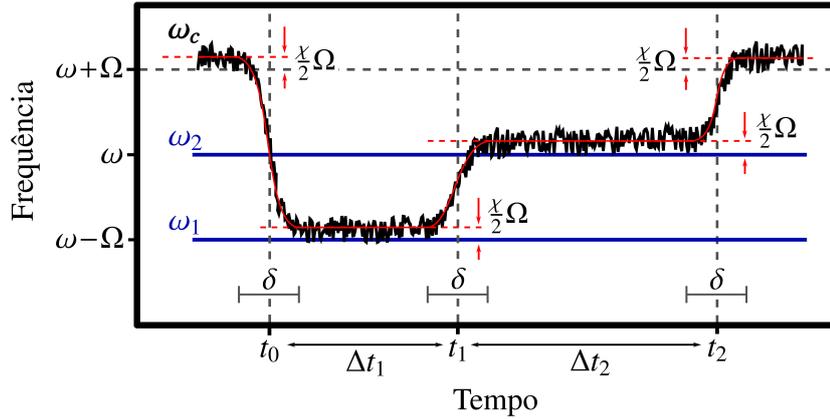


Figura 4.10: Frequências dos qubits e do *coupler* em função do tempo, Eqs. (4.67), (4.68), (4.69), durante o processo de sintonização da frequência do acoplador C na interação não direta, incluindo-se a limitação experimental de aplicação de campos externos para a alteração da frequência ω_c , na situação em que o acoplador apresenta erros de natureza sistemática e aleatória. Fonte: Feito pelo autor.

as Eqs. (4.35), (4.36), (4.37), ficam

$$\omega_1(t) = \omega - \Omega \quad (4.67)$$

$$\omega_2(t) = \omega, \quad (4.68)$$

$$\omega_c(t) = \omega + \Omega - \frac{\Omega}{2} \tanh\left(\frac{4}{\delta}(t - t_0)\right) - \frac{\Omega}{2} \tanh\left(\frac{4}{\delta}(t - t_1)\right) + \Omega \tanh\left(\frac{4}{\delta}(t - t_2)\right) + \Omega \Gamma_t, \quad (4.69)$$

com $t_1 = t_0 + \Delta t_1$ e $t_2 = t_1 + \Delta t_2$, dados pela Eqs. (4.56).

Simulando, então, a dinâmica do sistema, governada pelo hamiltoniano completo (4.16), a partir do estado inicial da Eq. (4.30), agora utilizando as novas funções de controle das frequências (4.63), (4.64) e (4.65), para a interação direta, e (4.67), (4.68) e (4.69), para a interação não direta, foi possível avaliar como a fidelidade dos processos, representados pelas Eqs. (4.34) e (4.53), respectivamente, comporta-se com o aumento da amplitude do erro χ . Esse comportamento é mostrado no gráfico da Figura 4.11. Com relação aos erros de natureza sistemática e aleatória no acoplador, prontamente

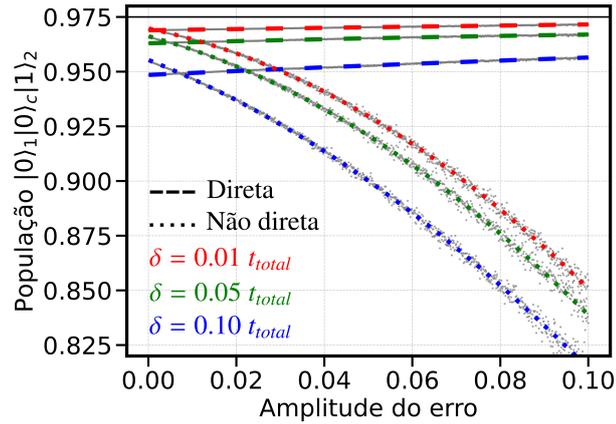


Figura 4.11: Curvas do comportamento da população do estado $|0\rangle_1|0\rangle_c|1\rangle_2$ ao final das simulações, em função da amplitude do erro imposta, para os diferentes regimes de interação. Os pontos sombreados em cinza são o esboço dos dados obtidos a partir das simulações, enquanto as linhas em cores são as curvas resultantes de um *fitting* polinomial quadrático desses pontos. As linhas tracejadas e pontilhadas representam os processos de interação direta e não direta, respectivamente, ambos para diferentes valores do parâmetro δ .

Fonte: Os dados foram gerados e compilados utilizando as bibliotecas Python 3, [59] QuTiP [60, 61] e Matplotlib [62].

notamos que no processo em que este atua ativamente a sensibilidade a erros é consideravelmente maior. O rápido decaimento da fidelidade com o aumento de χ nesse tipo de regime é resultado da utilização de um dispositivo faltoso durante o processo. Em comparação, o processo de interação direta entre Q_1 e Q_2 se mostra mais robusto aos erros mencionados, uma vez que mantém sua fidelidade aproximadamente constante com relação ao aumento de χ . Aqui, a sutil inclinação das curvas – retas tracejadas – relativas a esse regime, indicando um leve aumento da fidelidade com o aumento da amplitude do erro χ , pode ser interpretada como resultado de imprecisões relativas ao modelo adotado. Com relação à limitação experimental de variação das frequências, ambos os regimes apresentaram comportamento semelhante, proporcionalmente falando, no que concerne ao aumento do parâmetro da relação $\frac{\delta}{t_{total}}$, mostrando uma redução da fidelidade refletida num deslocamento das curvas – retas tracejadas para o regime de interação direta, e as curvas pontilhadas para o regime de interação não direta. Aqui, é importante mencionar que, quando confrontados de modo igual, o regime mediado apresentará maiores falhas na fidelidade do processo com o aumento de δ , justamente por ocorrer num tempo total $t_{total} = t_{nd}$ menor. Em contraponto, o fato de o regime

direto apresentar um tempo total $t_{total} = t_d$ de evolução mais longo permite maior tolerância com o aumento da limitação de δ .

CONCLUSÕES GERAIS E PERSPECTIVAS FUTURAS

Este trabalho se iniciou com a ideia de atribuir finalidade prática aos algoritmos quânticos mais conhecidos a partir do empreendimento de uma implementação direta destes, sendo, particularmente, o algoritmo de Deutsch-Jozsa escolhido como o representante para essa investida. Sua implementação no computador quântico da IBM, através da plataforma IBM-Q Experience, foi útil na visualização de como a teoria quântica contribui com a solução eficiente de certos problemas – vantagem do computador quântico, frente ao clássico, na tarefa de se avaliar uma certa função. Ainda, tal feito nos proporcionou apreciar e questionar certos aspectos e nuances de extrema relevância presentes na realização física dos algoritmos quânticos. Dentre estes, expostos na Seção 2.7, a decomposição de portas lógicas multi-qubits em portas de 1 e 2 qubits e a investigação da interação entre dois qubits no contexto da computação quântica em dispositivos supercondutores, que serviu como motivação para os estudos que foram desenvolvidos subsequentemente.

Posto que num contexto teórico tal investigação envolveria a análise de um determinado sistema, representado por um operador hamiltoniano, bem como das equações de movimento que regem sua dinâmica, propôs-se, então, uma análise numérica por meio de simulações computacionais, em complemento à utilização de um método aproximativo para uma abordagem analítica deste sistema. Assim, o Capítulo 3 foi destinado à apresentação e desenvolvimento do método de dinâmicas efetivas, baseada em médias temporais, para operadores hamiltonianos oscilantes no tempo. Na Seção 3.1 vimos que o papel desempenhado pelo parâmetro tempo na dinâmica de um sistema, bem como a manifestação de escalas temporais distintas relacionadas aos termos de autoenergias e interação, de um operador hamiltoniano, foram fundamentais para estabelecimento do método. Ainda, a partir da exploração de propriedades do método e da atribuição de uma interpretação física para este, foi possível estabelecer, de maneira formal, o regime de validade na aplicação das aproximações, sumarizado na exigência de que a condição (3.50) seja respeitada, sendo este o principal resultado

desse capítulo. Ao final, a abordagem de um problema amplamente conhecido, o modelo de Rabi, via método de dinâmicas efetivas, serviu não apenas como uma demonstração de sua aplicação num contexto específico, mas também como comprovação de sua validade, legitimando a escolha deste para o prosseguimento do estudo teórico.

Portanto, identificado o objeto de análise – interação entre dois qubits supercondutores – e o ferramental a ser empregado – estudo analítico via método aproximativo de dinâmicas efetivas e análise numérica via simulações computacionais – destinou-se o Capítulo 4 para tal tarefa. Após uma breve introdução à física envolvida nos dispositivos supercondutores e apresentação do sistema a ser estudado, determinam-se os diferentes regimes em que a interação qubit-qubit – aqui traduzida na transferência de 1 excitação – ocorreriam, sendo esses a interação direta ou indireta entre os qubits, via atuação passiva ou ativa, respectivamente, de um terceiro agente. A partir do cálculo dos hamiltonianos efetivos para ambos os regimes, foi possível evidenciar termos que efetivamente contribuem para a dinâmica, bem como determinar os parâmetros de acoplamento efetivo entre os qubits e os tempos de evolução necessários para a troca da informação quântica. Uma inspeção minuciosa desses parâmetros revelou que a vantagem computacional na transferência de 1 qubit de informação para esses dois processos é fortemente sujeita a características do agente que media a interação. Embora o processo de interação indireta tenha se mostrado consideravelmente mais eficiente por demandar um menor tempo na evolução do sistema, quando é admitido que o mediador da interação possa apresentar falhas, foi visto que a fidelidade desse processo apresenta queda abrupta com o aumento da magnitude dos erros de natureza aleatória, sistemática e também ligados à limitação experimental. Nessas condições, o regime de interação direta pode se mostrar mais vantajoso por apresentar menor sensibilidade a erros, conforme mostrado na Seção 4.3.

Aqui, tendo em vista a topologia do computador quântico exposto na Figura 2.3, vemos que diferentes arquiteturas de processadores apresentaram diferentes erros relacionados à implementação de operações nos qubits. Sendo assim, mediante o que foi constatado na Seção 4.3, é cabível inferir que a busca pela implementação eficiente de portas lógicas ainda é um longo caminho a ser percorrido, dada sua estreita dependência com relação às diferentes características dos sistemas quânticos a serem utilizados no processo. Esse fato, se não anula completamente chance de existir uma estratégia ou condição de eficiência absoluta na implementação de algoritmos quânticos, faz com que, pelo menos, tenhamos de admitir a possibilidade desta inexistir para os dispositivos quânticos da atualidade.

Apesar de tantos questionamentos e aspectos suspeitos terem sido sanados neste trabalho, outros tantos foram gerados e, por mais desanimador que isso possa parecer, podemos, de certo modo, finalizá-lo com o mesmo espírito com o qual o iniciamos, enxergando tais questionamentos como novas motivações para trabalhos futuros, assim como feito na Seção 2.7. Em uma analogia à mitologia grega, talvez a melhor maneira de se portar frente a uma *caixa de Pandora* aberta seja interpretar seu conteúdo apenas como outras novas caixas, cujos interiores, e desconhecimento acerca destes, ainda mantenham nossa curiosidade acesa. Nesse sentido, o que se propõe é a investigação

da possibilidade de generalizar o método de dinâmicas efetivas para sistemas mais complexos, mas valendo-se de algum mecanismo que facilite o cálculo explícito dos hamiltonianos efetivos. Com isso será possível estendermos nossa análise da interação entre qubits para sistemas com 3 ou mais elementos, determinando os parâmetros pertinentes de acoplamentos efetivos e termos de interação. A consequência direta seria refletida na relativa confiança adquirida para se estudar os processadores quânticos diversos, bem como um maior conhecimento e controle acerca da engenharia de portas lógicas multi-qubits e implementação direta e prática dos algoritmos quânticos. Uma ideia imediata concerne à possibilidade de uma descrição e implementação, em um dispositivo supercondutor, de uma arquitetura de memória RAM quântica atuante como operador oráculo para o algoritmo de Grover.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] M. Planck, “üeber das gesetz der energieverteilung im normalspectrum”, *Annalen der Physik* **309**, 553 (1901), <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/andp.19013090310> .
- [2] W. Heisenberg, “über quantentheoretische umdeutung kinematischer und mechanischer beziehungen”, *Zeitschrift für Physik* **33**, 879 (1925).
- [3] E. Schrödinger, “An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules”, *Phys. Rev.* **28**, 1049 (1926).
- [4] W. Neuhauser, M. Hohenstatt, P. Toschek, and H. Dehmelt, “Optical-sideband cooling of visible atom cloud confined in parabolic well”, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 233 (1978).
- [5] A. Steane, “The ion trap quantum information processor”, *Applied Physics B: Lasers and Optics* **64**, 623–643 (1997).
- [6] D. J. Wineland and W. M. Itano, “Laser cooling of atoms”, *Phys. Rev. A* **20**, 1521 (1979).
- [7] A. M. Turing, “On computable numbers, with an application to the entscheidungsproblem”, *Proceedings of the London Mathematical Society* **s2-42**, 230 (1937), <https://londmathsoc.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1112/plms/s2-42.1.230> .
- [8] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*, 10th ed. (Cambridge University Press, 2011).
- [9] P. Benioff, “The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical hamiltonian model of computers as represented by turing machines”, *Journal of Statistical Physics* **22**, 563 (1980).
- [10] D. Deutsch, “Quantum theory, the church–turing principle and the universal quantum computer”, *Proceeding of the Royal Society A* (1985), <http://doi.org/10.1098/rspa.1985.0070>.
- [11] A. N. Oliveira, E. V. B. de Oliveira, A. C. Santos, and C. J. Villas-Bôas, “Quantum algorithms in ibmq experience: Deutsch-jozsa algorithm” (2021), [arXiv:2109.07910 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/2109.07910) .
- [12] P. W. Shor, “Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer”, *SIAM Journal on Computing* **26**, 1484–1509 (1997).

- [13] L. K. Grover, in [Proceedings of the Twenty-Eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing, STOC '96](#) (Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 1996) p. 212–219.
- [14] A. W. Harrow, A. Hassidim, and S. Lloyd, “Quantum algorithm for linear systems of equations”, [Phys. Rev. Lett.](#) **103**, 150502 (2009).
- [15] J. Biamonte, P. Wittek, N. Pancotti, P. Rebentrost, N. Wiebe, and S. Lloyd, “Quantum machine learning”, [Nature](#) **549**, 195–202 (2017).
- [16] J. Bang, A. Dutta, S.-W. Lee, and J. Kim, “Optimal usage of quantum random access memory in quantum machine learning”, [Phys. Rev. A](#) **99**, 012326 (2019).
- [17] D. F. James and J. Jerke, “Effective hamiltonian theory and its applications in quantum information”, [Canadian Journal of Physics](#) **85**, 625–632 (2007).
- [18] Y. Xu, J. Chu, J. Yuan, J. Qiu, Y. Zhou, L. Zhang, X. Tan, Y. Yu, S. Liu, J. Li, F. Yan, and D. Yu, “High-fidelity, high-scalability two-qubit gate scheme for superconducting qubits”, [Physical Review Letters](#) **125** (2020), 10.1103/physrevlett.125.240503.
- [19] G. Arfken, H. Weber, and F. Harris, [Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide](#) (Elsevier Science, 2013).
- [20] J. Sakurai, J. Napolitano, and S. Dahmen, [Mecânica quântica moderna](#) (Bookman, 2013).
- [21] I. C. 1994-2021, “IBM Q Experience”, Plataforma disponível em: <https://quantum-computing.ibm.com/> (2021).
- [22] J. Gambetta, “[Ibm’s roadmap for scaling quantum technology](#)” (2020).
- [23] G. LLC, “[Discover the quantum ai campus](#)” (2021).
- [24] F. Lardinois, “[Ionq claims it has built the most powerful quantum computer yet](#)” (2020).
- [25] M. Kjaergaard, M. E. Schwartz, J. Braumüller, P. Krantz, J. I.-J. Wang, S. Gustavsson, and W. D. Oliver, “Superconducting qubits: Current state of play”, [Annual Review of Condensed Matter Physics](#) **11**, 369–395 (2020).
- [26] J. M. Martinis and K. Osborne, “Superconducting qubits and the physics of josephson junctions”, arXiv preprint cond-mat/0402415 (2004).
- [27] A. W. Cross, L. S. Bishop, J. A. Smolin, and J. M. Gambetta, “Open quantum assembly language” (2017), [arXiv:1707.03429 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/1707.03429) .
- [28] “Qiskit open-source quantum development”, Disponível em: <https://qiskit.org/> (2021).

- [29] A. C. Santos, “Computador quântico da ibm e o ibm quantum experience”, *Revista Brasileira de Ensino de Física [online]* **39** (2017).
- [30] E. V. B. d. Oliveira and F. B. d. Brito, “Computação quântica com ibm q experience” (2019).
- [31] I. C. 2016-2021, “IBM Q Experience”, Disponível em: <https://quantum-computing.ibm.com/docs/> (2021).
- [32] Y. L. A. Garcia, “Elementos de álgebra”, Instituto de Matemática Pura e Aplicada (IMPA) (2018).
- [33] D. Deutsch and R. Jozsa, “Rapid solution of problems by quantum computation”, *Proceeding of the Royal Society A* (1992), <https://doi.org/10.1098/rspa.1992.0167>.
- [34] E. de Oliveira, “Online repository”, <https://github.com/evboliveira/IBMQ-Experience-Deutsch-Jozsa> (2021), url date: 2021-07-21.
- [35] V. Giovannetti, S. Lloyd, and L. Maccone, “Quantum random access memory”, *Physical Review Letters* **100** (2008), [10.1103/physrevlett.100.160501](https://doi.org/10.1103/physrevlett.100.160501).
- [36] V. Giovannetti, S. Lloyd, and L. Maccone, “Architectures for a quantum random access memory”, *Physical Review A* **78** (2008), [10.1103/physreva.78.052310](https://doi.org/10.1103/physreva.78.052310).
- [37] S. Arunachalam, V. Gheorghiu, T. Jochym-O’Connor, M. Mosca, and P. V. Srinivasan, “On the robustness of bucket brigade quantum ram”, *New Journal of Physics* **17**, 123010 (2015).
- [38] O. Regev and L. Schiff, “Impossibility of a quantum speed-up with a faulty oracle” (2012), [arXiv:1202.1027 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/1202.1027) .
- [39] O. D. Matteo, V. Gheorghiu, and M. Mosca, “Fault-tolerant resource estimation of quantum random-access memories”, *IEEE Transactions on Quantum Engineering* **1**, 1–13 (2020).
- [40] Z. HaoSheng and K. LeMan, “Efficient state preparation via ion trap quantum computing and quantum searching algorithm”, *Communications in Theoretical Physics* **33**, 11–14 (2000).
- [41] G.-L. Long and Y. Sun, “Efficient scheme for initializing a quantum register with an arbitrary superposed state”, *Physical Review A* **64** (2001), [10.1103/physreva.64.014303](https://doi.org/10.1103/physreva.64.014303).
- [42] A. N. Soklakov, “State preparation based on grover’s algorithm in the presence of global information about the state”, *Optics and Spectroscopy* **99**, 211 (2005).
- [43] A. N. Soklakov and R. Schack, “Efficient state preparation for a register of quantum bits”, *Phys. Rev. A* **73**, 012307 (2006).
- [44] J. D. R. Constance A. Jones, *Encyclopedia Of Hinduism*, Encyclopedia of world religions (Facts On File, 2007).

- [45] Wikipedia contributors, “Avatar — Wikipedia, the free encyclopedia”, <https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Avatar&oldid=1062137943> (2021), [Online; acesso 27-Dezembro-2021].
- [46] A. F. R. de Toledo Piza, Mecânica Quântica (Edusp, 2009).
- [47] H. G. C. P. P. J. L. Safko, Classical Mechanics, 3rd ed. (Addison-Wesley Longman, 2002 (2010)).
- [48] S. L. Antman S. S., Marsden J. E., Averaging Methods in Nonlinear Dynamical Systems, second edition ed., Applied Mathematical Sciences Vol. 59, Vol. Springer (Springer, 2007).
- [49] O. Gamel and D. F. V. James, “Time-averaged quantum dynamics and the validity of the effective hamiltonian model”, *Physical Review A* **82** (2010), [10.1103/physreva.82.052106](https://doi.org/10.1103/physreva.82.052106).
- [50] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, Table of integrals, series, and products (Academic press, 2014).
- [51] C. S. Kahane, “Generalizations of the riemann-lebesgue and cantor-lebesgue lemmas”, *Czechoslovak Mathematical Journal* **30**, 108 (1980).
- [52] D. Burgarth, P. Facchi, G. Gramegna, and K. Yuasa, “One bound to rule them all: from adiabatic to zeno” (2021), [arXiv:2111.08961 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/2111.08961) .
- [53] I. I. Rabi, “On the process of space quantization”, *Phys. Rev.* **49**, 324 (1936).
- [54] E. Jaynes and F. Cummings, “Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser”, *Proceedings of the IEEE* **51**, 89 (1963).
- [55] T. W. de Oliveira, Estudo do modelo de Rabi no contexto de sistemas quânticos abertos, [Master's thesis](#), Universidade Federal de São Carlos (2009).
- [56] J. Stark and H. Kirschbaum, “Beobachtungen über den effekt des elektrischen feldes auf spektrallinien. iii. abhängigkeit von der feldstärke”, *Annalen der Physik* **348**, 991 (1914), <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/andp.19143480704> .
- [57] P. S. Epstein, “The stark effect from the point of view of schroedinger’s quantum theory”, *Phys. Rev.* **28**, 695 (1926).
- [58] S. H. Autler and C. H. Townes, “Stark effect in rapidly varying fields”, *Phys. Rev.* **100**, 703 (1955).
- [59] G. Van Rossum and F. L. Drake, Python 3 Reference Manual (CreateSpace, Scotts Valley, CA, 2009).
- [60] J. Johansson, P. Nation, and F. Nori, “Qutip: An open-source python framework for the dynamics of open quantum systems”, *Computer Physics Communications* **183**, 1760–1772 (2012).

- [61] J. Johansson, P. Nation, and F. Nori, “Qutip 2: A python framework for the dynamics of open quantum systems”, *Computer Physics Communications* **184**, 1234–1240 (2013).
- [62] J. D. Hunter, “Matplotlib: A 2d graphics environment”, *Computing in Science & Engineering* **9**, 90 (2007).
- [63] A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, “Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation”, *Physical Review A* **69** (2004), [10.1103/physreva.69.062320](https://doi.org/10.1103/physreva.69.062320).
- [64] J. Koch, T. M. Yu, J. Gambetta, A. A. Houck, D. I. Schuster, J. Majer, A. Blais, M. H. Devoret, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, “Charge-insensitive qubit design derived from the cooper pair box”, *Physical Review A* **76** (2007), [10.1103/physreva.76.042319](https://doi.org/10.1103/physreva.76.042319).
- [65] F. Yan, P. Krantz, Y. Sung, M. Kjaergaard, D. L. Campbell, T. P. Orlando, S. Gustavsson, and W. D. Oliver, “Tunable coupling scheme for implementing high-fidelity two-qubit gates”, *Physical Review Applied* **10** (2018), [10.1103/physrevapplied.10.054062](https://doi.org/10.1103/physrevapplied.10.054062).
- [66] M. Naghiloo, “Introduction to experimental quantum measurement with superconducting qubits” (2019), [arXiv:1904.09291 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/1904.09291) .
- [67] M. H. Devoret, A. Wallraff, and J. M. Martinis, “Superconducting qubits: A short review” (2004), [arXiv:cond-mat/0411174 \[cond-mat.mes-hall\]](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0411174) .
- [68] M. Tinkham, [Introduction to superconductivity](#), 2nd ed., International series in pure and applied physics (McGraw Hill, 1996).
- [69] G. P. Antonio Barone, [Physics and applications of Josephson effect](#) (Wiley-VCH, 1982).
- [70] S. Rasmussen, K. Christensen, S. Pedersen, L. Kristensen, T. Bækkegaard, N. Loft, and N. Zinner, “Superconducting circuit companion—an introduction with worked examples”, *PRX Quantum* **2** (2021), [10.1103/prxquantum.2.040204](https://doi.org/10.1103/prxquantum.2.040204).
- [71] W. Feng and D.-w. Wang, “Quantum fredkin gate based on synthetic three-body interactions in superconducting circuits”, *Phys. Rev. A* **101**, 062312 (2020).
- [72] L. Jin, “Implementing high-fidelity two-qubit gates in superconducting coupler architecture with novel parameter regions” (2021), [arXiv:2105.13306 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/2105.13306) .
- [73] C.-K. Hu, “Conditional coherent control with superconducting artificial atoms” (2022), em processo de escrita.
- [74] J. Qiu, Y. Zhou, C.-K. Hu, J. Yuan, L. Zhang, J. Chu, W. Huang, W. Liu, K. Luo, Z. Ni, X. Pan, Z. Yang, Y. Zhang, Y. Chen, X.-H. Deng, L. Hu, J. Li, J. Niu, Y. Xu, T. Yan, Y. Zhong, S. Liu, F. Yan, and D. Yu, “Suppressing coherent two-qubit errors via dynamical decoupling”, *Phys. Rev. Applied* **16**, 054047 (2021).

- [75] Howard E. Haber, “Class notes: The time evolution operator as a time-ordered exponential”, <http://scipp.ucsc.edu/~haber/ph215/TimeOrderedExp.pdf> (2018), [Online; acesso 20-Dezembro-2021].
- [76] T. Kimura, “Explicit description of the zassenhaus formula”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics* **2017** (2017), 10.1093/ptep/ptx044.



MATERIAL SUPLEMENTAR

A.1 Propriedades da convolução

A.1.1 Comutatividade entre a operação de derivação temporal e a operação de convolução

Da definição da Eq. (3.17) temos que

$$\overline{\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}(t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t-t') \frac{\partial \mathbf{O}(t')}{\partial t'} dt', \quad (\text{A.1})$$

em que uma integração por partes nos leva à

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}(t)} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\partial}{\partial t'} [f(t-t') \mathbf{O}(t')] - \frac{\partial f(t-t')}{\partial t'} \mathbf{O}(t') \right\} dt' \\ &= [f(t-t') \mathbf{O}(t')] \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \frac{\partial f(t-t')}{\partial t'} \mathbf{O}(t'). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Aqui, notamos que

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial(t-t')}{\partial t'} \frac{\partial}{\partial(t-t')} = \frac{\partial(t-t')}{\partial t'} \frac{\partial t}{\partial(t-t')} \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t}. \quad (\text{A.3})$$

Ainda, a condição, imposta por (3.18), de que a função $f(t-t')$ tenha área unitária, implica que seu comportamento assintótico nos extremos seja

$$\lim_{t' \rightarrow \pm\infty} f(t-t') = 0. \quad (\text{A.4})$$

Portanto, substituindo os resultados obtidos nas Eqs. (A.3) e (A.4) na Eq. (A.2) temos

$$\overline{\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}(t)} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') \mathbf{O}(t') = \frac{\partial}{\partial t} \overline{\mathbf{O}(t)}. \quad (\text{A.5})$$

A.1.2 Comutatividade entre a operação de hermiteano conjugado e a operação de convolução

Posto que a função $f(t - t')$ é tal que $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, temos como implicação direta que

$$\begin{aligned}
 \overline{\mathbf{O}(t)}^\dagger &= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t - t') \mathbf{O}(t') \right]^\dagger \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f^*(t - t') \mathbf{O}(t')^\dagger \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t - t') \mathbf{O}(t')^\dagger \\
 &= \overline{\mathbf{O}^\dagger(t)},
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

em que $f^*(t - t')$ é o complexo conjugado de $f(t - t')$.

A.1.3 Convolução de Operadores com dependência temporal escalar

Seja $\mathbf{O}(t)$ um operador qualquer, dependente do tempo, que possa ser decomposto da forma

$$\mathbf{O}(t) = g(t) \mathbf{A}, \tag{A.7}$$

em que $g(t)$ é uma função escalar da variável temporal e \mathbf{A} é uma matriz cujos elementos são constantes. Da Eq. (3.17), temos, então, que $\overline{\mathbf{O}(t)}$ será

$$\begin{aligned}
 \overline{\mathbf{O}(t)} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t - t') \mathbf{O}(t') \\
 &= \mathbf{A} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t - t') g(t') \\
 &= [f * g](t) \cdot \mathbf{A} \\
 &= \overline{g(t)} \cdot \mathbf{A}.
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

A.2 Série de Dyson

Conforme mencionado na Seção 3.2, a evolução unitária de um sistema quântico é dada pelo operador de evolução $\mathcal{U}(t, t_0)$ obtido a partir da equação de Schrödinger (3.6)

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot \mathcal{U}(t, t_0). \quad (\text{A.9})$$

A solução desta equação envolve uma integração na variável tempo que é conduzida de acordo com a dependência temporal de \mathcal{H} , e, portanto, precisamos analisar diferentes casos¹.

A.2.1 Caso 1: O operador hamiltoniano não possui dependência temporal explícita

Para o caso em que o \mathcal{H} não possui dependência temporal explícita, ou seja $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = 0$, a solução formal da Eq. (A.9) pode ser obtida a partir de uma expansão em série de Taylor do operador evolução em torno do ponto t' . Assim

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n \mathcal{U}(t, t_0)}{\partial t^n} \right|_{t=t'} \cdot (t - t')^n, \quad (\text{A.10})$$

em que, a partir de $n - 1$ derivações parciais da (A.9), podemos calcular o termo $\frac{\partial^n \mathcal{U}}{\partial t^n}$ como

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{n-1}}{\partial t^{n-1}} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot \frac{\partial^{n-1}}{\partial t^{n-1}} \mathcal{U}(t, t_0) \\ \frac{\partial^n}{\partial t^n} \mathcal{U}(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot \underbrace{\frac{\partial^{n-2}}{\partial t^{n-2}} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0)} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot \frac{\partial^{n-2}}{\partial t^{n-2}} \left[-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot \mathcal{U}(t, t_0) \right] \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \mathcal{H}^2 \cdot \frac{\partial^{n-2}}{\partial t^{n-2}} \mathcal{U}(t, t_0) \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \mathcal{H}^n \cdot \mathcal{U}(t, t_0). \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Desse modo a Eq. (A.10) fica

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \mathcal{H}^n \mathcal{U}(t', t_0) (t - t')^n. \quad (\text{A.12})$$

Por fim, tomando-se o limite $t' \rightarrow t_0$, uma vez que $\mathcal{U}(t_0, t_0) = \mathbf{I}$, obtemos

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \mathcal{H}^n (t - t_0)^n = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t-t_0)}. \quad (\text{A.13})$$

¹As deduções realizadas nesta seção têm forte inspiração nas referências [20, 75].

A.2.2 Caso 2: O operador hamiltoniano possui dependência temporal explícita

Para o caso em que o operador hamiltoniano possui dependência temporal explícita, a solução formal da Eq. (3.6) pode ser obtida a partir de um integração direta da forma

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt' \frac{\partial'}{\partial t} \mathcal{U}(t', t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}(t') \cdot \mathcal{U}(t', t_0) \\ \mathcal{U}(t', t_0) \Big|_{t_0}^t &= \mathcal{U}(t, t_0) - \mathbf{I} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}(t') \cdot \mathcal{U}(t', t_0), \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

e assim

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}(t') \cdot \mathcal{U}(t', t_0). \quad (\text{A.15})$$

Iterando-se a Eq. (A.15) acima obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, t_0) &= \mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{U}(t_1, t_0) \\ &= \mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{H}(t_1) \cdot \left[\mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathcal{H}(t_2) \cdot \mathcal{U}(t_2, t_0) \right] \\ &= \mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{H}(t_1) \cdot \left[\mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathcal{H}(t_2) \cdot \left[\mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \mathcal{H}(t_3) \cdot \mathcal{U}(t_3, t_0) \right] \right] \\ &\quad \vdots \\ &= \mathbf{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2) \cdots \mathcal{H}(t_n), \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

sendo a serie gerada por essa iteração recursiva conhecida como série de Dyson, formulada por Freeman John Dyson em seu desenvolvimento perturbativo do operador de evolução em teoria quântica de campos [20].

Dos limites de integração para cada uma das integrais em (A.16), vemos que, dado uma variável de integração t_i , esta estará compreendida entre o intervalo $t_0 < t_i < t_{i-1}$, de modo que teremos $t_1 > t_2 > t_3 > \cdots > t_n$. Embora t_i sejam variáveis mudas da integração, implicando que a ordem das mesmas pode ser mudada, o ordenamento do produto dos hamiltonianos deve ser mantido, já que, considerando o caso mais geral, $[\mathcal{H}(t_i), \mathcal{H}(t_j)]$ pode ser não nulo, para $i \neq j$. Assim, de modo a mantermos a liberdade na ordem das integrações, preservando o rigor no sequenciamento do produto de $\mathcal{H}(t)$ nos diferentes tempos, é interessante introduzirmos o operador de ordenamento temporal \mathcal{T} e adotarmos a substituição

$$\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2) \cdots \mathcal{H}(t_n) \longrightarrow \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2) \cdots \mathcal{H}(t_n)], \quad (\text{A.17})$$

em que a ação de \mathcal{T} é dada por

$$\mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2) \cdots \mathcal{H}(t_n)] = \mathcal{H}(t_{i_1}) \cdot \mathcal{H}(t_{i_2}) \cdot \mathcal{H}(t_{i_3}) \cdots \mathcal{H}(t_{i_n}), \quad (\text{A.18})$$

para $t_{i_1} > t_{i_2} > t_{i_3} > \dots > t_{i_n}$. Caso $\mathcal{H}(t)$ comute em tempos diferentes, ou seja, $[\mathcal{H}(t_i), \mathcal{H}(t_j)] = 0 \forall i, j$, o operador \mathcal{T} se reduz simplesmente à operação identidade I . Ainda, como forma de simplificar a notação, podemos rotular cada termo da série, e, conseqüentemente, a Eq. (A.16) fica

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{U}_n(t, t_0), \quad (\text{A.19})$$

em que

$$\mathcal{U}_n(t, t_0) \equiv \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2) \cdots \mathcal{H}(t_n)], \quad (\text{A.20})$$

e $\mathcal{U}_0(t, t_0) = \mathcal{U}(t_0, t_0) = I$.

Para prosseguir com a dedução é interessante que analisemos os termos $\mathcal{U}_n(t, t_0)$ não triviais ($n \geq 2$). Para $n = 2$

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_2(t, t_0) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t \left[\int_{t_0}^{t_1} \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] dt_2 \right] dt_1, \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

ficando nítido que a integração é feita, primeiramente, sob a variável t_2 , com limites de integração $t_0 < t_2 < t_1$, e, seguidamente, sob a variável t_1 com limites de integração $t_0 < t_1 < t$, que corresponde à área hachurada em vermelho na Figura A.1a. Aqui,

$$\mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] = \mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2), \quad (\text{A.22})$$

já que $t_1 > t_2$. Então, conforme mencionado (e imposto, por construção), o fato de a atuação do operador de ordenamento temporal \mathcal{T} garantir o sequenciamento correto do produto entre $\mathcal{H}(t_1)$ e $\mathcal{H}(t_2)$ possibilita a liberdade na permutação da ordem de integração sob as variáveis t_1 e t_2 , desde que mantida a mesma área no plano O_{t_1, t_2} sob a qual se efetua a integração. Assim, $\mathcal{U}_2(t, t_0)$ fica

$$\mathcal{U}_2(t, t_0) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t \left[\int_{t_2}^t \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] dt_1 \right] dt_2, \quad (\text{A.23})$$

com a integração realizada, primeiramente, sob a variável t_1 , com limites de integração $t_2 < t_1 < t$, e, seguidamente, sob a variável t_2 com limites de integração $t_0 < t_2 < t$, que corresponde à área hachurada em vermelho na Figura A.1b, sendo

$$\mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] = \mathcal{H}(t_2) \cdot \mathcal{H}(t_1), \quad (\text{A.24})$$

posto que $t_2 > t_1$.

Portanto, somando as Eqs. (A.21) e (A.23) obtemos

$$\mathcal{U}_2(t, t_0) = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{2} \left\{ \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] + \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] \right\}. \quad (\text{A.25})$$

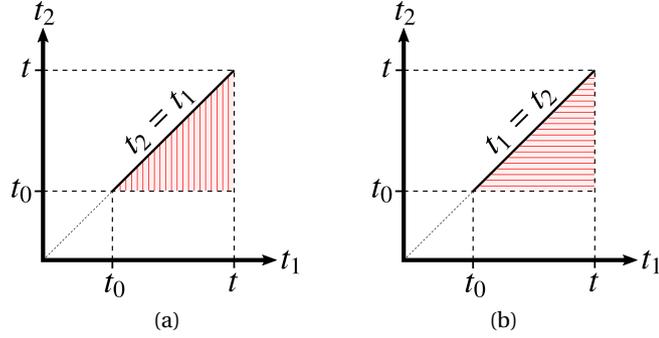


Figura A.1: (a) Região de integração sob as variáveis t_1, t_2 tal que $t_0 < t_2 < t_1$ e $t_0 < t_1 < t$. (b) Região de integração sob as variáveis t_1, t_2 tal que $t_2 < t_1 < t$ e $t_0 < t_2 < t$.

Visto que t_1 e t_2 são variáveis mudas, podemos realizar a troca $t_1 \leftrightarrow t_2$ no segundo termo da Eq. (A.25), resultando em

$$\begin{aligned}
 \mathcal{U}_2(t, t_0) &= -\frac{1}{2\hbar^2} \left\{ \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] \right\} \\
 &= -\frac{1}{2\hbar^2} \int_{t_0}^t dt_1 \left\{ \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] + \int_{t_1}^t dt_2 \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)] \right\} \\
 &= -\frac{1}{2\hbar^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \mathcal{T}[\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2)]. \tag{A.26}
 \end{aligned}$$

Ainda, o operador de ordenamento temporal \mathcal{T} pode ser retirado da integral, uma vez que sua atuação, segundo a Eq. (A.18), não depende das variáveis t_1 e t_2 . A Eq. (A.26) acima fica, então

$$\begin{aligned}
 \mathcal{U}_2(t, t_0) &= -\frac{1}{2\hbar^2} \mathcal{T} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2) \\
 &= -\frac{1}{2\hbar^2} \mathcal{T} \int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{H}(t_1) \cdot \int_{t_0}^t dt_2 \mathcal{H}(t_2) \\
 &= -\frac{1}{2\hbar^2} \mathcal{T} \left[\int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{H}(t_1) \right] \cdot \left[\int_{t_0}^t dt_2 \mathcal{H}(t_2) \right], \tag{A.27}
 \end{aligned}$$

e, novamente, substituindo ambas as variáveis mudas t_1 e t_2 por t'

$$\mathcal{U}_2(t, t_0) = -\frac{1}{2\hbar^2} \mathcal{T} \left[\int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}(t') \right]^2, \tag{A.28}$$

onde desvinculamos os limites e as variáveis de integração das variáveis t_1 e t_2 .

Prosseguindo, para $n = 3$ teremos, segundo (A.20)

$$\mathcal{U}_3(t, t_0) = \frac{i}{\hbar^3} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3, \tag{A.29}$$

em que a integração nas variáveis t_1, t_2 e t_3 é realizada sob um volume \mathcal{V} limitado pela intersecção dos planos $t_1 = t, t_2 = t_1$ e $t_3 = t_2$ para $t_0 < t_3 < t_2 < t_1 < t$, ilustrado na Figura A.2. Adotando o mesmo procedimento, garantindo-se a atuação do operador de ordenamento temporal e o volume

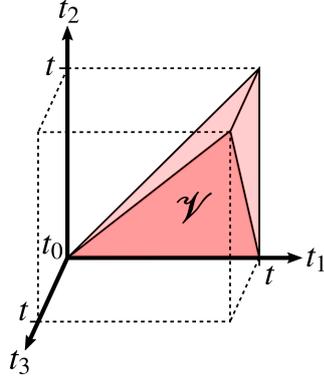


Figura A.2: Volume de integração sob as variáveis t_1 , t_2 , t_3 , em que a origem foi transladada para o ponto (t_0, t_0, t_0) para facilitar a visualização. O volume é limitado pelo tetraedro formado a partir da intersecção dos planos $t_1 = t$, $t_2 = t_1$ e $t_3 = t_2$ para $t_0 < t_3 < t_2 < t_1 < t$.

de integração, podemos incluir em (A.29), então, as 6 permutações na ordem de integração das variáveis mudas t_1 , t_2 , t_3 , de modo que a manipulação dos índices mudos gera

$$\begin{aligned}
 \mathcal{U}_3(t, t_0) &= \frac{\mathfrak{i}}{\hbar^3} \frac{1}{6} \left\{ \int_{\mathcal{V}} dt_1 dt_2 dt_3 + \int_{\mathcal{V}} dt_1 dt_3 dt_2 + \int_{\mathcal{V}} dt_2 dt_1 dt_3 + \int_{\mathcal{V}} dt_2 dt_3 dt_1 \right. \\
 &\quad \left. + \int_{\mathcal{V}} dt_3 dt_1 dt_2 + \int_{\mathcal{V}} dt_3 dt_2 dt_1 \right\} \mathcal{T} [\mathcal{H}(t_1) \cdot \mathcal{H}(t_2) \cdot \mathcal{H}(t_3)] \\
 &= \frac{\mathfrak{i}}{6\hbar^3} \mathcal{T} \left[\int_{t_0}^t \mathcal{H}(t_1) dt_1 \right] \left[\int_{t_0}^t \mathcal{H}(t_2) dt_2 \right] \left[\int_{t_0}^t \mathcal{H}(t_3) dt_3 \right] \\
 &= \frac{\mathfrak{i}}{6\hbar^3} \mathcal{T} \left[\int_{t_0}^t \mathcal{H}(t_1) dt' \right]^3. \tag{A.30}
 \end{aligned}$$

Assim, extrapolando o mesmo raciocínio para termos $\mathcal{U}_n(t, t_0)$, com $n > 3$, nota-se que, uma vez garantida a atuação do operador de ordenamento temporal \mathcal{T} , há a possibilidade de um total de $n!$ permutações das n variáveis de integração, desvinculando os limites e variáveis de integração das variáveis t_1, t_2, \dots, t_n de maneira que

$$\mathcal{U}_n(t, t_0) = \left(\frac{-\mathfrak{i}}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \mathcal{T} \left[\int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}(t') \right]^n. \tag{A.31}$$

Portanto, a substituição da Eq. (A.31) na Eq. (A.19), resulta, finalmente, na expressão

$$\begin{aligned}
 \mathcal{U}(t, t_0) &= \mathcal{T} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-\mathfrak{i}}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \left[\int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}(t') \right]^n \\
 &= \mathcal{T} e^{-\frac{\mathfrak{i}}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}(t')}. \tag{A.32}
 \end{aligned}$$

A.3 Relação de Incerteza Energia-Tempo

Partindo-se do princípio de incerteza generalizado [46], temos que

$$\langle \sigma_{\mathbf{o}}^{(\phi)} \rangle \langle \sigma_{\mathbf{g}}^{(\phi)} \rangle \geq \left| \frac{\langle \phi | [\mathbf{o}, \mathbf{g}] | \phi \rangle}{2i} \right|, \quad (\text{A.33})$$

para dois operadores \mathbf{o} e \mathbf{g} quaisquer, em que

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{\mathbf{o}}^{(\phi)} \rangle^2 &= \langle \phi | \mathbf{o}^2 | \phi \rangle - \langle \phi | \mathbf{o} | \phi \rangle^2, \\ \langle \sigma_{\mathbf{g}}^{(\phi)} \rangle^2 &= \langle \phi | \mathbf{g}^2 | \phi \rangle - \langle \phi | \mathbf{g} | \phi \rangle^2, \end{aligned}$$

são os desvios quadráticos médios desses operadores, respectivamente, com relação ao vetor de estado $|\phi\rangle$. Dado, então, um certo sistema, governado pelo operador hamiltoniano \mathcal{H} , e um certo observável A , tal que A não é constante de movimento, temos, pela equação de movimento de Heisenberg (3.1), que a evolução deste observável é dada por

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = [A, \mathcal{H}] \quad (\text{A.34})$$

Assim a relação de incerteza (A.33) fica

$$\langle \sigma_A^{(\phi)} \rangle \langle \sigma_{\mathcal{H}}^{(\phi)} \rangle \geq \frac{\hbar}{2} \left| \left\langle \phi \left| \frac{dA}{dt} \right| \phi \right\rangle \right|, \quad (\text{A.35})$$

em que se tem a associação de duas quantidades relacionadas ao observável A , seu desvio quadrático médio e a taxa de variação do seu valor esperado, ambos com relação aos estados. Podemos, então, definir a relação

$$\frac{\langle \sigma_A^{(\phi)} \rangle}{\left| \left\langle \phi \left| \frac{dA}{dt} \right| \phi \right\rangle \right|} \equiv \tau_A^{(\phi)}, \quad (\text{A.36})$$

em que, a partir de uma análise dimensional verificamos que $\tau_A^{(\phi)}$ possui unidade de tempo, podendo-lhe, aqui, ser atribuído o sentido físico da escala de tempo típica para que o valor esperado de A varie da ordem do seu desvio quadrático médio. Substituindo-se a Eq. (A.36) em (A.35), obtemos a *relação de incerteza energia-tempo*

$$\tau_A^{(\phi)} \langle \sigma_{\mathcal{H}}^{(\phi)} \rangle \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (\text{A.37})$$

implicando no estabelecimento de um limite inferior

$$\tau_A^{(\phi)} \geq \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\langle \sigma_{\mathcal{H}}^{(\phi)} \rangle} \quad (\text{A.38})$$

para a escala de tempo mencionada. Aqui, é importante enfatizar que, ao contrário da mais conhecida *relação de incerteza posição-momento* por exemplo, a relação (A.37) não provém diretamente da estrutura cinética da teoria, uma vez que o tempo não constitui um observável físico no sentido

proposto pela construção da mecânica quântica. Sua dedução advém apenas de uma interpretação qualitativa de aspectos dinâmicos, indicando que, para processos em que a incerteza na energia é pequena – aqui representada por uma projeção significativa entre o vetor de estado $|\phi\rangle$ e um dos autoestados de \mathcal{H} – a escala de tempo para que o valor médio de A varie apreciavelmente – da ordem do seu desvio médio quadrático – é aumentada. Em contra partida, para situações em que a incerteza na energia é grande, o valor esperado do observável A evoluirá mais rapidamente.

Supondo que o hamiltoniano \mathcal{H} que rege a dinâmica do sistema seja dado da forma (3.9) e que o vetor de estado $|\phi\rangle$ seja um autoestado de energia $|n\rangle$ de $\mathcal{H}^{(0)}$ qualquer, temos

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_{\mathcal{H}}^{(n)} \rangle &= \sqrt{\langle n | \mathcal{H}^2 | n \rangle - \langle n | \mathcal{H} | n \rangle^2} \\
&= \sqrt{\langle n | (\mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)}) (\mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)}) | n \rangle - \langle n | (\mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)}) | n \rangle^2} \\
&= \sqrt{\langle n | (\mathcal{H}^{(0)2} + \mathcal{H}^{(0)} \mathcal{H}^{(1)} + \mathcal{H}^{(1)} \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)2}) | n \rangle - (\langle n | \mathcal{H}^{(0)} | n \rangle + \langle n | \mathcal{H}^{(1)} | n \rangle)^2} \\
&= \sqrt{\langle n | \mathcal{H}^{(0)2} | n \rangle + \langle n | \mathcal{H}^{(0)} \mathcal{H}^{(1)} | n \rangle + \langle n | \mathcal{H}^{(1)} \mathcal{H}^{(0)} | n \rangle + \langle n | \mathcal{H}^{(1)2} | n \rangle - \langle n | \mathcal{H}^{(0)} | n \rangle^2 - 2 \langle n | \mathcal{H}^{(0)} | n \rangle \langle n | \mathcal{H}^{(1)} | n \rangle - \langle n | \mathcal{H}^{(1)} | n \rangle^2} \\
&= \sqrt{E_n^2 + 2E_n \langle n | \mathcal{H}^{(1)} | n \rangle + \langle n | \mathcal{H}^{(1)2} | n \rangle - E_n^2 - 2E_n \langle n | \mathcal{H}^{(1)} | n \rangle - \langle n | \mathcal{H}^{(1)} | n \rangle^2} \\
&= \sqrt{\langle n | \mathcal{H}^{(1)2} | n \rangle - \langle n | \mathcal{H}^{(1)} | n \rangle^2} \\
&= \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle.
\end{aligned} \tag{A.39}$$

Assim, a Eq. (A.38) fica

$$\tau_A^{(n)} \geq \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle}. \tag{A.40}$$

A.4 Fórmula de Zassenhaus

A fórmula de Zassenhaus é obtida através de uma expansão da relação de Baker–Campbell–Hausdorff [76] e é dada por

$$e^{\lambda(X+Y)} = e^{\lambda X} e^{\lambda Y} e^{-\frac{\lambda^2}{2}[X,Y]} e^{\frac{\lambda^3}{6}(2[Y,[X,Y]]+[X,[X,Y]])} e^{\frac{\lambda^4}{24}([[[X,Y],X],X]+3[[X,Y],X],Y)+[[X,Y],Y],Y)} \dots, \quad (\text{A.41})$$

para $\lambda \in \mathbb{C}$, e X e Y dois operadores quaisquer. No caso específico em que $[X, Y] = 0$, a Eq. (A.41) se reduz à

$$e^{\lambda(X+Y)} = e^{\lambda X} e^{\lambda Y}. \quad (\text{A.42})$$

A.5 Demonstração: dependência da hermiteanidade do hamiltoniano com relação à unitariedade do operador de evolução temporal

Tomando a Eq. (3.6) e seu hermiteano conjugado, temos

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot \mathcal{U}, \quad (\text{A.43})$$

$$\frac{\partial \mathcal{U}^\dagger}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{H}^\dagger, \quad (\text{A.44})$$

em que a dependência temporal explícita foi omitida para alívio da notação. Aplicando o produto à direita entre (A.43) e \mathcal{U}^\dagger , e à esquerda entre (A.44) e \mathcal{U} , e somando ambos resultados, temos

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} \cdot \mathcal{U}^\dagger = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \cdot \mathcal{U} \cdot \mathcal{U}^\dagger, \\ \mathcal{U} \cdot \frac{\partial \mathcal{U}^\dagger}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \mathcal{U} \cdot \mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{H}^\dagger, \end{cases} \quad (\text{A.45})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} \cdot \mathcal{U}^\dagger + \mathcal{U} \cdot \frac{\partial \mathcal{U}^\dagger}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H} \cdot \mathcal{U} \cdot \mathcal{U}^\dagger - \mathcal{U} \cdot \mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{H}^\dagger) \\ \frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{U} \cdot \mathcal{U}^\dagger) &= -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H} \cdot \mathcal{U} \cdot \mathcal{U}^\dagger - \mathcal{U} \cdot \mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{H}^\dagger). \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

Logo, impondo-se que $\mathcal{U} \cdot \mathcal{U}^\dagger = \mathbf{I}$, para \mathbf{I} a matriz identidade, teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{I} &= -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H} \cdot \mathbf{I} - \mathbf{I} \cdot \mathcal{H}^\dagger) \\ 0 &= -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H} - \mathcal{H}^\dagger) \\ \mathcal{H}^\dagger &= \mathcal{H}. \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

B.1 Detalhes das passagens matemáticas para o algoritmo de Deutsch – Seção 2.3

Para que a interferência entre os estados quânticos, mencionada na Seção 2.3, se torne evidente, precisamos analisar cuidadosamente os diferentes casos a partir da Eq. (2.23). Quando $f(x)$ for uma função *constante*, teremos $f(1) = f(0) = \alpha$, com α uma constante qualquer. Assim, a Eq. (2.23) fica

$$\begin{aligned} |\psi^{(3)}\rangle &= (-1)^\alpha \left[\frac{|0\rangle + |1\rangle}{2} + \frac{|0\rangle - |1\rangle}{2} \right] \otimes |-\rangle \\ &= (-1)^\alpha |0\rangle \otimes |-\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Ainda, se $f(x)$ for uma função *balanceada*, teremos $f(0) \neq f(1)$. Aqui, é possível verificar que, para esse caso,

$$f(1) = 1 \oplus f(0) \implies (-1)^{f(1)} = -(-1)^{f(0)},$$

seja $f(0) = 0$ e $f(1) = 1$, ou $f(0) = 1$ e $f(1) = 0$. Assim, a Eq. (2.23) fica

$$\begin{aligned} |\psi^{(3)}\rangle &= (-1)^{f(0)} \left[\frac{|0\rangle + |1\rangle}{2} - \frac{|0\rangle - |1\rangle}{2} \right] \otimes |-\rangle \\ &= (-1)^{f(0)} |1\rangle \otimes |-\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Logo, das Eqs. (B.1) e (B.2) vemos que em uma única medição no primeiro registro conseguimos determinar, com certeza, a característica da função, com os seguintes resultados:

$$\begin{cases} 0, & \text{se } f(x) \text{ for constante,} \\ 1, & \text{se } f(x) \text{ for balanceada.} \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

De fato, ainda é possível reunir os resultados de ambas Eqs. (B.1) e (B.2) em uma única, nos atentando para o fato de que

$$f(0) \oplus f(1) = \begin{cases} 0, & \text{se } f(0) = f(1), \\ 1, & \text{se } f(0) \neq f(1), \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

e assim, a Eq. (2.23) se resume ao resultado final

$$|\psi^{(3)}\rangle = (-1)^{f(0)} |f(0) \oplus f(1)\rangle \otimes |-\rangle, \quad (\text{B.5})$$

atestando que em uma única avaliação da função $f(x)$ obtemos sua informação global.

B.2 Detalhes das passagens matemáticas para o algoritmo de Deutsch-Jozsa – Seção 2.5

No algoritmo de Deutsch-Jozsa a função $f(x)$ a ser avaliada permite N entradas em seu domínio, sendo, então, necessários n qubits para representar as $N = 2^n$ possíveis entradas. Na representação decimal das variáveis, x pode assumir os valores correspondentes aos números naturais de 0 à $N - 1$, sendo sua correspondente representação binária $x_{n-1} x_{n-2} \dots x_1 x_0$, em que x_i é variável binária que assume valores 0 ou 1. Isso implica que

$$x = x_0 \cdot 2^0 + x_1 \cdot 2^1 + x_2 \cdot 2^2 + \dots + x_{n-1} \cdot 2^{n-1}. \quad (\text{B.6})$$

Assim, para a construção do algoritmo podemos representar ambos os registros quânticos (o primeiro com n qubits codificando as $N = 2^n$ entradas da função $f(x)$, e o segundo com 1 qubit para codificar os possíveis valores de tal função) da forma $|x\rangle |f(x)\rangle$ com a variável de entrada na representação decimal, ou

$$|x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}\rangle |f(x)\rangle,$$

com a variável de entrada na representação binária. Aqui, é importante salientar que as duas representações são equivalentes, e ao longo da construção algébrica do algoritmo, por vezes, será conveniente explicitar uma ou outra. Tendo em mente essas colocações, o desenvolvimento do algoritmo prossegue, então, conforme já apresentado na Seção 2.5, e assim, das Eqs. (2.25) e (2.26), tínhamos

$$|\psi^{(0)}\rangle = \underbrace{|0\rangle^{\otimes n}}_x \otimes \underbrace{|1\rangle}_{f(x)}, \quad (\text{B.7})$$

$$|\psi^{(1)}\rangle = (\mathbf{H}^{\otimes n} \otimes \mathbf{H}) |\psi^{(0)}\rangle = |+\rangle^{\otimes n} |-\rangle, \quad (\text{B.8})$$

sendo o primeiro registro uma superposição, de igual amplitude de probabilidade, de todos os possíveis estados de x , da forma

$$\begin{aligned} |+\rangle^{\otimes n} &= \overbrace{|+\rangle \otimes |+\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle}^{n \text{ vezes}} \\ &= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \dots \otimes \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{|0, 0, \dots\rangle + |1, 0, \dots\rangle + |0, 1, \dots\rangle + \dots + |1, 1, \dots\rangle}{\sqrt{2^n}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x_0=0}^1 \sum_{x_1=0}^1 \dots \sum_{x_{n-1}=0}^1 |x_0 x_1 \dots x_{n-1}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Aqui, para alívio de notação, será conveniente representar a soma

$$\sum_{x \in \{0,1\}^n} \equiv \sum_{x_0=0}^1 \sum_{x_1=0}^1 \sum_{x_2=0}^1 \dots \sum_{x_{n-1}=0}^1, \quad (\text{B.10})$$

e assim, a Eq. (B.8) fica

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{x \in \{0,1\}^n} \frac{|x\rangle}{\sqrt{2^n}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (\text{B.11})$$

Aplicando a operação \mathbf{U}_f temos

$$\begin{aligned} |\psi^{(2)}\rangle &= \mathbf{U}_f |\psi^{(1)}\rangle \\ &= \mathbf{U}_f \sum_{x \in \{0,1\}^n} \frac{|x\rangle |0\rangle - |x\rangle |1\rangle}{\sqrt{2^n} \sqrt{2}} \\ &= \sum_{x \in \{0,1\}^n} \frac{\mathbf{U}_f |x\rangle |0\rangle - \mathbf{U}_f |x\rangle |1\rangle}{\sqrt{2^n} \sqrt{2}} \\ &= \sum_{x \in \{0,1\}^n} \frac{|x\rangle |0 \oplus f(x)\rangle - |x\rangle |1 \oplus f(x)\rangle}{\sqrt{2^n} \sqrt{2}} \\ &= \sum_{x \in \{0,1\}^n} \frac{|x\rangle}{\sqrt{2^n}} \left(\frac{|0 \oplus f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle}{\sqrt{2}} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Considerando que

$$|0 \oplus f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle = \begin{cases} |0\rangle - |1\rangle & , \text{ se } f(x) = 0 \\ (-1)(|0\rangle - |1\rangle) & , \text{ se } f(x) = 1 \end{cases}, \quad (\text{B.13})$$

podemos chegar ao estado final da operação \mathbf{U}_f

$$\begin{aligned} |\psi^{(2)}\rangle &= \sum_{x \in \{0,1\}^n} \frac{|x\rangle}{\sqrt{2^n}} \left((-1)^{f(x)} \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \\ &= \left(\sum_{x \in \{0,1\}^n} (-1)^{f(x)} \frac{|x\rangle}{\sqrt{2^n}} \right) \otimes |-\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Deve-se, agora, aplicar a operação Hadamard no primeiro registro resultando em

$$\begin{aligned} |\psi^{(3)}\rangle &= (\mathbf{H}^{\otimes n} \otimes \mathbf{I}) |\psi^{(2)}\rangle \\ &= \left(\sum_{x \in \{0,1\}^n} (-1)^{f(x)} \frac{\mathbf{H}^{\otimes n} |x\rangle}{\sqrt{2^n}} \right) \otimes |-\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

A partir daqui, omitindo o segundo registro e desenvolvendo os termos, temos que o termo entre parênteses fica

$$\begin{aligned} \sum_{x \in \{0,1\}^n} (-1)^{f(x)} \frac{\mathbf{H}^{\otimes n} |x\rangle}{\sqrt{2^n}} &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x_0=0}^1 \sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_{n-1}=0}^1 (-1)^{f(x_{n-1} \dots x_1 x_0)} (\mathbf{H} |x_0\rangle) \otimes (\mathbf{H} |x_1\rangle) \otimes \cdots \otimes (\mathbf{H} |x_{n-1}\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x_0=0}^1 \sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_{n-1}=0}^1 (-1)^{f(x_{n-1} \dots x_1 x_0)} \bigotimes_{i=0}^{n-1} \mathbf{H} |x_i\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x_0=0}^1 \sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_{n-1}=0}^1 (-1)^{f(x_{n-1} \dots x_1 x_0)} \bigotimes_{i=0}^{n-1} \frac{|0\rangle + (-1)^{x_i} |1\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Ainda, podemos reescrever a produtória da Eq. (B.16), acima, como

$$\begin{aligned}
 \bigotimes_{i=0}^{n-1} \frac{|0\rangle + (-1)^{x_i} |1\rangle}{\sqrt{2}} &= \frac{|0\rangle + (-1)^{x_0} |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + (-1)^{x_1} |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \dots \otimes \frac{|0\rangle + (-1)^{x_{n-1}} |1\rangle}{\sqrt{2}} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|0, 0, 0, \dots, 0\rangle + (-1)^{x_0} |1, 0, 0, \dots, 0\rangle + (-1)^{x_1} |0, 1, 0, \dots, 0\rangle + (-1)^{x_0+x_1} |1, 1, 0, \dots, 0\rangle + \dots \\
 &\quad + (-1)^{x_0+x_1+\dots+x_{n-1}} |1, 1, 1, \dots, 1\rangle) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{z_0=0}^1 \sum_{z_1=0}^1 \dots \sum_{z_{n-1}=0}^1 (-1)^{x_0 \cdot z_0 + x_1 \cdot z_1 + \dots + x_{n-1} \cdot z_{n-1}} |z_0, z_1, \dots, z_{n-1}\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{z_0=0}^1 \sum_{z_1=0}^1 \dots \sum_{z_{n-1}=0}^1 (-1)^{\sum_{i=0}^{n-1} x_i \cdot z_i} |z_0, z_1, \dots, z_{n-1}\rangle, \tag{B.17}
 \end{aligned}$$

com $z_i = 0, 1$. Assim, substituindo as Eqs. (B.16) e (B.17) na Eq. (2.32), o vetor de estado $|\psi^{(3)}\rangle$ fica

$$\begin{aligned}
 |\psi^{(3)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x_0=0}^1 \sum_{x_1=0}^1 \dots \sum_{x_{n-1}=0}^1 (-1)^{f(x_{n-1} \dots x_1 x_0)} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{z_0=0}^1 \sum_{z_1=0}^1 \dots \sum_{z_{n-1}=0}^1 (-1)^{\sum_{i=0}^{n-1} x_i \cdot z_i} |z_0, z_1, \dots, z_{n-1}\rangle \\
 &= \frac{1}{2^n} \sum_{x_0=0}^1 \sum_{x_1=0}^1 \dots \sum_{x_{n-1}=0}^1 \sum_{z_0=0}^1 \sum_{z_1=0}^1 \dots \sum_{z_{n-1}=0}^1 (-1)^{\sum_{i=1}^n x_i \cdot z_i + f(x_{n-1} \dots x_1 x_0)} |z_1, z_2, \dots, z_n\rangle \\
 &= \sum_{x \in \{0,1\}^n} \sum_{z \in \{0,1\}^n} \frac{(-1)^{x \cdot z + f(x)}}{2^n} |z\rangle, \tag{B.18}
 \end{aligned}$$

em que as somatórias foram escrita conforme a definição na Eq. (B.10) e $x \cdot z \equiv \sum_{i=1}^n x_i \cdot z_i$.

Fazendo, ainda, a substituição $c_z \equiv \sum_x \frac{(-1)^{x \cdot z + f(x)}}{2^n}$ na Eq. (B.18), o estado $|\psi^{(3)}\rangle$ fica

$$\begin{aligned}
 |\psi^{(3)}\rangle &= \sum_{z \in \{0,1\}^n} c_z |z\rangle \equiv \sum_{z=0}^{N-1} c_z |z\rangle \\
 &= c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle + \dots + c_{N-1} |N-1\rangle. \tag{B.19}
 \end{aligned}$$

Agora, analisando a probabilidade de que em uma medição no primeiro registro obtemos o estado $|0\rangle \equiv |0, 0, \dots, 0\rangle$, temos

$$|c_0|^2 = \left| \frac{1}{2^n} \sum_x (-1)^{f(x)} \right|^2, \tag{B.20}$$

começando a ficar evidente, portanto, a propriedade de interferência dos estados quânticos. Se $f(x)$ é *constante*, podemos escrever $f(x) = \alpha$ para qualquer x , sendo α uma constante arbitrária. Assim, a probabilidade de obtermos o estado $|0\rangle$ numa medida fica

$$|c_0|^2 = \left| \frac{(-1)^\alpha}{2^n} \sum_{x=0}^{2^n-1} 1 \right|^2 = \left| \frac{(-1)^\alpha}{2^n} 2^n \right|^2 = 1. \tag{B.21}$$

Mas, como todas as operações realizadas foram unitárias, da condição de normalização do estado final $|\psi^{(3)}\rangle$ na Eq. (B.19) temos

$$\begin{aligned}
 \sum_z |c_z|^2 &= 1 \\
 |c_0|^2 + |c_1|^2 + \dots + |c_{N-1}|^2 &= 1 \\
 1 + |c_1|^2 + |c_2|^2 + \dots &= 1, \tag{B.22}
 \end{aligned}$$

que só será possível se $c_z = 0$ para qualquer $z \neq 0$. Logo, medindo-se o primeiro registro, necessariamente, obteremos o estado $|0\rangle$.

Ainda, se $f(x)$ é *balanceada*, então isso significa que $f(x) = 1$ para metade das entrada $x \in \{0, N-1\}$ e 0 para a outra metade, de modo que a somatória na Eq. (B.20) se anula, e, conseqüentemente, a probabilidade de obtermos o estado $|0\rangle$ numa medida fica

$$|c_0|^2 = 0, \tag{B.23}$$

implicando que $c_0 = 0$. Logo, medindo-se o primeiro registro, pelo menos um dos n qubits estará, necessariamente, no estado $|1\rangle$, e obteremos qualquer outro estado que não $|0\rangle$.

B.3 Obtenção das equações de movimento para a representação de interação – Seção 3.1

Aplicando-se a relação de identidade $\mathcal{U}^{(0)} \cdot \mathcal{U}^{(0)\dagger} = I$, para $\mathcal{U}^{(0)}$ conforme (3.12), na Eq. (3.2), e omitindo a dependência temporal para alívio da notação, temos

$$\begin{aligned}\mathcal{H}\mathcal{U}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\mathcal{U}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle\right) \\ \mathcal{H}\mathcal{U}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle &= i\hbar\frac{\partial\mathcal{U}^{(0)}}{\partial t}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle + i\hbar\mathcal{U}^{(0)}\frac{\partial\mathcal{U}^{(0)\dagger}}{\partial t}|\psi(t)\rangle.\end{aligned}\quad (\text{B.24})$$

Da Eq. (3.11), $\frac{\partial\mathcal{U}^{(0)}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)} = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{U}^{(0)}\mathcal{H}^{(0)}$, e portanto

$$\begin{aligned}\mathcal{H}\mathcal{U}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle &= \mathcal{U}^{(0)}\mathcal{H}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle + i\hbar\mathcal{U}^{(0)}\frac{\partial\mathcal{U}^{(0)\dagger}}{\partial t}|\psi(t)\rangle \\ \mathcal{U}^{(0)\dagger}\mathcal{H}\mathcal{U}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle &= \mathcal{H}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle + i\hbar\frac{\partial\mathcal{U}^{(0)\dagger}}{\partial t}|\psi(t)\rangle \\ \mathcal{U}^{(0)\dagger}(\mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)})\mathcal{U}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle &= \mathcal{H}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle + i\hbar\frac{\partial\mathcal{U}^{(0)\dagger}}{\partial t}|\psi(t)\rangle \\ \mathcal{U}^{(0)\dagger}\mathcal{H}^{(1)}\mathcal{U}^{(0)}\mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle &= i\hbar\frac{\partial\mathcal{U}^{(0)\dagger}}{\partial t}|\psi(t)\rangle.\end{aligned}\quad (\text{B.25})$$

Assim, definindo $\mathcal{H}_I \equiv \mathcal{U}^{(0)\dagger}\mathcal{H}^{(1)}\mathcal{U}^{(0)}$ e $|\psi(t)\rangle_I \equiv \mathcal{U}^{(0)\dagger}|\psi(t)\rangle$, obtemos, finalmente, a Eq. (3.15)

$$\mathcal{H}_I|\psi(t)\rangle_I = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_I. \quad (\text{B.26})$$

Ainda, levando em conta que o valor esperado para um certo operador A , resultado da interpretação probabilística dos resultados relacionados às medidas, deva ser independente da representação, analogamente ao que foi representado na Eq. (3.8), temos que

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_{\text{Interação}} &= \langle A \rangle_{\text{Schrödinger}} \\ \langle \psi(t) |_I \mathbf{A}_I(t) | \psi(t) \rangle_I &= \langle \psi(t) | \mathbf{A}(t_0) | \psi(t) \rangle \\ \langle \psi(t) |_I \mathbf{A}_I(t) | \psi(t) \rangle_I &= \langle \psi(t) |_I \mathcal{U}^{(0)\dagger} \mathbf{A}(t_0) \mathcal{U}^{(0)} | \psi(t) \rangle_I,\end{aligned}\quad (\text{B.27})$$

implicando que

$$\mathbf{A}_I(t) = \mathcal{U}^{(0)\dagger} \mathbf{A}(t_0) \mathcal{U}^{(0)}. \quad (\text{B.28})$$

Além do mais,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A \rangle_{\text{Interação}} &= \frac{d}{dt}\langle A \rangle_{\text{Schrödinger}} \\ \frac{d}{dt}(\langle \psi(t) |_I \mathbf{A}_I(t) | \psi(t) \rangle_I) &= \frac{d}{dt}(\langle \psi(t) | \mathbf{A}(t_0) | \psi(t) \rangle),\end{aligned}\quad (\text{B.29})$$

com

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}(\langle \psi(t) | \mathbf{A}_I(t) | \psi(t) \rangle_I) &= \underbrace{\frac{d}{dt}(\langle \psi(t) | \mathbf{A}_I(t) | \psi(t) \rangle_I)}_{\frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \mathcal{H}_I} + \langle \psi(t) | \frac{d\mathbf{A}_I(t)}{dt} | \psi(t) \rangle_I + \langle \psi(t) | \mathbf{A}_I(t) \underbrace{\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle_I}_{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_I | \psi(t) \rangle_I} \\
 &= \langle \psi(t) | \mathbf{A}_I(t) \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_I \mathbf{A}_I(t) + \frac{d\mathbf{A}_I(t)}{dt} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{A}_I(t) \mathcal{H}_I \right) | \psi(t) \rangle_I \\
 &= \langle \psi(t) | \mathbf{A}_I(t) \left(\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_I, \mathbf{A}_I(t)] + \frac{d\mathbf{A}_I(t)}{dt} \right) | \psi(t) \rangle_I
 \end{aligned} \tag{B.30}$$

e também

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}(\langle \psi(t) | \mathbf{A}(t) | \psi(t) \rangle) &= \underbrace{\frac{d}{dt}(\langle \psi(t) | \mathbf{A}(t) | \psi(t) \rangle)}_{\frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \mathcal{H}} + \langle \psi(t) | \underbrace{\frac{d\mathbf{A}(t)}{dt}}_{=0} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \mathbf{A}(t) \underbrace{\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle}_{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} | \psi(t) \rangle} \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \mathcal{U}^{(0)\dagger} (\mathcal{H} \mathbf{A}(t) - \mathbf{A}(t) \mathcal{H}) \mathcal{U}^{(0)} | \psi(t) \rangle_I \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \mathcal{U}^{(0)\dagger} (\mathcal{H} \mathbf{A}(t) \mathcal{U}^{(0)} - \mathcal{U}^{(0)\dagger} \mathbf{A}(t) \mathcal{H} \mathcal{U}^{(0)}) | \psi(t) \rangle_I \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \mathcal{U}^{(0)\dagger} \mathcal{H} \mathcal{U}^{(0)} \underbrace{\mathcal{U}^{(0)\dagger} \mathbf{A}(t) \mathcal{U}^{(0)}}_{\mathbf{A}_I(t)} - \underbrace{\mathcal{U}^{(0)\dagger} \mathbf{A}(t) \mathcal{U}^{(0)}}_{\mathbf{A}_I(t)} \mathcal{U}^{(0)\dagger} \mathcal{H} \mathcal{U}^{(0)} | \psi(t) \rangle_I \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \mathcal{U}^{(0)\dagger} \mathcal{H} \mathcal{U}^{(0)} \mathbf{A}_I(t) - \mathbf{A}_I(t) \mathcal{U}^{(0)\dagger} \mathcal{H} \mathcal{U}^{(0)} | \psi(t) \rangle_I \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \mathcal{U}^{(0)\dagger} (\mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)}) \mathcal{U}^{(0)}, \mathbf{A}_I(t) \rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}_I, \mathbf{A}_I(t) \rangle.
 \end{aligned} \tag{B.31}$$

Por fim, substituindo (B.30) e (B.31) na Eq. (B.29), temos

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(t) | \mathbf{A}_I(t) \left(\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_I, \mathbf{A}_I(t)] + \frac{d\mathbf{A}_I(t)}{dt} \right) | \psi(t) \rangle_I &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}_I, \mathbf{A}_I(t) \rangle \\
 \Rightarrow \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_I, \mathbf{A}_I(t)] + \frac{d\mathbf{A}_I(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}_I, \mathbf{A}_I(t)] \\
 \frac{d\mathbf{A}_I(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}_I, \mathbf{A}_I(t)] - \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_I, \mathbf{A}_I(t)] \\
 i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{A}_I(t) &= [\mathbf{A}_I(t), \mathcal{H}^{(0)}],
 \end{aligned} \tag{B.32}$$

obtendo-se, finalmente, a Eq. (3.16).

B.4 Expansão em série perturbativa da equação de movimento na Seção 3.2

Considerando a representação do operador $\mathcal{U}(t, t_0)$ a partir de uma expansão da Eq. (3.19) em série de Dyson, conforme mostrado no Apêndice A.2, podemos, então, utilizar a seguinte expressão

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{T} e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}_I(t')} = \mathcal{T} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \left[\int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}_I(t') \right]^n = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{U}_n(t, t_0), \quad (\text{B.33})$$

em que definimos

$$\mathcal{U}_n(t, t_0) \equiv \mathcal{T} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \left[\int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}_I(t') \right]^n, \quad (\text{B.34})$$

com $\mathcal{U}_0(t, t_0) \equiv I$ e \mathcal{T} sendo o operador de ordenamento temporal. Isso implica que

$$\overline{\mathcal{U}(t, t_0)} = \overline{\sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{U}_n(t, t_0)} = \sum_{n=0}^{\infty} \overline{\mathcal{U}_n(t, t_0)}. \quad (\text{B.35})$$

Assim, uma forma de obtenção do operador $\mathcal{H}_{\text{eff}}(t)$ é impondo-se que este possa ser representado em termos de uma expansão numa certa base de operadores $\{\mathbf{h}_n(t)\}$ da forma

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{h}_n(t), \quad (\text{B.36})$$

e, então, utilizando-se também das Eqs. (B.33) e (B.35), realiza-se uma expansão perturbativa da Eq. (3.23). Introduzindo um parâmetro λ para monitoramento das potências, a ser igualado à unidade, e aplicando as trocas $\mathcal{U}_n(t, t_0) \rightarrow \lambda^n \mathcal{U}_n(t, t_0)$ e $\mathbf{h}_n(t) \rightarrow \lambda^n \mathbf{h}_n(t)$, esta fica

$$\begin{aligned} \left[\sum_{l=0}^{\infty} \lambda^l \mathbf{h}_l(t) \right] \cdot \left[\sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \overline{\mathcal{U}_m(t, t_0)} \right] &= \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \mathcal{U}_n(t, t_0)} \\ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^{l+m} \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_m(t, t_0)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_n(t, t_0)}. \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

Por meio da troca $m \rightarrow (n-l)$ no lado esquerdo da igualdade acima, com $\{m \in \mathbb{Z} \mid m \in [0, \infty)\} \Rightarrow \{n \in \mathbb{Z} \mid n \in [l, \infty)\}$, obtemos que

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n=l}^{\infty} \lambda^n \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{n-l}(t, t_0)} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_n(t, t_0)}. \quad (\text{B.38})$$

Aqui, o ordenamento das somas no lado esquerdo da Eq. (B.38) pode ser invertido se notarmos que $n \geq l \forall l \geq 0$ implica que $0 \leq l \leq n, \forall n \geq 0$, e portanto

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n \lambda^n \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{n-l}(t, t_0)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_n(t, t_0)} \\ \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \left[\sum_{l=0}^n \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{n-l}(t, t_0)} - \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_n(t, t_0)} \right] &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{l=0}^n \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{n-l}(t, t_0)} &= \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_n(t, t_0)}. \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Assim,

$$\begin{aligned}
 n = 0 &\implies \sum_{l=0}^0 \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{0-l}(t, t_0)} = \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_0(t, t_0)} \\
 &\mathbf{h}_0(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_0(t, t_0)} = \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_0(t, t_0)} \\
 &\mathbf{h}_0(t) = \overline{\mathcal{H}_I(t)},
 \end{aligned} \tag{B.40}$$

e ainda,

$$\begin{aligned}
 n > 0 &\implies \sum_{l=0}^n \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{n-l}(t, t_0)} = \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_0(t, t_0)} \\
 &\mathbf{h}_n(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_0(t, t_0)} + \sum_{l=0}^{n-1} \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{n-l}(t, t_0)} = \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_n(t, t_0)} \\
 &\mathbf{h}_n(t) \cdot \mathbf{I} = \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_n(t, t_0)} - \sum_{l=0}^{n-1} \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{n-l}(t, t_0)},
 \end{aligned} \tag{B.41}$$

de modo que obtemos a relação de recursão para os operadores $\mathbf{h}_n(t)$

$$\mathbf{h}_n(t) = \begin{cases} \overline{\mathcal{H}_I(t)}, & \text{para } n = 0, \\ \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_n(t, t_0)} - \sum_{l=0}^{n-1} \mathbf{h}_l(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{n-l}(t, t_0)}, & \text{para } n > 0. \end{cases} \tag{B.42}$$

Por fim, uma expansão até primeira ordem em λ , na Eq. (B.36), resulta em

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\text{eff}}(t) &= \lambda^0 \mathbf{h}_0(t) + \lambda^1 \mathbf{h}_1(t) \\
 &= \lambda^0 \overline{\mathcal{H}_I(t)} + \lambda^1 \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_1(t, t_0)} - \sum_{l=0}^0 \mathbf{h}_0(t) \cdot \overline{\mathcal{U}_{1-l}(t, t_0)} \\
 &= \lambda^0 \overline{\mathcal{H}_I(t)} + \lambda^1 \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_1(t, t_0)} - \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_1(t, t_0)},
 \end{aligned} \tag{B.43}$$

em que, tomando-se $\lambda = 1$, obtemos

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(t) = \lambda^0 \overline{\mathcal{H}_I(t)} + \lambda^1 \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_1(t, t_0)} - \overline{\mathcal{H}_I(t) \cdot \mathcal{U}_1(t, t_0)}, \tag{B.44}$$

conforme enunciado na Eq. (3.24).

B.5 Cálculo dos termos do hamiltoniano efetivo para o problema da Seção 3.3

Com a finalidade de se obter o hamiltoniano efetivo da Eq. (3.49) para o hamiltoniano $H_I(t)$ da Eq. (3.30), calcularemos termo a termo, partindo da Eq. (3.29) e usando da definição de convolução de um operador dada pela Eq. (3.17). De início

$$\begin{aligned}
 \overline{\mathcal{H}_I(t)} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') \left[\sum_{i \geq 1} \left(e^{i\omega_i t'} \mathbf{A}_i + e^{-i\omega_i t'} \mathbf{A}_i^\dagger \right) + \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger \right] \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') \sum_{i \geq 1} \left(e^{i\omega_i t'} \mathbf{A}_i + e^{-i\omega_i t'} \mathbf{A}_i^\dagger \right) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') \left(\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger \right) \\
 &= \sum_{i \geq 1} \left(\mathbf{A}_i \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') e^{i\omega_i t'} + \mathbf{A}_i^\dagger \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') e^{-i\omega_i t'} \right) + \left(\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger \right) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t')}_{=1} \\
 &= \sum_{i \geq 1} \left(\mathcal{I}_i(t) \mathbf{A}_i + \mathcal{I}_i^*(t) \mathbf{A}_i^\dagger \right) + \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger \\
 &= \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger,
 \end{aligned} \tag{B.45}$$

em que na última passagem utilizou-se o resultado obtido na Eq. (3.38).

Agora, segundo a Eq. B.34 teremos que

$$\begin{aligned}
 \mathcal{U}_1(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_I(t') dt' \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[\sum_{i \geq 1} \left(e^{i\omega_i t'} \mathbf{A}_i + e^{-i\omega_i t'} \mathbf{A}_i^\dagger \right) + \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger \right] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{i \geq 1} \int_0^t dt' \left(e^{i\omega_i t'} \mathbf{A}_i + e^{-i\omega_i t'} \mathbf{A}_i^\dagger \right) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left(\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger \right) \\
 &= \sum_{i \geq 1} -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{e^{i\omega_i t'}}{i\omega_i} \Big|_0^t \mathbf{A}_i - \frac{e^{-i\omega_i t'}}{i\omega_i} \Big|_0^t \mathbf{A}_i^\dagger \right) - \frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger \right) t \Big|_0^t \\
 &= \sum_{i \geq 1} \left(\frac{1 - e^{i\omega_i t}}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i - \frac{1 - e^{-i\omega_i t}}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i^\dagger \right) - \frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger \right) t,
 \end{aligned} \tag{B.46}$$

e, conseqüentemente

$$\begin{aligned}
 \overline{\mathcal{U}}_1(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') \left[\sum_{i \geq 1} \left(\frac{1 - e^{i\omega_i t'}}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i - \frac{1 - e^{-i\omega_i t'}}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i^\dagger \right) - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) t' \right] \\
 &= \sum_{i \geq 1} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') \left(\frac{1 - e^{i\omega_i t'}}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i - \frac{1 - e^{-i\omega_i t'}}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i^\dagger \right) - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) t' \\
 &= \sum_{i \geq 1} \left[\frac{1 - \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') e^{i\omega_i t'}}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i - \frac{1 - \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') e^{-i\omega_i t'}}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i^\dagger \right] - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') t' \\
 &= \sum_{i \geq 1} \left(\frac{1 - \mathcal{I}_i(t)}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i - \frac{1 - \mathcal{I}_i^*(t)}{\hbar\omega_i} \mathbf{A}_i^\dagger \right) - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) \bar{t} \\
 &= \sum_{i \geq 1} \frac{1}{\hbar\omega_i} (\mathbf{A}_i - \mathbf{A}_i^\dagger) - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) \bar{t}, \tag{B.47}
 \end{aligned}$$

novamente, aplicando o resultado de (3.38) na última passagem. Assim, a partir de (B.45) e (B.47)

$$\begin{aligned}
 [\overline{\mathcal{H}}_I(t), \overline{\mathcal{U}}_1(t)] &= \left[\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \sum_{i \geq 1} \frac{1}{\hbar\omega_i} (\mathbf{A}_i - \mathbf{A}_i^\dagger) - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) \bar{t} \right] \\
 &= \left[\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \sum_{i \geq 1} \frac{1}{\hbar\omega_i} (\mathbf{A}_i - \mathbf{A}_i^\dagger) \right] - \frac{i}{\hbar} \underbrace{\left[\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \frac{i}{\hbar} \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger \bar{t} \right]}_{=0} \\
 &= \sum_{i \geq 1} \frac{1}{\hbar\omega_i} [\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \mathbf{A}_i - \mathbf{A}_i^\dagger]. \tag{B.48}
 \end{aligned}$$

Ainda das Eqs. (3.30) e (B.46), teremos

$$\begin{aligned}
 [\mathcal{H}_I(t), \mathcal{U}_1(t)] &= \left[\sum_{i \geq 1} \left(e^{i\omega_i t} \mathbf{A}_i + e^{-i\omega_i t} \mathbf{A}_i^\dagger \right) + \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \sum_{j \geq 1} \left(\frac{1 - e^{i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} \mathbf{A}_j - \frac{1 - e^{-i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} \mathbf{A}_j^\dagger \right) - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) t \right] \\
 &= \left[\sum_{i \geq 1} \left(e^{i\omega_i t} \mathbf{A}_i + e^{-i\omega_i t} \mathbf{A}_i^\dagger \right), \sum_{j \geq 1} \left(\frac{1 - e^{i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} \mathbf{A}_j - \frac{1 - e^{-i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} \mathbf{A}_j^\dagger \right) \right] \\
 &\quad + \left[\sum_{i \geq 1} \left(e^{i\omega_i t} \mathbf{A}_i + e^{-i\omega_i t} \mathbf{A}_i^\dagger \right), -\frac{i}{\hbar} (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger) t \right] + \left[\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \sum_{j \geq 1} \left(\frac{1 - e^{i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} \mathbf{A}_j - \frac{1 - e^{-i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} \mathbf{A}_j^\dagger \right) \right] \\
 &= \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} \left(\frac{e^{i\omega_i t} - e^{i(\omega_i + \omega_j) t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j] - \frac{e^{i\omega_i t} - e^{i(\omega_i - \omega_j) t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger] + \frac{e^{-i\omega_i t} - e^{-i(\omega_i - \omega_j) t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i^\dagger, \mathbf{A}_j] \right. \\
 &\quad \left. - \frac{e^{-i\omega_i t} - e^{-i(\omega_i + \omega_j) t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i^\dagger, \mathbf{A}_j^\dagger] \right) - \frac{i}{\hbar} \sum_{i \geq 1} \left(e^{i\omega_i t} t [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] + e^{-i\omega_i t} t [\mathbf{A}_i^\dagger, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] \right) \\
 &\quad - \sum_{j \geq 1} \left(\frac{1 - e^{i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_j, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] - \frac{1 - e^{-i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_j^\dagger, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] \right), \tag{B.49}
 \end{aligned}$$

fazendo com que, conseqüentemente,

$$\begin{aligned}
 \overline{[\mathcal{H}_I(t), \mathcal{U}_1(t)]} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') [\mathcal{H}_I(t'), \mathcal{U}_1(t')] \\
 &= \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} \left(\frac{e^{i\omega_i t} - e^{i(\omega_i + \omega_j)t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j] - \frac{e^{i\omega_i t} - e^{i(\omega_i - \omega_j)t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger] + \frac{e^{-i\omega_i t} - e^{-i(\omega_i - \omega_j)t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i^\dagger, \mathbf{A}_j] \right. \\
 &\quad \left. - \frac{e^{-i\omega_i t} - e^{-i(\omega_i + \omega_j)t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i^\dagger, \mathbf{A}_j^\dagger] \right) - \frac{i}{\hbar} \sum_{i \geq 1} \left(e^{i\omega_i t} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] + e^{-i\omega_i t} [\mathbf{A}_i^\dagger, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] \right) \\
 &\quad - \sum_{j \geq 1} \left(\frac{1 - e^{i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_j, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] - \frac{1 - e^{-i\omega_j t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_j^\dagger, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] \right). \tag{B.50}
 \end{aligned}$$

Aqui, os argumentos aplicados no cálculo da integral (3.32) para a obtenção de (3.38) também se aplicam aos termos $e^{i\omega_i t}$, $e^{i\omega_i t} t$ e $e^{i(\omega_i + \omega_j)t}$. Portanto,

$$\begin{aligned}
 \overline{e^{i\omega_i t}} &= 0, \\
 \overline{e^{i\omega_i t} t} &= 0, \\
 \overline{e^{i(\omega_i + \omega_j)t}} &= 0,
 \end{aligned}$$

fazendo com que a Eq. (B.49) fique

$$\begin{aligned}
 \overline{[\mathcal{H}_I(t), \mathcal{U}_1(t)]} &= \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} \left(\frac{e^{i(\omega_i - \omega_j)t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger] - \frac{e^{-i(\omega_i - \omega_j)t}}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i^\dagger, \mathbf{A}_j] \right) \\
 &\quad + \sum_{j \geq 1} \left(-\frac{1}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_j, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] + \frac{1}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_j^\dagger, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] \right) \\
 &= \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} \left(\frac{\mathcal{K}_{ij}(t)}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger] - \frac{\mathcal{K}_{ij}^*(t)}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i^\dagger, \mathbf{A}_j] \right) + \sum_{j \geq 1} \frac{1}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger, \mathbf{A}_j - \mathbf{A}_j^\dagger], \tag{B.51}
 \end{aligned}$$

com a definição

$$\mathcal{K}_{ij}(t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dt' f(t-t') e^{i(\omega_i - \omega_j)t'}. \tag{B.52}$$

Fazendo-se a troca $i \leftrightarrow j$ dos índices mudos do segundo termo da primeira soma na Eq. (B.51), e levando-se em conta que $\mathcal{K}_{ji}^*(t) = \mathcal{K}_{ij}(t)$, temos que

$$\begin{aligned}
 \overline{[\mathcal{H}_I(t), \mathcal{U}_1(t)]} &= \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} \left(\frac{\mathcal{K}_{ij}(t)}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger] - \frac{\mathcal{K}_{ji}^*(t)}{\hbar\omega_i} [\mathbf{A}_j^\dagger, \mathbf{A}_i] \right) + \sum_{j \geq 1} \frac{1}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_j - \mathbf{A}_j^\dagger, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] \\
 &= \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} \left(\frac{\mathcal{K}_{ij}(t)}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger] + \frac{\mathcal{K}_{ij}(t)}{\hbar\omega_i} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger] \right) + \sum_{j \geq 1} \frac{1}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_j - \mathbf{A}_j^\dagger, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger] \\
 &= \sum_{i \geq 1} \sum_{j \geq 1} \frac{\mathcal{K}_{ij}(t)}{\hbar\omega_{ij}} [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j^\dagger] + \sum_{j \geq 1} \frac{1}{\hbar\omega_j} [\mathbf{A}_j - \mathbf{A}_j^\dagger, \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_0^\dagger], \tag{B.53}
 \end{aligned}$$

com

$$\frac{1}{\omega_{ij}} \equiv \left(\frac{1}{\omega_i} + \frac{1}{\omega_j} \right). \tag{B.54}$$

B.6 Obtenção da condição de dinâmicas efetivas para o problema da Seção 3.4

A condição (3.50) para a aplicação de dinâmicas efetivas pode ser traduzida para o sistema representado pelo hamiltoniano em (3.51) levando-se em conta que o hamiltoniano (3.55) na representação de interação,

$$\mathcal{H}_I(t) = \hbar g e^{i\Omega t} |1\rangle\langle 0| + \hbar g e^{-i\Omega t} |0\rangle\langle 1|, \quad (\text{B.55})$$

é da forma (3.30), com

$$\omega_i = \begin{cases} \Omega, & \text{para } i = 1, \\ 0, & \text{para } i \neq 1, \end{cases} \quad (\text{B.56})$$

e,

$$A_i = \begin{cases} \hbar g e^{i\Omega t} |1\rangle\langle 0|, & \text{para } i = 1, \\ 0, & \text{para } i \neq 1. \end{cases} \quad (\text{B.57})$$

Logo, temos que o numerador em (3.50) fica

$$\min_{\forall i \geq 1} \omega_i = \Omega. \quad (\text{B.58})$$

Ainda, o denominador em (3.50) pode ser determinado diretamente levando-se em consideração o termo de interação

$$\mathcal{H}^{(1)}(t) = \hbar g e^{i\omega t} |0\rangle\langle 1| + \hbar g e^{-i\omega t} |1\rangle\langle 0|, \quad (\text{B.59})$$

em (4.16), e seu desvio quadrático médio, $\langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle$, com relação à base de autoestados de \mathcal{H}_0 , $\{|n\rangle\} := \{|0\rangle, |1\rangle\}$. Assim,

$$\begin{aligned} \max_{\forall n=0,1} \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle &= \max_{\forall n=0,1} \sqrt{\langle n | \mathcal{H}^{(1)}(t)^2 | n \rangle - \langle n | \mathcal{H}^{(1)}(t) | n \rangle^2} \\ &= \max_{\forall n=0,1} \sqrt{\langle n | \hbar^2 g^2 (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) | n \rangle - \langle n | \hbar g (e^{i\omega t} |0\rangle\langle 1| + e^{-i\omega t} |1\rangle\langle 0|) | n \rangle^2} \\ &= \max_{\forall n=0,1} \sqrt{\hbar^2 g^2 (\delta_{n,0}^2 + \delta_{n,1}^2)} \\ &= \hbar g, \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

de modo que a condição (3.50) fica

$$\frac{\hbar}{2} \frac{\min_{\forall i \geq 1} \omega_i}{\max_{\forall n=0,1} \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}}^{(n)} \rangle} \gg 1 \quad \implies \quad \frac{\Omega}{2g} \gg 1. \quad (\text{B.61})$$

B.7 Obtenção da condição de dinâmicas efetivas para o problema da Seção 4.2

A condição (3.50) para a aplicação de dinâmicas efetivas pode ser traduzida para o sistema de qubits supercondutores, representado pelo hamiltoniano em (4.16), levando-se em conta que para os processos considerados – Eqs. (4.22)-(4.24) para o regime de interação direta, e Eqs. (4.35)-(4.37) para o regime de interação não direta – o valor mínimo de diferença de frequência é

$$\min_{\forall i,j=1,2,c} \omega_{ij} = \Omega. \quad (\text{B.62})$$

Ainda, $\max_{\forall |n\rangle \in \{|n\rangle\}} \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}} \rangle$, em que $|n\rangle \equiv |n_1, n_c, n_2\rangle$, com $n_1, n_c, n_2 = 0, 1$, são os autoestados de energia de $\mathcal{H}^{(0)}$ em (4.16), pode ser determinado diretamente levando-se em consideração o termo de interação

$$\mathcal{H}^{(1)} = \hbar g_c (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^+) + \hbar g_c (\sigma_{(2)}^+ \sigma_{(c)}^- + \sigma_{(2)}^- \sigma_{(c)}^+) + \hbar g_{12} (\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(2)}^+), \quad (\text{B.63})$$

em (4.16). Assim,

$$\max_{\forall |n\rangle \in \{|n\rangle\}} \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}} \rangle = \max_{\forall |n\rangle \in \{|n\rangle\}} \sqrt{\langle n_1, n_c, n_2 | \mathcal{H}^{(1)2} | n_1, n_c, n_2 \rangle - \langle n_1, n_c, n_2 | \mathcal{H}^{(1)} | n_1, n_c, n_2 \rangle^2}, \quad (\text{B.64})$$

e, calculando-se termo a termo,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(1)2} = & \hbar^2 g_c^2 (\sigma_{(1)}^{11} \sigma_{(c)}^{00} + \sigma_{(1)}^{00} \sigma_{(c)}^{11} + \sigma_{(2)}^{11} \sigma_{(c)}^{00} + \sigma_{(2)}^{00} \sigma_{(c)}^{11} + 2\sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^{00} \sigma_{(2)}^- + 2\sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^{11} \sigma_{(2)}^+) \\ & + \hbar^2 g_c g_{12} (\sigma_{(1)}^{11} \sigma_{(c)}^- \sigma_{(2)}^+ + \sigma_{(1)}^{00} \sigma_{(c)}^+ \sigma_{(2)}^- + \sigma_{(1)}^+ \sigma_{(c)}^- \sigma_{(2)}^{11} + \sigma_{(1)}^- \sigma_{(c)}^+ \sigma_{(2)}^{00}) \\ & + \hbar^2 g_{12}^2 (\sigma_{(1)}^{11} \sigma_{(2)}^{00} + \sigma_{(1)}^{00} \sigma_{(2)}^{11}), \end{aligned} \quad (\text{B.65})$$

de modo que

$$\begin{aligned} \langle n_1, n_c, n_2 | \mathcal{H}^{(1)2} | n_1, n_c, n_2 \rangle = & \hbar^2 g_c^2 (\delta_{1,n_1} \delta_{0,n_c} + \delta_{0,n_1} \delta_{1,n_c} + \delta_{1,n_2} \delta_{0,n_c} + \delta_{0,n_2} \delta_{1,n_c}) \\ & + \hbar^2 g_{12}^2 (\delta_{1,n_1} \delta_{0,n_2} + \delta_{0,n_1} \delta_{1,n_2}). \end{aligned} \quad (\text{B.66})$$

Como $g_c > g_{12}$, podemos assumir sem perda de generalidade que $\langle n_1, n_c, n_2 | \mathcal{H}^{(1)2} | n_1, n_c, n_2 \rangle$ é da ordem de $O(g_c^2)$, independentemente do número de excitações n no sistema. Temos ainda que

$$\langle n_1, n_c, n_2 | \mathcal{H}^{(1)} | n_1, n_c, n_2 \rangle = 0, \quad (\text{B.67})$$

implicando que

$$\max_{\forall |n\rangle \in \{|n\rangle\}} \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}} \rangle \sim \hbar g_c. \quad (\text{B.68})$$

Portanto, temos que

$$\frac{\hbar}{2} \frac{\min_{\forall i,j=1,2,c} \omega_{ij}}{\max_{\forall |n\rangle \in \{|n\rangle\}} \langle \sigma_{\mathcal{H}^{(1)}} \rangle} \gg 1 \quad \implies \quad \frac{\Omega}{g_c} \gg 1, \quad (\text{B.69})$$

traduzindo a condição para aproximação por dinâmica efetiva para o problema específico.