

Universidade Federal de São Carlos  
Departamento de Física

**Estudo comparativo entre duas teorias de  
perturbação dependentes do tempo em  
mecânica quântica**

Diogo Henrique Garcia Lima

Orientador: Prof. Dr. Gustavo Garcia Rigolin

*São Carlos, Fevereiro de 2016.*



Universidade Federal de São Carlos  
Departamento de Física

**Estudo comparativo entre duas teorias de  
perturbação dependentes do tempo em  
mecânica quântica**

Diogo Henrique Garcia Lima

*Dissertação realizada sob a orientação do Prof.  
Dr. Gustavo Garcia Rigolin, apresentada ao De-  
partamento de Física da Ufscar em preenchimento  
parcial dos requisitos para a obtenção do grau de  
Mestre em Física.*

*São Carlos, Fevereiro de 2016.*

Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da Biblioteca Comunitária UFSCar  
Processamento Técnico  
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

L732e Lima, Diogo Henrique Garcia  
Estudo comparativo entre duas teorias de  
perturbação dependentes do tempo em mecânica quântica /  
Diogo Henrique Garcia Lima. -- São Carlos : UFSCar,  
2016.  
101 p.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de  
São Carlos, 2016.

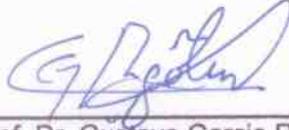
1. Teoria de Perturbação. 2. Teoria de perturbação  
adiabática. 3. Teoria de perturbação dependente do  
tempo. 4. Landau-Zener. 5. Mecânica quântica. I. Título.

---

Folha de Aprovação

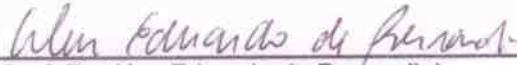
---

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Diogo Henrique Garcia Lima, realizada em 25/02/2016:



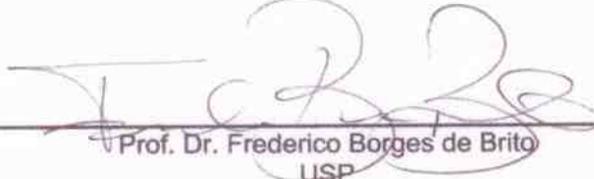
---

Prof. Dr. Gustavo Garcia Rigolin  
UFSCar



---

Prof. Dr. Alex Eduardo de Bernardini  
UFSCar



---

Prof. Dr. Frederico Borges de Brito  
USP

*Realistas não temem o resultado de seus estudos.*  
Fiódor Dostoiévski



# Agradecimentos

É difícil analisar todos os acontecimentos e caminhos que resultaram na obtenção desta dissertação. Entretanto, existem pessoas que me auxiliaram a tornar possível essa realidade. Por isso agradeço à minha mãe, Maria Elenir Garcia Lima, por a todo instante me apoiar e sempre me incentivar a perseverar nesse caminho complicado. Agradeço também ao meu pai, Luiz Bandeira Lima, por sempre me incentivar a estudar que de tanto me incentivar fez com que eu escolhesse uma profissão que requer muito estudo.

Agradeço também aos meus irmãos Douglas Vinícius Garcia Lima e Danny Hellen Garcia Lima por me acompanharem nessa jornada e principalmente ao meu amor Hosana Ribeiro de Novaes pela paciência e carinho no decorrer desse tempo, onde muitas vezes minha atenção estava só voltada aos estudos, agradeço por sempre estar do meu lado nos melhores e piores momentos. Por ter acompanhado cada passo meu nessa jornada ela possa se inspirar e abraçar ainda mais a beleza do conhecimento.

Agradeço ao Prof. Dr. Gustavo Garcia Rigolin por me aceitar como seu orientando, pela sua experiência e por sua paciência dado que diversas vezes mostrou os meus erros ajudando a compreendê-los e solucioná-los para melhor desenvolvimento desta dissertação.

Aos meus amigos da física, Antônio Barbosa de Lima Neto, Igor D’Anciães Almeida Silva, Kleydson Stênio, Rafael Vieira, e fora dela, Davi Arimatéia, Luis Felipe Marques Ferreira, Thiago Vasconcelos Ferrato, Rubens Garcia dos Santos, Thales Egydio e Gabriel, agradeço por tornarem o curso de física mais interessante ainda.

Por fim, agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro.

# Resumo

Esta dissertação apresenta dois métodos perturbativos para determinar a evolução temporal de sistemas quânticos cujas Hamiltonianas dependam explicitamente do tempo. Um destes métodos é a teoria de perturbação dependente do tempo usualmente encontrada nos livros textos de mecânica quântica. O outro método chama-se teoria de perturbação adiabática, cujas correções perturbativas são obtidas a partir da aproximação adiabática. A fim de comparar a eficiência desses métodos, vamos aplicá-los na solução de dois problemas dependentes do tempo. Um deles será o problema de Landau-Zener com dependência linear no tempo, onde apresentamos três possíveis soluções analíticas entre tantas outras desenvolvidas na literatura. O outro problema será uma Hamiltoniana que varia ciclicamente no tempo, cuja solução numérica será usada para comparar com as teorias perturbativas. Nossa comparação consistiu em analisar os gráficos da probabilidade de transição e da fidelidade, nos quais foram plotados as equações da teoria padrão juntamente com a teoria adiabática e as soluções numéricas/analíticas. Concluímos que a teoria de perturbação adiabática melhora significativamente a aproximação adiabática e é superior a teoria da perturbação temporal no caso da Hamiltoniana limitada e relativamente melhor também no modelo de Landau-Zener.



# Abstract

This monograph shows two perturbative methods to determine the time evolution of quantum systems described by time-dependent Hamiltonians. One method is the standard time-dependent perturbation theory usually found in text books of quantum mechanics. The other method is the adiabatic perturbation theory, whose perturbative corrections are obtained from the quantum adiabatic approximation. To compare the efficiency of those methods we apply them to two time-dependent problems. One is the Landau-Zener problem, whose time dependency is linear on time. We also show three analytical solutions to this problem. The other problem is a Hamiltonian which has a cyclic perturbation, whose numerical solution is employed to compare the efficacy of both perturbative methods. The comparison between the two perturbation theories is based on the graphics of transition probability and of the fidelity, where all quantities are computed using the perturbative methods and the exact solutions to the problems. We conclude that the adiabatic perturbation theory improves the adiabatic approximation, is better than the standard theory when we deal with the limited Hamiltonian, and is relatively better than the standard theory for the Landau-Zener model.



# Notação e Convenção

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Det  $[\mathbf{X}] \equiv$  Determinante da matriz  $\mathbf{X}$ .

Cof  $[\mathbf{X}]^T \equiv$  Matriz dos cofatores de  $\mathbf{X}$  transposta.

$x^* \equiv$  o conjugado de  $x$ .

As matrizes de Pauli na base de  $\sigma_z$  utilizadas nesta dissertação são

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

A integral elíptica de tipo um e dois respectivamente são

$$F(\phi|m) = \int_0^\phi \frac{1}{\sqrt{1 - m \sin^2(\theta)}} d\theta,$$

$$E(\phi|m) = \int_0^\phi \sqrt{1 - m \sin^2(\theta)} d\theta.$$

A função gama sendo

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt.$$

O índice  $LZ$  refere-se a grandezas relacionadas à Hamiltoniana de Landau-Zener.

Os índices  $HL$  e  $l$  referem-se a grandezas relacionadas à com a Hamiltoniana limitada.



# Sumário

Notação e Convenção	xi
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Fundamentos Teóricos</b>	<b>3</b>
2.1 Teoria de Perturbação Dependente do Tempo . . . . .	4
2.2 Teoria da Perturbação Adiabática . . . . .	6
2.2.1 Determinando a primeira ordem . . . . .	10
2.3 Metodologia . . . . .	12
2.3.1 Probabilidade de Transição . . . . .	12
2.3.2 Fidelidade . . . . .	13
<b>3 Hamiltoniana Limitada</b>	<b>15</b>
3.1 Solução HL teoria padrão . . . . .	16
3.1.1 Normalização . . . . .	17
3.1.2 Probabilidade de Transição . . . . .	19
3.1.3 Análise dos Resultados . . . . .	20
3.2 Solução HL teoria adiabática . . . . .	21
3.2.1 Normalização . . . . .	24
3.2.2 Probabilidade de Transição . . . . .	26
3.2.3 Análise dos Resultados . . . . .	27
<b>4 Comparações para Hamiltoniana limitada</b>	<b>29</b>
4.1 Análise dos resultados . . . . .	29
<b>5 Hamiltoniana de Landau-Zener</b>	<b>39</b>
5.1 Solução LZ analítica . . . . .	40

5.1.1	Solução LZ adiabática . . . . .	44
5.1.2	Análise dos Resultados . . . . .	47
5.2	Solução LZ teoria padrão . . . . .	48
5.2.1	Normalização . . . . .	50
5.2.2	Probabilidade de Transição . . . . .	51
5.2.3	Análise dos Resultados . . . . .	52
5.3	Solução LZ teoria adiabática . . . . .	53
5.3.1	Normalização . . . . .	56
5.3.2	Probabilidade de Transição . . . . .	57
5.3.3	Análise dos Resultados . . . . .	59
<b>6</b>	<b>Comparação para Hamiltoniana de Landau-Zener</b>	<b>61</b>
6.1	Análise dos resultados . . . . .	62
<b>7</b>	<b>Conclusão</b>	<b>77</b>
<b>A</b>	<b>Soluções do modelo de Landau-Zener</b>	<b>81</b>
A.1	Solução apresentada por Clarence Zener . . . . .	81
A.2	Solução Apresentada por Ho e Chibotaru . . . . .	86
<b>B</b>	<b>Funções Parabólicas Cilíndricas</b>	<b>89</b>
<b>C</b>	<b>Prova dos Cálculos</b>	<b>93</b>
C.1	Prova de $M_{nm}(s) = -M_{nm}^*(s)$ . . . . .	93
C.2	Prova do coeficiente $c_{\downarrow}(s)$ . . . . .	93
C.3	Prova das constantes $a$ e $b$ . . . . .	94
C.4	Prova das condições iniciais na base $\{ 0(s)\rangle,  1(s)\rangle\}$ . . . . .	96

# Lista de Figuras

4.1	Probabilidade de transição HL. Com $\alpha = 1$ , $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ e $\lambda = 0.01$ . . . . .	30
4.2	Probabilidade de transição HL. Com $\alpha = 10$ , $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ e $\lambda = 0.01$ . . . . .	31
4.3	Probabilidade de transição HL. Com $\alpha = 1$ , $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ e $\lambda = 0.1$ . . . . .	32
4.4	Probabilidade de transição HL. Com $\alpha = 1$ , $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.1$ e $\lambda = 0.01$ . . . . .	33
4.5	Probabilidade de transição HL. Com $\alpha = 1$ , $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.1$ e $\lambda = 0.1$ . . . . .	34
4.6	Fidelidade HL. Com $\alpha = 1$ , $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ e $\lambda = 0.01$ . . . . .	35
4.7	Fidelidade HL. Com $\alpha = 1$ , $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ e $\lambda = 0.1$ . . . . .	36
4.8	Fidelidade HL. Com $\alpha = 1$ , $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.1$ e $\lambda = 0.01$ . . . . .	37
4.9	Fidelidade HL. Com $\alpha = 1$ , $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.1$ e $\lambda = 0.1$ . . . . .	38
6.1	Probabilidade de transição LZ. Com $\epsilon = 0.01$ e $\beta = 0.01$ . . . . .	62
6.2	Probabilidade de transição LZ. Com $\epsilon = 0.01$ e $\beta = 0.1$ . . . . .	63
6.3	Probabilidade de transição LZ. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta = 0.01$ . . . . .	64
6.4	Probabilidade de transição LZ. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta = 0.1$ . . . . .	65
6.5	Fidelidade LZ. Com $\epsilon = 0.01$ e $\beta = 0.01$ . . . . .	66
6.6	Fidelidade LZ. Com $\epsilon = 0.01$ e $\beta = 0.1$ . . . . .	67
6.7	Fidelidade LZ. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta = 0.01$ . . . . .	68
6.8	Fidelidade LZ. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta = 0.1$ . . . . .	69
6.9	Transição de Landau-Zener. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta = 10$ . . . . .	70
6.10	Transição de Landau-Zener. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta = 30$ . . . . .	71
6.11	Fidelidade LZ. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta = 10$ . . . . .	72
6.12	Fidelidade LZ. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta = 30$ . . . . .	73
6.13	Probabilidade transição LZ no limite assintótico. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta \approx 3$ . . .	74
6.14	Probabilidade transição LZ no limite assintótico. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta \approx 3$ . . .	75
6.15	Probabilidade transição LZ no limite assintótico. Com $\epsilon = 0.1$ e $\beta \approx 3$ . . .	76



# Capítulo 1

## Introdução

A mecânica quântica é um dos pilares da física moderna, amplamente utilizada em escalas microscópicas onde a mecânica clássica deixa de fazer sentido e a equação de Schrödinger começa a reger a dinâmica do sistema. Contudo, os sistemas quânticos são extremamente complexos para que se possa obter uma solução analítica na maioria dos casos.

Essa dificuldade de se encontrar uma solução analítica deve-se em grande parte ao elevado número de variáveis necessárias para se descrever o sistema que gostaríamos de estudar e/ou ao fato de termos muitas vezes sistemas cujas Hamiltonianas dependam explicitamente do tempo. Dessa forma, muitos métodos perturbativos foram desenvolvidos e ainda o são na tentativa de se obter uma solução para estes problemas, como a aproximação adiabática [1], as séries de Dyson [2], a aproximação WKB [3], dentre outras que podem ser vistas nos livros listados nas referências [3] e [4].

Nesta dissertação nos concentraremos em sistemas descritos por poucas variáveis porém com Hamiltonianas dependentes do tempo, ou seja, sistemas onde a energia não se conserva. Para essa classe de sistemas físicos pelo menos dois métodos são utilizados para se obter uma solução aproximada do problema. O primeiro método é a teoria de perturbação dependente do tempo [5] dos livros textos, o qual foi desenvolvido para encontrar a evolução temporal de sistemas onde a parte da Hamiltoniana que depende do tempo contribua pouco para a energia total do sistema se comparada com a parte não dependente do tempo. O segundo método, conhecido como teoria de perturbação adiabática [2], não supõe que seja possível separar a Hamiltoniana em partes dependente e independente do tempo. Este método utiliza a aproximação adiabática como ponto de partida (ordem zero) no seu desenvolvimento e requer originalmente em seu desenvolvimento que as energias não sejam

degeneradas. Contudo, essa teoria foi posteriormente aperfeiçoada, passando a considerar também casos nos quais a energia seja degenerada [6]. A teoria da perturbação adiabática já foi aplicada em diversos problemas [7–9], e também pode ser encontrada no livro listado na referência [10].

Ambos os métodos apresentam características únicas em suas formulações e critérios distintos de quando podem ser utilizados para se resolver perturbativamente determinados problemas. Para podermos compará-los precisamos de um sistema que seja possível obter uma solução analítica ou pelo menos uma solução numérica. Por isso escolhemos dois casos que apresentam diferentes comportamentos temporais.

Os sistemas escolhidos possuem dois níveis de energia, sendo o primeiro sistema considerado, uma hamiltoniana cíclica no tempo, isto é, após um determinado tempo transcorrido ela retorna a sua configuração inicial.

O outro sistema é a Hamiltoniana de Landau-Zener, que possui dependência linear no tempo e é amplamente conhecida por apresentar um cruzamento de níveis evitado. Em outras palavras, por ser linear no tempo em  $t = 0$  ocorreria uma degenerescência, mas por ela possuir um termo extra o cruzamento não ocorre. Por ser uma Hamiltoniana amplamente estudada possui diversas soluções analíticas em limites assintóticos e algumas exatas que serão discutidas no capítulo 5.

Nesta dissertação, o capítulo 2 contém os fundamentos teóricos necessários para compararmos as teorias perturbativas, a descrição da teoria da perturbação dependente do tempo na seção 2.1 e a teoria da perturbação adiabática na seção 2.2. Nós comparamos as teorias por meio de gráficos de probabilidade de transição 2.3.1 e dos gráficos da fidelidade 2.3.2.

Os capítulos 3 e 5 são referentes as Hamiltonianas que nos propomos a resolver. Cada uma desses capítulos contém a possível solução analítica, a solução a partir da teoria dependente do tempo, a solução utilizando a teoria da perturbação adiabática. Por fim, nos capítulos 4 e 6 apresentamos os gráficos comparativos das teorias. O capítulo 3 apresenta a Hamiltoniana cíclica que chamamos de limitada e o capítulo 5 o modelo de Landau-Zener.

O capítulo 7 contém as conclusões finais referentes as comparações realizadas entre as teorias perturbativas e os apêndices contendo cálculos importantes e/ou necessários para o entendimento desta dissertação.

# Capítulo 2

## Fundamentos Teóricos

Como vimos na introdução, a maioria das Hamiltonianas explicitamente dependentes do tempo só nos permitem obter uma solução aproximada do problema. Neste capítulo apresentamos as duas teorias perturbativas que aplicamos para encontrar essas soluções e também os conceitos físicos que usamos para averiguar qual teoria perturbativa mais se aproxima da solução exata.

A primeira teoria que mostraremos será a teoria da perturbação dependente do tempo também conhecida como teoria padrão de perturbação, encontradas nos bons livros textos de mecânica quântica. Nós usamos a teoria que foi apresentada no segundo volume do livro de mecânica quântica de Cohen-Tannoudji *et al.* [5]. A teoria padrão usa como ponto de partida a solução da Hamiltoniana que não depende do tempo e isso requer que a Hamiltoniana temporal utilizada seja possível de se separar em uma parte independente do tempo e em outra explicitamente dependente do tempo:  $\mathbf{H}(t) = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1(t)$ .

A outra teoria será a teoria da perturbação adiabática [2], uma teoria relativamente nova que foi desenvolvida em 2008. Essa teoria usa como ordem zero a aproximação adiabática [1], ou seja, ela apresenta correções da aproximação adiabática.

Por fim mostramos os conceitos de probabilidade de transição e fidelidade que nos permitirão comparar as teorias com a solução exata e, assim, responder qual teoria dá melhores resultados em um regime no qual as duas teorias sejam válidas.

## 2.1 Teoria de Perturbação Dependente do Tempo

Para apresentar a teoria da perturbação dependente do tempo [5] consideramos um sistema físico tal que sua Hamiltoniana  $\mathbf{H}_0$  seja independente do tempo com autovetores  $|\phi_n\rangle$  e autovalores  $\varepsilon_n$  não degenerados sendo  $\varepsilon_0$  o menor nível de energia.

Supondo que em  $t \geq 0$  esse sistema sofra uma pequena perturbação temporal  $\lambda\mathbf{V}(t)$ , com  $\mathbf{V}(t)$  Hermitiano de modo que o elemento  $\lambda V_{nm}(t) \ll \varepsilon_0$ , ou seja, que os elementos da matriz de perturbação sejam muito menores que o menor nível de energia. Assim, a Hamiltoniana para todo tempo fica

$$\mathbf{H}(t) = \begin{cases} \mathbf{H}_0 & t < 0, \\ \mathbf{H}_0 + \lambda\mathbf{V}(t), & t \geq 0. \end{cases} \quad (2.1)$$

Lembrando que a validade da teoria não abrange tempos muito grandes, isto é, devemos considerar o tempo final  $t_f < \frac{1}{\lambda}$ .

Vamos considerar que a equação de Schrödinger dependente do tempo rege a dinâmica do sistema,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \mathbf{H}(t) |\Psi(t)\rangle. \quad (2.2)$$

Para obtermos a solução consideramos a função de onda  $|\Psi(t)\rangle$  na base dos autovetores de  $\mathbf{H}_0$ , isto é, na base  $\{|\phi_n\rangle\}$  completa e ortonormal,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle. \quad (2.3)$$

Substituindo a equação (2.3) em (2.2) e definindo  $\frac{d}{dt}c_n(t) = \dot{c}_n(t)$  obtemos:

$$i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) |\phi_n\rangle = \sum_n c_n(t) \varepsilon_n |\phi_n\rangle + \lambda \sum_n c_n(t) \mathbf{V}(t) |\phi_n\rangle. \quad (2.4)$$

Tomando o produto interno de  $\langle\phi_k|$  com a equação (2.4), definindo  $\langle\phi_k| \mathbf{V}(t) |\phi_n\rangle = V_{kn}(t)$  e notando que  $\langle\phi_k | \phi_n\rangle = \delta_{kn}$ , onde  $\delta_{kn}$  é o delta de Kronecker, chegamos a

$$i\hbar \dot{c}_n(t) = \varepsilon_n c_n(t) + \lambda \sum_k c_k(t) V_{nk}(t), \quad (2.5)$$

onde renomeamos os índices mudos trocando os papéis entre  $n$  e  $k$ .

Note que a equação (2.5) é exata e ainda não foi realizada nenhuma aproximação. Ela consiste de um sistema de equações diferenciais lineares de primeira ordem acopladas caso

$\mathbf{V}(t)$  não seja diagonal. Caso contrário, se  $\mathbf{V}(t)$  for diagonal na base de  $\mathbf{H}_0$ , o problema é trivialmente resolvido pois a Hamiltoniana do sistema sofrerá somente um deslocamento dos níveis de energia.

Considerando inicialmente a perturbação nula,  $\mathbf{V}(t) = 0$  para todo  $t$ , a solução da equação (2.5) é

$$c_n(t) = b_n e^{-i\varepsilon_n \frac{t}{\hbar}}, \quad (2.6)$$

sendo  $b_n$  constantes que dependem das condições iniciais do sistema.

Para perturbação não nula e tal que  $\lambda \ll 1$ , podemos dizer que a equação (2.6) nos dá uma solução aproximada em ordem zero para a Hamiltoniana perturbada. Assim, para  $\lambda \ll 1$ , podemos considerar que a dependência temporal da perturbação nas ordens superiores será refletida nos coeficientes que multiplicam a exponencial, de tal modo que definimos  $b_n \rightarrow b_n(t)$ . Sendo assim podemos escrever  $c_n(t)$  como:

$$c_n(t) = b_n(t) e^{-i\varepsilon_n \frac{t}{\hbar}}. \quad (2.7)$$

Substituindo a equação (2.7) em (2.5) obtemos:

$$i\hbar \dot{b}_n(t) = \lambda \sum_k V_{nk}(t) b_k(t) e^{i\omega_{nk}t}, \quad (2.8)$$

onde  $\omega_{nk}$  é a frequência angular de Bohr,

$$\omega_{nk} = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_k}{\hbar}. \quad (2.9)$$

Para obter o conjunto de solução vamos expandir os  $b_n(t)$  em série de potência em termos de  $\lambda$ ,

$$b_n(t) = \lambda^0 b_n^{(0)}(t) + \lambda^1 b_n^{(1)}(t) + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p b_n^{(p)}(t). \quad (2.10)$$

Substituindo a equação (2.10) na (2.8) e reindexando o lado direito da equação de  $p+1 \rightarrow p$  encontramos:

$$i\hbar \dot{b}_n^{(0)}(t) + i\hbar \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p \dot{b}_n^{(p)}(t) = \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p \sum_k b_k^{(p-1)}(t) V_{nk}(t) e^{i\omega_{nk}t}. \quad (2.11)$$

Igualando termos em  $\lambda^p$  do lado esquerdo com termos  $\lambda^p$  do lado direito temos:

$$\begin{cases} i\hbar \dot{b}_n^{(0)}(t) = 0 & \Rightarrow & b_n^{(0)}(t) = b_n^{(0)}, \\ i\hbar \dot{b}_n^{(p)}(t) = \sum_k b_k^{(p-1)}(t) V_{nk}(t) e^{i\omega_{nk}t}. \end{cases} \quad (2.12)$$

No conjunto solução obtido em (2.12), verificamos uma fórmula de recorrência e um ponto de partida ( $b_n^{(0)}$ ) que depende das condições iniciais do sistema. Com isso, podemos encontrar os outros coeficientes  $b_n^{(p)}(t)$  até a ordem  $p$  de interesse simplesmente resolvendo uma equação diferencial de primeira ordem.

A função de onda de ordem  $p = j$ ,  $|\bar{\Psi}(t)\rangle_j$ , é encontrada substituindo os  $b_n^{(p)}(t)$  encontrados pela equação (2.12) em (2.10), posteriormente em (2.7) e finalmente em (2.3), obtendo assim:

$$|\bar{\Psi}(t)\rangle_j = \sum_n \left[ \lambda^0 b_n^{(0)}(t) + \lambda^1 b_n^{(1)}(t) + \dots + \lambda^j b_n^{(j)}(t) \right] e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t} |\phi_n\rangle. \quad (2.13)$$

A continuidade da função de onda nos diz que em  $t = 0$  a função antes da perturbação deve ser igual após a perturbação:

$$|\Psi_{t<0}(0)\rangle = |\bar{\Psi}(0)\rangle_j, \quad (2.14)$$

$$\sum_n b_n |\phi_n\rangle = \sum_n b_n^{(0)}(0) |\phi_n\rangle + \sum_n \sum_{p=1}^j \lambda^p b_n^{(p)}(0) |\phi_n\rangle. \quad (2.15)$$

Dessa forma, igualando termos de mesma ordem, verificamos as condições iniciais:

$$\begin{cases} b_n^{(0)}(s) = b_n^{(0)}(0) = b_n, \\ b_n^{(p)}(0) = 0, \quad 1 \leq p \leq j. \end{cases} \quad (2.16)$$

A equação de (2.12) nos induziu a concluir que  $b_n^{(0)}(t) = b_n$  e por isso afirmamos que a função de onda de ordem zero é igual a função de onda não perturbada.

## 2.2 Teoria da Perturbação Adiabática

Para compreendermos a teoria da perturbação adiabática [2] devemos primeiramente entender o que é a aproximação adiabática. Essa aproximação nos diz que um sistema que varia *lentamente* durante um tempo  $t = T$ , sendo que no tempo  $t = 0$  ele foi preparado em um autoestado de  $\mathbf{H}(t = 0)$ , irá evoluir de tal forma a *sempre* se encontrar no autoestado

instantâneo de  $\mathbf{H}(t)$  [1]. Em outras palavras, aproximação adiabática diz que não haverá transição de níveis de energia se o sistema for preparado em um autoestado da Hamiltoniana e esta variar lentamente. No entanto se a evolução não for suficientemente *lenta* devemos aplicar correções a essa aproximação e é exatamente nesse caso que a teoria da perturbação adiabática nos mostra quais correções devem ser empregadas.

A teoria da perturbação adiabática foi desenvolvida na base dos autoestados instantâneos de  $\mathbf{H}(t)$ , isto é, para cada  $t$  temos uma Hamiltoniana e também seus autoestados e se  $t$  muda a Hamiltoniana muda e obviamente seus autoestados acompanharão essas mudanças.

Inicialmente reescrevemos a equação de Schrödinger (2.2) em termos de uma nova escala de tempo,  $s = vt$ , onde  $v = 1/T$  e  $T$  é a duração do processo que leva a Hamiltoniana de sua configuração inicial  $\mathbf{H}(0)$  até sua configuração final  $\mathbf{H}(T)$ . Esse  $v$  será o fator perturbativo da teoria da perturbação adiabática. Então  $v \rightarrow 0$  quer dizer um tempo "infinito" para a Hamiltoniana mudar sua configuração e dessa forma a aproximação adiabática seria considerada uma boa solução do problema. Na nova escala de tempo temos a equação de Schrödinger torna-se

$$i\hbar v \frac{d}{ds} |\Psi(s)\rangle = \mathbf{H}(s) |\Psi(s)\rangle. \quad (2.17)$$

As correções perturbativas em  $v$  para a aproximação adiabática são obtidas definindo o *ansatz* [2]

$$|\Psi(s)\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} v^p |\Psi^{(p)}(s)\rangle, \quad (2.18)$$

onde  $|\Psi^{(p)}(s)\rangle$  é a função de onda de ordem  $p$  definida como

$$|\Psi^{(p)}(s)\rangle = \sum_{n=0} e^{-\frac{i}{v}\omega_n(s)} e^{i\gamma_n(s)} b_n^{(p)}(s) |n(s)\rangle, \quad (2.19)$$

e

$$b_n^{(p)}(s) = \sum_{m=0} e^{\frac{i}{v}\omega_{nm}(s)} e^{-i\gamma_{nm}(s)} b_{nm}^{(p)}(s). \quad (2.20)$$

Aqui, impomos que  $|\Psi^{(0)}(s)\rangle$  seja a aproximação adiabática,  $\gamma_n(s)$  e  $\omega_n(s)$  são as fases geométrica e dinâmica que serão definidas abaixo,  $\omega_{nm}(s) = \omega_n(s) - \omega_m(s)$  e  $\gamma_{nm}(s) = \gamma_n(s) - \gamma_m(s)$ .

Na aproximação adiabática, em particular para uma evolução cíclica de tempo  $t = T$

( $\mathbf{H}(0) = \mathbf{H}(T)$ ), temos que  $|\Psi^{(0)}(T)\rangle = e^{i\phi(T)}|\Psi^{(0)}(0)\rangle$ , onde os estados final e inicial diferem apenas por uma fase global. Em geral a fase adiabática ( $\phi(T)$ ) pode ser dividida em fase geométrica ( $\gamma(T)$ ) e fase dinâmica ( $\omega(T)$ ) [11]. Com isso em mente podemos incluir uma fase dinâmica e uma geométrica em cada coeficiente de  $|\Psi^{(0)}(s)\rangle$ . Assim,

$$|\Psi^{(0)}(s)\rangle = \sum_{n=0} e^{i\gamma_n(s)} e^{-\frac{i}{v}\omega_n(s)} b_n^{(0)}(s) |n(s)\rangle, \quad (2.21)$$

com  $b_n^{(0)}(s)$  coeficientes dependentes do tempo a serem determinados,  $n = 0$  o nível de menor energia e  $|n(s)\rangle$  autovetores instantâneos (*snapshots*) de  $\mathbf{H}(s)$ ,

$$\mathbf{H}(s)|n(s)\rangle = E_n(s) |n(s)\rangle. \quad (2.22)$$

As fases de Berry e dinâmica associadas aos autovetores  $|n(s)\rangle$  são

$$\gamma_n(s) = i \int_0^s M_{nn}(s') ds', \quad (2.23)$$

$$\omega_n(s) = \frac{1}{\hbar} \int_0^s E_n(s') ds' = v\omega_n(t), \quad (2.24)$$

com

$$M_{nm}(s) = \langle n(s)|\dot{m}(s)\rangle, \quad (2.25)$$

onde o ponto significa  $\frac{d}{ds}$ .

Assim, substituindo (2.21) em (2.17), utilizando (2.22), multiplicando pela esquerda por  $|m(s)\rangle$ , e reindexando  $n \leftrightarrow m$  temos:

$$\dot{b}_n^{(0)}(s) + \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}} e^{-\frac{i}{v}\omega_{mn}(s)} e^{i\gamma_{mn}(s)} M_{nm}(s) b_m^{(0)}(s) = 0. \quad (2.26)$$

A equação (2.26) é um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem acopladas e a aproximação adiabática consiste em negligenciar esses acoplamentos. Isso é possível considerando  $M_{nm}(s) \ll 1$ , isto é,  $\langle n(s)|\dot{m}(s)\rangle \ll 1$  para todo  $s$ , cuja validade é discutida em [12–17]. Esta escolha implica

$$b_n^{(0)}(s) = b_n^{(0)}(0) \longrightarrow \text{aproximação adiabática.} \quad (2.27)$$

Essa equação recobra o que foi dito no começo da seção: a aproximação adiabática (2.27) nos diz que se uma perturbação for suficientemente lenta, o sistema irá continuar

nos seus autoestados instantâneos e não haverá transição entre níveis.

Considerando agora todos os termos de  $p$ , a função de onda  $|\Psi(s)\rangle$  pode ser definida substituindo a equação (2.20) em (2.19) e depois em (2.18). Assim,

$$|\Psi(s)\rangle = \sum_{m,n=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} v^p e^{-\frac{i}{v}\omega_m(s)} e^{i\gamma_m(s)} b_{nm}^{(p)}(s) |n(s)\rangle. \quad (2.28)$$

A partir da continuidade da função de onda em  $t = 0$  temos  $|\Psi(0)\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} v^p |\Psi^{(p)}(0)\rangle$ . Logo, podemos afirmar que  $|\Psi^{(p \neq 0)}(0)\rangle = 0$  e  $|\Psi(0)\rangle = \sum_{n=0} b_n(0) |n(0)\rangle = |\Psi^{(0)}(0)\rangle$ . Sendo assim verificamos que

$$|\Psi^{(p)}(0)\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad b_m^{(p)}(0) = \sum_{m=0} b_{nm}^{(p)}(0) = 0, \quad p \neq 0. \quad (2.29)$$

Lembrando da imposição de que a ordem zero seja a aproximação adiabática definimos as condições iniciais acrescida da aproximação adiabática (2.27) como,

$$\begin{cases} b_n^{(0)}(s) = b_n^{(0)}(0) \\ b_n^{(0)}(0) = b_n(0) \quad \Rightarrow \quad b_{nm}^{(0)}(s) = b_{nm}^{(0)}(0) = b_n(0) \delta_{nm}, \\ \sum_{m=0} b_{nm}^{(p)}(0) = 0, \quad p \neq 0. \end{cases} \quad (2.30)$$

Substituindo (2.28) em (2.17), tomando o produto interno pela esquerda por  $\langle k(s)|$ , notando que

$$\sum_{p=0}^{\infty} v^p \frac{i}{v\hbar} b_{km}^{(p)}(s) = \frac{i}{v\hbar} b_{km}^{(0)}(s) + \sum_{p=0}^{\infty} v^p \frac{i}{\hbar} b_{km}^{(p+1)}(s), \quad (2.31)$$

e que também através da equação (2.23)  $\dot{\gamma}_m(s) = iM_{mm}(s)$  encontramos

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} v^p e^{-\frac{i}{v}\omega_m(s)} e^{i\gamma_m(s)} \\ & \times \left( \frac{i}{\hbar} \Delta_{nm}(s) b_{nm}^{(p+1)}(s) + \dot{b}_{nm}^{(p)}(s) - M_{mm}(s) b_{nm}^{(p)}(s) + \sum_{k=0} M_{nk}(s) b_{km}^{(p)}(s) \right) \\ & + \frac{i}{v\hbar} \sum_{m=0} e^{-\frac{i}{v}\omega_m(s)} e^{i\gamma_m(s)} \Delta_{nm}(s) b_{nm}^{(0)}(s) = 0, \quad (2.32) \end{aligned}$$

para obtermos a equação (2.32) como dada acima reindexamos  $n \leftrightarrow k$  e definimos  $E_n(s) - E_m(s) = \Delta_{nm}(s)$ .

Note que o termo proporcional a  $1/v$  não diverge quando  $v \rightarrow 0$  devido aos termos  $\Delta_{nm}(s)$  serem nulos para  $n = m$ . E mais, utilizando a aproximação adiabática (2.27), que diz que  $b_n^{(0)}(s) = b_n^{(0)}(0)$ , e as condições iniciais (2.30)  $b_{nm}^{(0)}(0) = b_n(0)\delta_{nm}$ , podemos afirmar que para  $n \neq m$ ,  $b_{nm}^{(0)}(s) = b_n^{(0)}(s)\delta_{nm} = 0$ . Assim, este termo também se anula quando  $n \neq m$ . Dessa forma, se o termo entre parênteses (segunda linha) da equação (2.32) for zero, conseguimos resolver a equação. Com isso obtemos a relação de recorrência abaixo,

$$\frac{i}{\hbar}\Delta_{nm}(s)b_{nm}^{(p+1)}(s) + \dot{b}_{nm}^{(p)}(s) + W_{nm}(s)b_{nm}^{(p)}(s) + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}} M_{nk}(s)b_{km}^{(p)}(s) = 0, \quad (2.33)$$

onde  $W_{nm}(s) = M_{nn}(s) - M_{mm}(s)$ . Este é o resultado mais importante da teoria da perturbação adiabática. Com esta equação podemos obter os termos de mais alta ordem perturbativa (ordem  $p + 1$ ) como função dos termos de mais baixa ordem (ordem  $p$ ). Isto é, a equação (2.33) é uma relação de recorrência que juntamente com as condições iniciais (2.30) nos dá um modo iterativo de se obter sucessivamente as correções de ordens superiores em  $v$ .

### 2.2.1 Determinando a primeira ordem

Para encontrarmos os coeficientes  $b_{nm}^{(1)}(s)$  devemos considerar duas situações: a primeira com  $n \neq m$  e a segunda  $n = m$ . Assim, para  $p = 0$  a equação (2.33) torna-se

$$\frac{i}{\hbar}\Delta_{nm}(s)b_{nm}^{(1)}(s) + \dot{b}_{nm}^{(0)}(s) + W_{nm}(s)b_{nm}^{(0)}(s) + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}} M_{nk}(s)b_{km}^{(0)}(s) = 0. \quad (2.34)$$

Usando as condições iniciais (2.30) percebemos que  $\dot{b}_{nm}^{(0)}(s) = 0$  e  $W_{nm}(s)b_{nm}^{(0)}(s) = W_{nm}(s)b_n(0)\delta_{nm} = 0$  pois  $W_{nn}(s) = M_{nn}(s) - M_{nn}(s) = 0$ . Para  $n \neq m$  o coeficiente é obtido trivialmente, já que a somatória é eliminada pelo  $\delta_{km}$  presente em  $b_{km}^{(0)}(s)$ ,

$$b_{nm}^{(1)}(s) = i\hbar \frac{M_{nm}(s)}{\Delta_{nm}(s)} b_m(0), \quad n \neq m. \quad (2.35)$$

No caso de  $n = m$  a equação (2.34) recai em uma identidade. Utilizando uma ordem acima,  $p = 1$ , a equação (2.33) resulta em

$$\dot{b}_{nn}^{(1)}(s) + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq n}} M_{nk}(s)b_{kn}^{(1)}(s) = 0. \quad (2.36)$$

Integrando (2.36) utilizando os coeficientes para  $n \neq m$  (2.35) juntamente com a relação  $M_{nm}(s) = -M_{mn}^*(s)$  provada no apêndice C.1 e mudando os índices de  $k \rightarrow m$  temos

$$b_{nn}^{(1)}(s) = i\hbar \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}} J_{mn}(s) b_n(0) + b_{nn}^{(1)}(0), \quad (2.37)$$

onde

$$J_{mn} = \int_0^s \frac{|M_{mn}(s')|^2}{\Delta_{mn}(s')} ds'. \quad (2.38)$$

O termo  $b_{nn}^{(1)}(0)$  pode ser encontrado substituindo a equação (2.35) na somatória da equação (2.29):

$$b_{nn}^{(1)}(0) = -i\hbar \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}} \frac{M_{nm}(0)}{\Delta_{nm}(0)} b_m(0). \quad (2.39)$$

Juntando (2.39) com (2.37) temos

$$b_{nn}^{(1)}(s) = i\hbar \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}} J_{mn}(s) b_n(0) - i\hbar \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq n}} \frac{M_{nm}(0)}{\Delta_{nm}(0)} b_m(0). \quad (2.40)$$

com  $J_{mn}(s)$  dado pela equação (2.38).

Agora que temos todos os coeficientes de primeira ordem, equações (2.35) e (2.40), podemos escrever a função de onda de primeira ordem (2.19) substituindo (2.20):

$$\begin{aligned} |\Psi^{(1)}(s)\rangle &= i\hbar \sum_{\substack{n,m=0 \\ m \neq n}} e^{-\frac{i}{v}\omega_n(s)} e^{i\gamma_n(s)} J_{mn}(s) b_n(0) |n(s)\rangle \\ &+ i\hbar \sum_{\substack{n,m=0 \\ m \neq n}} e^{-\frac{i}{v}\omega_m(s)} e^{i\gamma_m(s)} \frac{M_{nm}(s)}{\Delta_{nm}(s)} b_m(0) |n(s)\rangle \\ &- i\hbar \sum_{\substack{n,m=0 \\ m \neq n}} e^{-\frac{i}{v}\omega_n(s)} e^{i\gamma_n(s)} \frac{M_{nm}(0)}{\Delta_{nm}(0)} b_m(0) |n(s)\rangle. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Repetindo esse mesmo esquema usado para encontrar os coeficientes de primeira ordem podemos encontrar a todas as ordens e com isso podemos definir a função de onda

perturbativa considerando até a ordem  $p = j$  como:

$$|\tilde{\Psi}(s)\rangle_j = \sum_{p=0}^j v^p |\Psi^{(p)}(s)\rangle. \quad (2.42)$$

## 2.3 Metodologia

Neste capítulo apresentamos os conceitos dos dois métodos que utilizamos para comparar qual teoria mais se assemelha com a solução exata. O primeiro método a ser empregado foi a probabilidade de transição, a qual nos dá a chance de o sistema ser encontrado em um estado diferente do preparado. O método seguinte foi a fidelidade, que mede quão próximo dois estados quânticos estão.

### 2.3.1 Probabilidade de Transição

Devido a interpretação da mecânica quântica para a função de onda  $|\psi(t)\rangle$  solução de uma Hamiltoniana podemos calcular a probabilidade de transição, que nada mais é do que calcular qual a chance de um sistema que foi preparado em um determinado estado ser encontrado em outro após um certo tempo transcorrido. Para isso, devemos tomar o módulo ao quadrado do produto escalar entre  $|\psi(t)\rangle$  e o estado  $|k\rangle$  de interesse

$$\mathcal{P}_k(t) = |\langle k|\psi(t)\rangle|^2. \quad (2.43)$$

Para as soluções oriundas da teoria de perturbação dessa dissertação dadas pelas equações (2.13) e (2.42) a função de onda não está normalizada. Logo, para que possamos falar em probabilidades, a função de onda deverá ser normalizada de modo que a soma de todas as probabilidades seja 1, e para isso  $|\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle|^2 = 1$ .

Definindo  $|\Psi_{TP}(t)\rangle_j$  como a função normalizada de ordem  $p = j$  da teoria da perturbação dependente do tempo, isto é, da equação (2.13), temos:

$$|\Psi_{TP}(t)\rangle_j = N_j |\tilde{\Psi}(t)\rangle_j, \quad (2.44)$$

com  $N_j$  o fator de normalização igual a:

$$|N_j| = \frac{1}{\sqrt{j \langle \tilde{\Psi}(t)|\tilde{\Psi}(t)\rangle_j}}. \quad (2.45)$$

Note que  $N_j = N_j(t)$  e que  $N_j(0) = 1$ , como deve ser, já que em  $t = 0$  a função perturbada é idêntica a não perturbada, já normalizada.

Análogo a isso ocorrerá na teoria de perturbação adiabática, onde a função de onda normalizada de ordem  $j$ ,  $|\Psi_{APT}(t)\rangle_j$ , é obtida através da normalização da função (2.42):

$$|\Psi_{APT}(t)\rangle_j = \widetilde{N}_j |\widetilde{\Psi}(t)\rangle_j, \quad (2.46)$$

com  $\widetilde{N}_j$  o fator de normalização sendo:

$$|\widetilde{N}_j| = \frac{1}{\sqrt{j \langle \widetilde{\Psi}(t) | \widetilde{\Psi}(t) \rangle_j}}. \quad (2.47)$$

### 2.3.2 Fidelidade

A fidelidade é uma importante ferramenta proveniente da teoria da informação quântica. Ela é utilizada para comparar estados quânticos diferentes, mostrando o quanto esses estados são próximos. Sua expressão adaptada para os resultados obtidos nessa dissertação é

$$\mathcal{F} = |\langle \Psi_{Exata}(t) | \Psi_{Aproximada}(t) \rangle|^2. \quad (2.48)$$

Sendo  $|\Psi_{Aproximada}(t)\rangle$  as funções alcançadas pela teoria perturbativa dependente do tempo e pela teoria da perturbação adiabática. A fidelidade tem a propriedade de variar entre zero e um, de modo que quanto mais próximo de zero menos semelhantes são os estados quânticos e, no caso contrário, quanto mais próximo de um mais semelhantes são os estados. Portanto quando a fidelidade é unitária temos estados idênticos a menos de uma fase global, já que a fidelidade apresenta o módulo quadrado na sua composição.

Ela pode ser analisada como o produto interno entre dois vetores unitários. Se o produto interno é 0 os vetores são ortogonais, logo o mais diferentes possíveis, e caso resultado do produto entre eles seja 1, eles são paralelos, portanto semelhantes.

Portanto, nos gráficos de fidelidade, as curvas cujos valores são próximos de 1 são as que apresentam as melhores fidelidades.



# Capítulo 3

## Hamiltoniana Limitada

Escolhemos a Hamiltoniana limitada na base  $\{|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle\}$  como dada abaixo:

$$\mathbf{H}_l(t) = \begin{pmatrix} -\frac{\alpha}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ \Omega & 0 \end{pmatrix} \sin(\omega t). \quad (3.1)$$

A Hamiltoniana (3.1) pode ser escrita na forma  $\mathbf{H}_l(t) = \frac{\alpha}{2}\sigma_z + \lambda\Omega \sin(\omega t)\sigma_x$  que nos permite interpretá-la fisicamente como um campo eletromagnético, por exemplo, na direção  $x$  atuando em uma partícula com spin na direção  $z$  que possui um *gap* de energia de  $\alpha$ .

Consideramos que inicialmente o sistema esteja no estado de menor nível de energia de (3.1),

$$|\Psi(0)\rangle = |\phi_0\rangle \quad (3.2)$$

A solução exata desse sistema proposto não é trivial e por isso utilizamos uma solução numérica para compararmos com as teorias perturbativas usadas nesta dissertação. Essa solução foi obtida numericamente resolvendo-se o seguinte par de equações diferenciais acopladas:

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds}c_0(s) &= \frac{i n \pi \alpha}{2 \omega \hbar} c_0(s) - \frac{i \pi \lambda n \Omega}{\omega \hbar} c_1(s) \sin(n \pi s), \\ \frac{d}{ds}c_1(s) &= -\frac{i n \pi \lambda \Omega}{\omega \hbar} c_0(s) \sin(n \pi s) - \frac{i n \pi \alpha}{2 \omega \hbar} c_1(s). \end{aligned} \quad (3.3)$$

As expressões acima foram obtidas aplicando a Hamiltoniana limitada (3.1) na equação

de Schrödinger (2.2) onde consideramos  $t = \frac{n\pi s}{\omega}$  e

$$|\Psi_{num}(s)\rangle = \begin{pmatrix} c_0(s) \\ c_1(s) \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

### 3.1 Solução da Hamiltoniana limitada pela teoria de perturbação dependente do tempo

Na seção 2.1 vimos que podemos utilizar a teoria usual de perturbação dependente do tempo em Hamiltonianas em que é possível separar em uma parte temporal e outra não dependente explicitamente do tempo. A Hamiltoniana (3.1) nos permite fazer essa separação da seguinte forma,

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} -\frac{\alpha}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{V}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \Omega \sin(\omega t) \\ \Omega \sin(\omega t) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

com  $\lambda$  o fator perturbativo pequeno.

Os estados  $|\phi_0\rangle$  e  $|\phi_1\rangle$  são autoestados de  $\mathbf{H}_0$  com autoenergias  $-\frac{\alpha}{2}$  e  $\frac{\alpha}{2}$  respectivamente e com isso já podemos definir os  $\omega_{nk}$ , equação (2.9)

$$\begin{aligned} \omega_{00} &= \omega_{11} = 0, \\ \omega_{01} &= -\frac{\alpha}{\hbar}, \\ \omega_{10} &= \frac{\alpha}{\hbar}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Lembrando que a teoria da perturbação dependente do tempo possui a ordem zero como solução da Hamiltoniana não perturbada, as condições iniciais (3.2) definem os coeficientes de ordem zero,

$$\begin{aligned} b_0^{(0)}(t) &= 1, \\ b_0^{(1)}(t) &= 0. \end{aligned} \quad (3.7)$$

A primeira ordem da perturbação é determinada usando a equação de recorrência (2.12), onde substituímos  $\omega_{nk}$  e  $b_0^{(0)}(t)$  pelas equações (5.41) e (5.42), e  $V_{nk}(t)$  pelos elementos de matriz da parte dependente do tempo (3.5):  $V_{00}(t) = V_{11}(t) = 0$  e  $V_{01}(t) = V_{10}(t) = \Omega \sin(\omega t)$ . Deste modo a equação de recorrência resulta em

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{b}_0^{(1)}(t) &= 0, \\ i\hbar \dot{b}_1^{(1)}(t) &= \Omega e^{\frac{i\alpha t}{\hbar}} \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Resolvendo a integral de 0 a  $t$  e simplificando temos os coeficientes de primeira ordem,

$$\begin{aligned} b_0^{(1)}(t) &= 0, \\ b_1^{(1)}(t) &= \frac{i\Omega}{\alpha^2 - \omega^2 \hbar^2} \left[ \omega \hbar + e^{\frac{i\alpha t}{\hbar}} (-\omega \hbar \cos(\omega t) + i\alpha \sin(\omega t)) \right]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

O coeficiente um de primeira ordem  $b_1^{(1)}(t)$  diverge quando  $\alpha = \omega \hbar$ . Mas refazendo o cálculo com esse parâmetros que denominamos como condição de ressonância, obtemos

$$b_{1(\alpha=\omega\hbar)}^{(1)}(t) = \frac{i\Omega (-2i\omega t + e^{2i\omega t} - 1)}{4\omega \hbar}, \quad (3.10)$$

que é o mesmo valor do limite de  $b_1^{(1)}(t)$ , equação (3.9) para  $\alpha \rightarrow \omega \hbar$ . Portanto, a função de onda de primeira ordem para ressonância é o  $\lim_{\alpha \rightarrow \omega \hbar} |\overline{\Psi}_l(t)\rangle_1$  da equação (3.11) abaixo. Com isso, a função de onda perturbativa de primeira ordem ( $j = 1$ ) geral é

$$|\overline{\Psi}_l(t)\rangle_1 = |\phi_0\rangle + \left[ \frac{i\lambda\Omega}{\alpha^2 - \omega^2 \hbar^2} \left( \omega \hbar + e^{\frac{i\alpha t}{\hbar}} (-\omega \hbar \cos(\omega t) + i\alpha \sin(\omega t)) \right) \right] |\phi_1\rangle, \quad (3.11)$$

onde aplicamos as equações (3.7), (3.9) em (2.13) e substituímos  $\varepsilon_0$  e  $\varepsilon_1$  por  $-\frac{\alpha}{2}$  e  $\frac{\alpha}{2}$  respectivamente.

### 3.1.1 Normalização

Utilizando a equação (2.45) obtemos o fator que normaliza a função de onda (3.11):

$$N_{l1} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\lambda^2 \Omega^2}{(\alpha - \omega \hbar)^2} \left[ \frac{\alpha^2 + (\omega^2 \hbar^2 - \alpha^2) \cos(2\omega t) - 2\omega \hbar \left( (\alpha + \omega \hbar) \cos\left(\omega t - \frac{\alpha t}{\hbar}\right) - (\alpha - \omega \hbar) \cos\left(\frac{\alpha t}{\hbar} + \omega t\right) \right) + 3\omega^2 \hbar^2}{2(\alpha + \omega \hbar)^2} \right]}}, \quad (3.12)$$

que expandida para  $\lambda \ll 1$  dá

$$\begin{aligned}
N_{I1} \approx 1 - \frac{\lambda^2 \Omega^2}{4(\alpha - \omega \hbar)^2 (\alpha + \omega \hbar)^2} \\
\times \left[ \alpha^2 + 3\omega^2 \hbar^2 + (\omega^2 \hbar^2 - \alpha^2) \cos(2\omega t) \right. \\
\left. - 2\omega \hbar \left( (\alpha + \omega \hbar) \cos\left(\omega t - \frac{\alpha t}{\hbar}\right) - (\alpha - \omega \hbar) \cos\left(\frac{\alpha t}{\hbar} + \omega t\right) \right) \right]. \quad (3.13)
\end{aligned}$$

Mantendo termos até a ordem  $\lambda$  obtemos a seguinte função de onda:

$$|\Psi_{TP1}(t)\rangle = |\phi_0\rangle + \left[ \frac{i\lambda\Omega}{\alpha^2 - \omega^2 \hbar^2} \left( \omega \hbar + e^{\frac{i\alpha t}{\hbar}} (-\omega \hbar \cos(\omega t) + i\alpha \sin(\omega t)) \right) \right] |\phi_1\rangle. \quad (3.14)$$

Entretanto, se estamos próximos à ressonância de tal forma que  $(\omega \hbar - \alpha)^2 \lesssim \lambda \ll 1$  a normalização (3.13) simplificada torna-se

$$N_{I1\sqrt{\lambda}} \approx 1 + \frac{\lambda\Omega^2 \left( -\alpha^2 + 2\omega \hbar (\alpha + \omega \hbar) \cos\left(\frac{\sqrt{\lambda}t}{\hbar}\right) - 3\omega^2 \hbar^2 \right)}{4(\alpha + \omega \hbar)^2}, \quad (3.15)$$

que ao multiplicar a função de onda (3.11) resulta em

$$\begin{aligned}
|\Psi_{TP1\sqrt{\lambda}}(t)\rangle = \left[ 1 - \frac{\lambda\Omega^2 \left( \alpha^2 - 2\omega \hbar (\alpha + \omega \hbar) \cos\left(\frac{\sqrt{\lambda}t}{\hbar}\right) + 3\omega^2 \hbar^2 \right)}{4(\alpha + \omega \hbar)^2} \right] |\phi_0\rangle \\
+ \left[ \frac{\sqrt{\lambda}\Omega \left( \alpha e^{\frac{i\alpha t}{\hbar}} \sin(\omega t) + i\omega \hbar e^{\frac{i\alpha t}{\hbar}} \cos(\omega t) - i\omega \hbar \right)}{\alpha + \omega \hbar} \right] |\phi_1\rangle. \quad (3.16)
\end{aligned}$$

Outro caso a ser considerado é na ressonância. Usando o limite de  $\alpha \rightarrow \omega \hbar$  da função (3.11) e normalizando obtemos

$$N_{I1R} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\lambda^2 \Omega^2 \left( 2\alpha^2 t^2 - \hbar \left( 2\alpha t \sin\left(\frac{2\alpha t}{\hbar}\right) + \hbar \cos\left(\frac{2\alpha t}{\hbar}\right) \right) + \hbar^2 \right)}{8\alpha^2 \hbar^2}}}. \quad (3.17)$$

Mantendo termos até a ordem  $\lambda$  e usando que  $\alpha = \omega \hbar$  temos

$$|\Psi_{TP1R}(t)\rangle = |\phi_0\rangle + \frac{i\lambda\Omega (-2i\omega t + e^{2i\omega t} - 1)}{4\omega \hbar} |\phi_1\rangle. \quad (3.18)$$

A subseção 3.2 resolve perturbativamente a Hamiltoniana limitada (3.1) através da teoria da perturbação adiabática, considerando o tempo normalizado  $s$ , sendo  $t = \frac{n\pi}{\omega} s$  com  $n$  real, que definirá a escala do tempo. Quando compararmos as teorias é proveitoso que estejam nas mesmas variáveis. Portanto, fazendo essa substituição nas funções (3.14), (3.16) e (3.18) encontramos

$$|\Psi_{TP_I}(s)\rangle = |\phi_0\rangle + \left[ \frac{i\lambda\Omega}{\alpha^2 - \omega^2\hbar^2} \left( \omega\hbar + e^{\frac{i n \pi s \alpha}{\omega\hbar}} (-\omega\hbar \cos(n\pi s) + i\alpha \sin(n\pi s)) \right) \right] |\phi_1\rangle, \quad (3.19)$$

$$|\Psi_{TP_{\sqrt{\lambda}}}(s)\rangle = \left[ 1 - \frac{\lambda\Omega^2 \left( \alpha^2 - 2\omega\hbar(\alpha + \omega\hbar) \cos\left(\frac{n\pi\sqrt{\lambda}s}{\omega\hbar}\right) + 3\omega^2\hbar^2 \right)}{4(\alpha + \omega\hbar)^2} \right] |\phi_0\rangle \\ + \left[ \frac{\sqrt{\lambda}\Omega \left( e^{\frac{i n \pi s \alpha}{\omega\hbar}} (\alpha \sin(n\pi s) + i\omega\hbar \cos(n\pi s)) - i\omega\hbar \right)}{\alpha + \omega\hbar} \right] |\phi_1\rangle, \quad (3.20)$$

$$|\Psi_{TP_{IR}}(s)\rangle = |\phi_0\rangle + \frac{i\lambda\Omega (-2in\pi s + e^{2in\pi s} - 1)}{4\omega\hbar} |\phi_1\rangle. \quad (3.21)$$

### 3.1.2 Probabilidade de Transição

Na seção anterior encontramos três funções de onda aproximadas pelo método perturbativo. Uma quando  $(\omega\hbar - \alpha)^2 \gg \lambda$ , equação (3.19), isto é, fora da ressonância, outra função próximo da ressonância, ou seja,  $(\omega\hbar - \alpha)^2 \approx \lambda$ , equação (3.20), e por último na ressonância, quando  $\omega\hbar - \alpha = 0$ , equação (3.21).

Usando a definição de probabilidade de transição (2.43) podemos calcular a probabilidade de transição para as funções de ondas provenientes da teoria da perturbação dependente do tempo. Fora da ressonância temos que a probabilidade de transição é

$$\mathcal{P}_{TP_I}(s) = \frac{\lambda^2\Omega^2}{2(\omega\hbar - \alpha)^2(\alpha + \omega\hbar)^2} \\ \times \left[ -4\omega\hbar \left( \alpha \sin(n\pi s) \sin\left(\frac{n\pi s \alpha}{\omega\hbar}\right) + \omega\hbar \cos(n\pi s) \cos\left(\frac{n\pi s \alpha}{\omega\hbar}\right) \right) \right. \\ \left. + \alpha^2 + 3\omega^2\hbar^2 + (\omega\hbar - \alpha)(\alpha + \omega\hbar) \cos(2n\pi s) \right]. \quad (3.22)$$

Quando próximo da ressonância a probabilidade de transição obtida é

$$\mathcal{P}_{TP_{\sqrt{\lambda}}}(s) = \frac{\lambda\Omega^2}{2(\alpha + \omega\hbar)^2} \times \left[ \alpha^2 + 3\omega^2\hbar^2 - 4\omega\hbar \left( \alpha \sin(\pi ns) \sin\left(\frac{\pi\alpha ns}{\omega\hbar}\right) + \omega\hbar \cos(\pi ns) \cos\left(\frac{\pi\alpha ns}{\omega\hbar}\right) \right) \right]. \quad (3.23)$$

E finalmente para a ressonância ( $\omega\hbar = \alpha$ ) temos

$$\mathcal{P}_{TP_R}(s) = \frac{\lambda^2\Omega^2}{8\alpha^2} \left( 1 + 2n^2\pi^2s^2 - 2n\pi s \sin(2n\pi s) - \cos(2n\pi s) \right). \quad (3.24)$$

### 3.1.3 Análise dos Resultados

Nessa seção resolvemos perturbativamente a Hamiltoniana limitada (3.1) aplicando a teoria da perturbação dependente do tempo, subseção 2.1. Com ela construímos três funções de onda aproximadas, equações (3.19), (3.20) e (3.21), que consideram diferentes valores de  $\omega\hbar - \alpha$ . Por meio delas obtemos as probabilidades de transição (3.22), (3.23) e (3.24).

As probabilidades de transição obtidas apresentam um comportamento interessante. De fato, ao substituir  $\omega\hbar - \alpha$  por  $\sqrt{\lambda}$  na equação (3.22) e desprezando o termo proporcional  $\lambda^{\frac{3}{2}}$  obtemos

$$\mathcal{P}_{(\omega\hbar - \alpha = \sqrt{\lambda})TP_I}(s) \approx \frac{\lambda\Omega^2}{2(\alpha + \omega\hbar)^2} \times \left[ \alpha^2 + 3\omega^2\hbar^2 - 4\omega\hbar \left( \alpha \sin(n\pi s) \sin\left(\frac{n\pi s\alpha}{\omega\hbar}\right) + \omega\hbar \cos(n\pi s) \cos\left(\frac{n\pi s\alpha}{\omega\hbar}\right) \right) \right],$$

que é o mesmo valor da probabilidade próximo da ressonância, equação (3.23).

Se tomarmos o limite de  $\omega \rightarrow \frac{\alpha}{\hbar}$  da função fora da ressonância encontramos

$$\mathcal{P}_{(\omega\hbar \rightarrow \alpha)TP_I}(s) = \frac{\lambda^2\Omega^2}{8\alpha^2} \left( 1 + 2n^2\pi^2s^2 - 2n\pi s \sin(2n\pi s) - \cos(2n\pi s) \right),$$

valor idêntico a probabilidade de transição na ressonância, equação (3.23).

Portanto, se considerarmos somente a probabilidade de transição feita inicialmente fora da ressonância, equação (3.22), envolvemos todas as outras probabilidades obtidas. Como consideramos somente a probabilidade (3.22), consideramos também somente a função

de onda que a originou, equação (3.19), para comparar com os resultados da teoria de perturbação adiabática obtida no próximo capítulo.

## 3.2 Solução da Hamiltoniana limitada pela teoria de perturbação adiabática

A teoria da perturbação adiabática contida na seção 2.2, diferentemente da teoria da perturbação dependente do tempo, não requer que a Hamiltoniana seja dividida em parte explicitamente dependente do tempo e parte não dependente. Ela considera a Hamiltoniana total e somente requer que seja possível obter os autoestados e autoenergias instantâneas da Hamiltoniana.

A teoria considera o tempo reescalado  $s = vt$ , onde  $v$  define a ordem de expansão da função de onda na solução perturbativa. Dessa forma, reescalando a Hamiltoniana limitada para que possamos empregar a teoria da perturbação adiabática chegamos a

$$\mathbf{H}_l(s) = \begin{pmatrix} -\frac{\alpha}{2} & \lambda\Omega \sin\left(\frac{\omega s}{v}\right) \\ \lambda\Omega \sin\left(\frac{\omega s}{v}\right) & \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

que possui autoenergias e autoestados

$$\begin{aligned} E_0(s) &= -\frac{1}{2}\alpha\sqrt{1+f(s)^2}, \\ E_1(s) &= \frac{1}{2}\alpha\sqrt{1+f(s)^2}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} |0(s)\rangle &= \left[ \frac{1 + \sqrt{1+f(s)^2}}{\sqrt{2}\sqrt{1+f(s)^2 + \sqrt{1+f(s)^2}}} \right] |\phi_0\rangle - \left[ \frac{f(s)}{\sqrt{2}\sqrt{1+f(s)^2 + \sqrt{1+f(s)^2}}} \right] |\phi_1\rangle, \\ |1(s)\rangle &= \left[ \frac{f(s)}{\sqrt{2}\sqrt{1+f(s)^2 + \sqrt{1+f(s)^2}}} \right] |\phi_0\rangle + \left[ \frac{1 + \sqrt{1+f(s)^2}}{\sqrt{2}\sqrt{1+f(s)^2 + \sqrt{1+f(s)^2}}} \right] |\phi_1\rangle. \end{aligned} \quad (3.27)$$

aqui

$$f(s) = \frac{2\lambda\Omega}{\alpha} \sin\left(\frac{\omega s}{v}\right), \quad (3.28)$$

que será usado nas equações daqui em diante para torná-las mais compactas.

Agora que temos o suficiente para aplicar a teoria da perturbação adiabática vamos obter as equações necessárias para encontrar os coeficientes de ordem zero e ordem um, veja equação (2.33). A diferença das autoenergias nos dá o  $\Delta_{nm}$ ,

$$\begin{aligned}\Delta_{01}(s) &= -\alpha\sqrt{1+f(s)^2}, \\ \Delta_{10}(s) &= \alpha\sqrt{1+f(s)^2}.\end{aligned}\tag{3.29}$$

Aplicando os autoestados (3.27) na equação (2.25) resulta em

$$\begin{aligned}M_{00}(s) &= M_{11}(s) = 0, \\ M_{01}(s) &= \frac{\lambda\omega\Omega \cos\left(\frac{s\omega}{v}\right)}{v\alpha(1+f(s)^2)}, \\ M_{10}(s) &= -\frac{\lambda\omega\Omega \cos\left(\frac{s\omega}{v}\right)}{v\alpha(1+f(s)^2)}.\end{aligned}\tag{3.30}$$

As fases dinâmicas  $\omega_n(s)$ , equação (2.24), as fases de Berry  $\gamma_n(s)$ , equação (2.23), e os  $J_{mn}(s)$ , equação (2.38), são obtidas utilizando as equações (3.26) e (3.30):

$$\begin{aligned}\gamma_0(s) &= 0, \\ \gamma_1(s) &= 0,\end{aligned}\tag{3.31}$$

$$\begin{aligned}\omega_0(s) &= -\frac{v\alpha}{2\omega\hbar}E\left(\frac{s\omega}{v}\middle| -\frac{4\lambda^2\Omega^2}{\alpha^2}\right), \\ \omega_1(s) &= \frac{v\alpha}{2\omega\hbar}E\left(\frac{s\omega}{v}\middle| -\frac{4\lambda^2\Omega^2}{\alpha^2}\right),\end{aligned}\tag{3.32}$$

onde a função  $E\left(\frac{s\omega}{v}\middle| -\frac{4\lambda^2\Omega^2}{\alpha^2}\right)$  é a integral elíptica do tipo dois.

Por fim,

$$\begin{aligned}J_{01}(s) &= -\frac{\omega}{12\alpha(\Lambda^2+1)v}\left[(2\Lambda^2+1)E\left(\frac{s\omega}{v}\middle| -\Lambda^2\right) - (\Lambda^2+1)F\left(\frac{s\omega}{v}\middle| -\Lambda^2\right)\right. \\ &\quad \left. + \frac{\Lambda f(s)((2\Lambda^2+1)f(s)^2 + 3\Lambda^2 + 2)\cos\left(\frac{s\omega}{v}\right)}{(f(s)^2+1)^{3/2}}\right],\end{aligned}\tag{3.33}$$

$$J_{10}(s) = -J_{01}(s),$$

com

$$\Lambda = \frac{2\lambda\Omega}{\alpha} \quad (3.34)$$

e  $F\left(\frac{s\omega}{v} \middle| -\Lambda^2\right)$  a integral elíptica de tipo um.

As integrais elípticas do tipo um e dois são definidas como

$$E(\phi|m) = \int_0^\phi \sqrt{1 - m \sin^2(\theta)} d\theta, \quad (3.35)$$

$$F(\phi|m) = \int_0^\phi \frac{1}{\sqrt{1 - m \sin^2(\theta)}} d\theta. \quad (3.36)$$

Temos que  $\frac{M_{01}(s)}{\Delta_{01}(s)} = \frac{M_{10}(s)}{\Delta_{10}(s)}$  o que nos permite definir  $\mu(s) = \frac{M_{nm}(s)}{\Delta_{nm}(s)}$  como

$$\mu(s) = -\frac{\lambda\omega\Omega \cos\left(\frac{s\omega}{v}\right)}{\alpha^2 v (1 + f(s)^2)^{3/2}}. \quad (3.37)$$

Quando  $s = 0$  temos que  $|0(0)\rangle = |\phi_0\rangle$  e  $|1(0)\rangle = |\phi_1\rangle$ . Supomos que a função de onda esta inicialmente no estado  $|\phi_0\rangle$  equação (3.2). Logo, na base dos autoestados de  $\mathbf{H}_l(s)$  temos que  $|\psi(0)\rangle = |0(0)\rangle$  e em consequência disso as condições iniciais são

$$\begin{aligned} b_0^{(0)}(0) &= 1, \\ b_1^{(0)}(0) &= 0. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Para  $p = 0$ , substituindo (3.38), (3.31) e (3.27) na equação (2.19) a função de onda de ordem zero é obtida como

$$|\Psi_l^{(0)}(s)\rangle_0 = \frac{e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}}}{\sqrt{2}\sqrt{1 + f(s)^2} + \sqrt{1 + f(s)^2}} \left[ \left(1 + \sqrt{1 + f(s)^2}\right) |\phi_0\rangle - f(s) |\phi_1\rangle \right]. \quad (3.39)$$

Para obtermos a função de onda de ordem  $p = 1$  precisamos calcular primeiramente os coeficientes  $b_{nm}^{(1)}(s)$  através da fórmula de recorrência (2.12), ou usar diretamente a fórmula geral para  $|\Psi^{(1)}\rangle$ , equação (2.41)

$$|\Psi^{(1)}\rangle = -i\hbar J_{01}(s)e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}}|0(s)\rangle + i\hbar e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}}\left(\mu(s) - \mu(0)e^{\frac{2i\omega_0(s)}{v}}\right)|1(s)\rangle, \quad (3.40)$$

onde  $J_{01}(s)$ ,  $\omega_0(s)$  e  $\mu(s)$  são dados pelas equações (3.33), (3.32) e (3.37), e os autoestados  $|0(s)\rangle$  e  $|1(s)\rangle$  pela equação (3.27).

### 3.2.1 Normalização

A teoria da perturbação adiabática possui como ponto de partida a aproximação adiabática, que por definição já está normalizada. Logo, seus coeficientes não variam no tempo e portanto a função de onda de ordem zero (3.39) não requer normalização. Na base dos autoestados da Hamiltoniana limitada, equação (3.27), e  $\omega_0(s)$  dado por (3.32) temos

$$\left|\Psi_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^0}(s)\right\rangle = e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}}|0(s)\rangle. \quad (3.41)$$

Já a função de primeira ordem  $|\tilde{\Psi}(s)\rangle_1 = |\Psi^{(0)}(s)\rangle + v|\Psi^{(1)}(s)\rangle$ , equação (2.42), necessita ser normalizada. A partir de (2.47) obtemos a normalização exata

$$\tilde{N}_1 = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\omega^2\hbar^2}{\alpha^2}N}}, \quad (3.42)$$

com

$$N = \frac{\Lambda^2}{4} \left( 1 + \frac{\cos^2\left(\frac{s\omega}{v}\right)}{(f(s)^2 + 1)^3} - \frac{2 \cos\left(\frac{s\omega}{v}\right) \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right)}{(1 + f(s)^2)^{3/2}} \right) + \left[ \frac{(2\Lambda^2 + 1) \text{E}\left(\frac{\omega s}{v} \mid -\Lambda^2\right) - (\Lambda^2 + 1) \text{F}\left(\frac{\omega s}{v} \mid -\Lambda^2\right)}{12(\Lambda^2 + 1)} + \frac{\Lambda f(s) ((2\Lambda^2 + 1) f(s)^2 + 3\Lambda^2 + 2) \cos\left(\frac{s\omega}{v}\right)}{12(\Lambda^2 + 1) (1 + f(s)^2)^{3/2}} \right]^2 \quad (3.43)$$

e  $\Lambda$  sendo dado pela equação (3.34).

Quando substituimos  $v|\Psi^{(1)}\rangle$  na função de onda solução perturbada, equação (2.19), ela não depende mais de  $v$  porque a função de onda  $|\Psi^{(1)}\rangle \propto \frac{1}{v}$  uma vez que as equações  $J_{nm}$  e  $\mu(s)$  possuem esse termo.

Essa é uma característica única da teoria de perturbação adiabática, pois quando escrevemos a função de onda aproximada ela não possui mais a dependência explícita em  $v$ , que é o termo que fizemos a expansão da função de onda solução. Portanto, devemos analisar com cuidado a função de onda perturbada de ordem 1 e verificar qual o termo perturbativo efetivo da função.

Analisando a função e também a normalização percebemos que o termo efetivo de perturbação na nossa função é a razão  $\frac{\omega\hbar}{\alpha}$ .

Se  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} \ll 1$  a normalização (3.42) pode ser expandida em

$$\tilde{N}_1 \approx 1 - \frac{\omega^2\hbar^2}{2\alpha^2}N + \mathcal{O}\left(\frac{\omega^3\hbar^3}{\alpha^3}\right). \quad (3.44)$$

Mantendo termos até ordem um e ordem dois em  $\frac{\omega\hbar}{\alpha}$  obtemos

$$\begin{aligned} N_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)} &= 1, \\ N_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)}^2 &= 1 - \frac{\omega^2\hbar^2}{2\alpha^2}N. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Considerando a expansão até primeira ordem para a normalização a função de onda perturbada de primeira ordem simplificada é

$$\begin{aligned} \left| \Psi_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)}(s) \right\rangle &= e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}} |0(s)\rangle \\ &\quad - \frac{\omega\hbar}{\alpha} \left[ i \frac{v\alpha}{\omega} J_{01}(s) |0(s)\rangle - i \left( \frac{v\alpha}{\omega} \mu(s) + \frac{\Lambda}{2} e^{\frac{2i\omega_0(s)}{v}} \right) |1(s)\rangle \right] e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Utilizando a normalização expandida até ordem dois e desprezando os termos de ordens superiores temos que a função de onda perturbada expandida até  $\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2$  e normalizada vale

$$\begin{aligned} \left| \Psi_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s) \right\rangle &= e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}} |0(s)\rangle \\ &\quad - \frac{\omega\hbar}{\alpha} \left[ i \frac{v\alpha}{\omega} J_{01}(s) |0(s)\rangle - i \left( \frac{v\alpha}{\omega} \mu(s) + \frac{\Lambda}{2} e^{\frac{2i\omega_0(s)}{v}} \right) |1(s)\rangle \right] e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}} \\ &\quad - \frac{\omega^2\hbar^2}{2\alpha^2} \left[ \left( \frac{v\alpha}{\omega} J_{01}(s) \right)^2 + \left( \frac{\alpha v}{\omega} \mu(s) \right)^2 + \frac{\Lambda^2}{4} + \frac{v\alpha}{\omega} \mu(s) \Lambda \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right) \right] e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}} |0(s)\rangle. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Como supomos  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} \ll 1$  e  $v$  possui escala de frequência, definimos que  $v \propto \omega$ . Portanto

$$v = \frac{\omega}{n\pi}, \quad (3.48)$$

com  $n$  arbitrário, mas de tal forma a manter  $v \ll 1$ .

Com essa escolha definimos a duração do experimento  $T = \frac{1}{v}$  durante o qual o sistema evolui quase-adiabaticamente.

### 3.2.2 Probabilidade de Transição

Na subseção 3.2.2 encontramos a função de onda perturbada de ordem zero, equação (3.39), e a função de onda perturbada de primeira ordem com duas possíveis expansões em termos de  $\frac{\omega\hbar}{\alpha}$ , equações (3.46) e (3.47). Usando a relação (2.43) encontramos a probabilidade de transição para estes casos como sendo respectivamente,

$$\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^0}(s) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{1+f(s)^2}}, \quad (3.49)$$

$$\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^1}(s) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{1+f(s)^2}} + \frac{\omega\hbar}{\alpha} \left( \frac{\Lambda f(s) \sin\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right)}{2\sqrt{f(s)^2+1}} \right), \quad (3.50)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s) = & \frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{1+f(s)^2}} + \frac{\omega\hbar}{\alpha} \left( \frac{\Lambda f(s) \sin\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right)}{2\sqrt{f(s)^2+1}} \right) \\ & + \frac{\omega^2\hbar^2}{\alpha^2} \left[ p_1 - \frac{\Lambda^2 \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right)}{192(\Lambda^2+1)(1+f(s)^2)^{5/2}} p_2 \right]. \end{aligned} \quad (3.51)$$

aqui

$$\begin{aligned} p_1 = & \frac{\Lambda f(s) \cos(n\pi s)}{24(\Lambda^2+1)(1+f(s)^2)^2} \left[ (2\Lambda^2+1) E(n\pi s | -\Lambda^2) - (\Lambda^2+1) F(n\pi s | -\Lambda^2) \right] \\ & + \frac{(6\Lambda^4+4\Lambda^2-1)f(s)^6 + 2(10\Lambda^4+8\Lambda^2-1)f(s)^4 + (21\Lambda^4+14\Lambda^2-6)f(s)^2}{24(\Lambda^2+1)(1+f(s)^2)^{7/2}} \\ & + \frac{\Lambda^2}{2(1+f(s)^2)^{7/2}}, \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$p_2 = \frac{8}{\Lambda} f(s) (1 + f(s)^2)^2 \left( (2\Lambda^2 + 1) E(n\pi s | -\Lambda^2) - (\Lambda^2 + 1) F(n\pi s | -\Lambda^2) \right) + 8\sqrt{1 + f(s)^2} \left( (2\Lambda^2 + 1) f(s)^4 + (3\Lambda^2 + 2) f(s)^2 + 12(\Lambda^2 + 1) \right) \cos(n\pi s). \quad (3.53)$$

e  $f(s)$  é dado pela equação (3.28),  $\Lambda$  por (3.34) e  $\omega_0(s)$  por (3.32).

### 3.2.3 Análise dos Resultados

A teoria da perturbação adiabática nos proporcionou obter a função de onda perturbada de ordem zero, equação (3.41), e as funções de ordem um, equações (3.46) e (3.47), que consideram expansão em primeira e segunda ordem do termo  $\frac{\omega\hbar}{\alpha}$  no fator de normalização.

Essas funções de ondas perturbativas nos possibilitaram calcular a probabilidade de se encontrar o sistema no estado  $|\phi_1\rangle$  para cada um dos casos.

Tanto as funções de onda obtidas quanto as equações de probabilidades apresentaram um comportamento que podemos chamar de aditivo. Isto é, as ordens superiores são dadas pelo termo da ordem anterior mais uma correção relativa a ordem atual.

Por exemplo, a probabilidade (3.51) pode ser escrita como

$$\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s) = \mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^1}(s) + \left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2 A(s),$$

onde  $A(s)$  é o termo que multiplica  $\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2$  na equação (3.51).

Foi comentado na subseção 3.2.1 que realizando o produto  $v |\Psi^{(1)}\rangle$  o parâmetro  $v$  é eliminado exceto quando acompanhado de  $s$ . No entanto, se analisarmos cuidadosamente vemos que o termo *pequeno* que consideramos na expansão da normalização é similar a  $\frac{v\hbar}{\alpha}$ . Logo, na teoria da perturbação adiabática não somente  $v$  deve ser pequeno, mas a razão entre  $v$  e o *gap* de energia deve ser pequeno para que ela dê bons resultados.



# Capítulo 4

## Comparações para Hamiltoniana limitada

Nas seções 3.1 e 3.2 encontramos as funções de ondas perturbativas e suas respectivas probabilidades de transição para a Hamiltoniana limitada (3.1) através de métodos perturbativos. Neste capítulo comparamos essas grandezas com os resultados exatos. Faremos isso através de uma análise gráfica.

Para plotar os gráficos consideramos  $\Omega = 1$ ,  $\hbar = 1$  e  $n = 2$ .

As probabilidades de transição obtidas via método perturbativos comparadas com a solução exata podem ser vista nos gráficos 4.1, 4.3, 4.4 e 4.5. As fidelidades que foram calculadas usando a equação (2.48) estão nos gráficos 4.6, 4.7, 4.8 e 4.9.

### 4.1 Análise dos resultados

Antes de analisarmos os resultados devemos lembrar o que a palavra "expansão" significa aqui. Ela refere-se as expansões da normalização, com exceção da expansão de ordem zero da teoria da perturbação adiabática, que se refere a aproximação adiabática. Devemos ter sempre em mente que a primeira e segunda ordem de expansões foram obtidas considerando as funções perturbativas até ordem 1 em ambas as teorias.

A primeira conclusão a se considerar advém da escolha do *gap* de energia ser  $\alpha = 1$  ao invés de qualquer outro valor. Podemos verificar pelos gráficos 4.1 e 4.2 que o valor de  $\alpha$  somente altera a escala da probabilidade, pois quanto maior a distância entre os níveis de energia mais difícil de ocorrer a transição. Assim escolhendo o *gap* sendo unitário não altera em nada a análise qualitativa dos resultados, além disso, como consideramos  $\hbar$

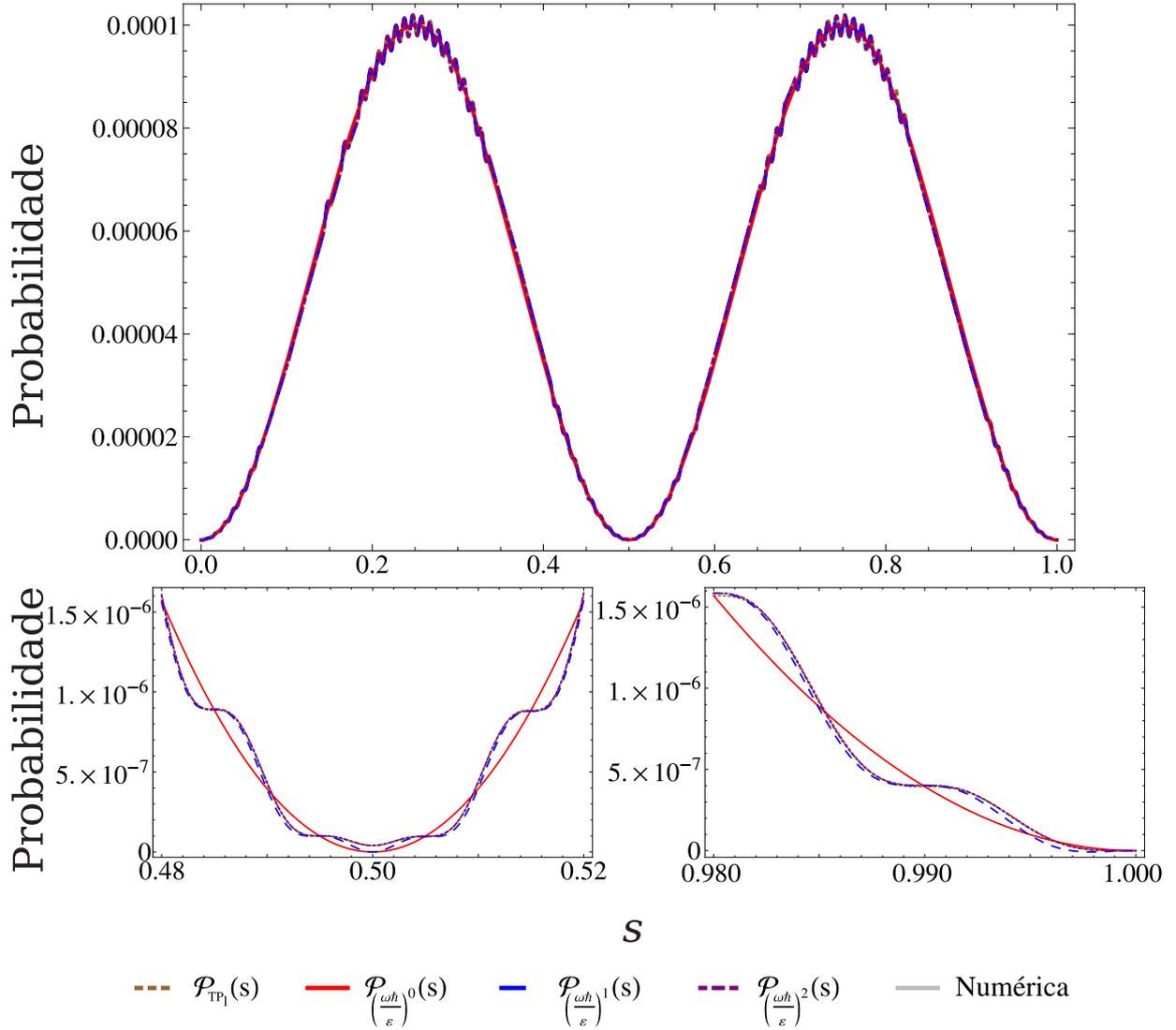


Figura 4.1: Probabilidade de transição. Gráficos obtidos através da teoria de perturbação dependente do tempo, equação (3.22), da teoria da perturbação adiabática, equações (3.49), (3.50) e (3.51), e da solução exata numericamente obtida resolvendo-se (3.3) com  $\alpha = 1$ ,  $\omega = 0.01$ , de modo que  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ , e  $\lambda = 0.01$ . No gráfico principal, as probabilidades aproximadas estão indistinguíveis da probabilidade numérica exata, exceto a ordem zero.  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^0}(s)$  não acompanha as flutuações da exata. No detalhe, em  $s = 0.5$ , somente  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s)$  e  $\mathcal{P}_{TP_1}(s)$  estão de acordo com a exata. Aqui não é possível determinar qual teoria oferece melhor resultado.

também unitário, o *pequeno* para teoria da perturbação adiabática recai somente sobre o valor de  $\omega$ .

Com base nos gráficos de probabilidades 4.1, 4.3, 4.4 e 4.5, a primeira coisa que podemos

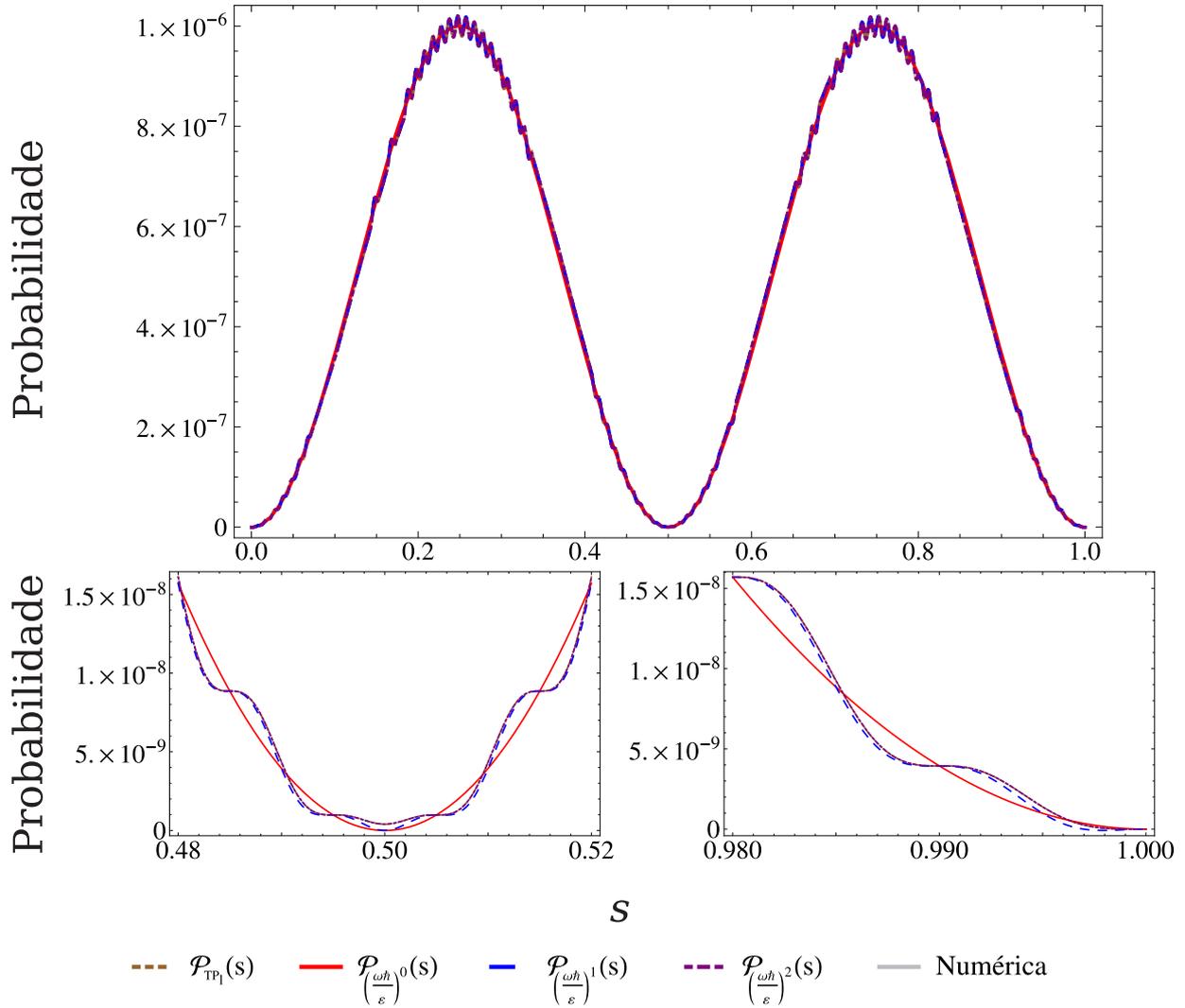


Figura 4.2: Probabilidade de transição. Gráficos obtidos através da teoria de perturbação dependente do tempo, equação (3.22), da teoria da perturbação adiabática, equações (3.49), (3.50) e (3.51), e da solução exata numericamente obtida resolvendo-se (3.3) com  $\alpha = 10$ ,  $\omega = 0.1$ , de modo que  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ , e  $\lambda = 0.01$ . Este gráfico apresenta comportamento igual ao gráfico 4.1, com a diferença da escala da probabilidade de transição, pois aqui foi usado o *gap* de energia 10 vezes maior.

perceber é que se  $\lambda < \left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)$  a teoria da perturbação dependente do tempo dá melhores resultados. No caso contrário, se  $\lambda > \left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)$ , a teoria com melhores resultados é a da perturbação adiabática. Isso é o esperado ocorrer, pois a teoria padrão dá melhor resultado para  $\lambda$  pequeno enquanto a teoria adiabática funciona apropriadamente quando  $v = \frac{\omega}{2\pi}$  é pequeno.

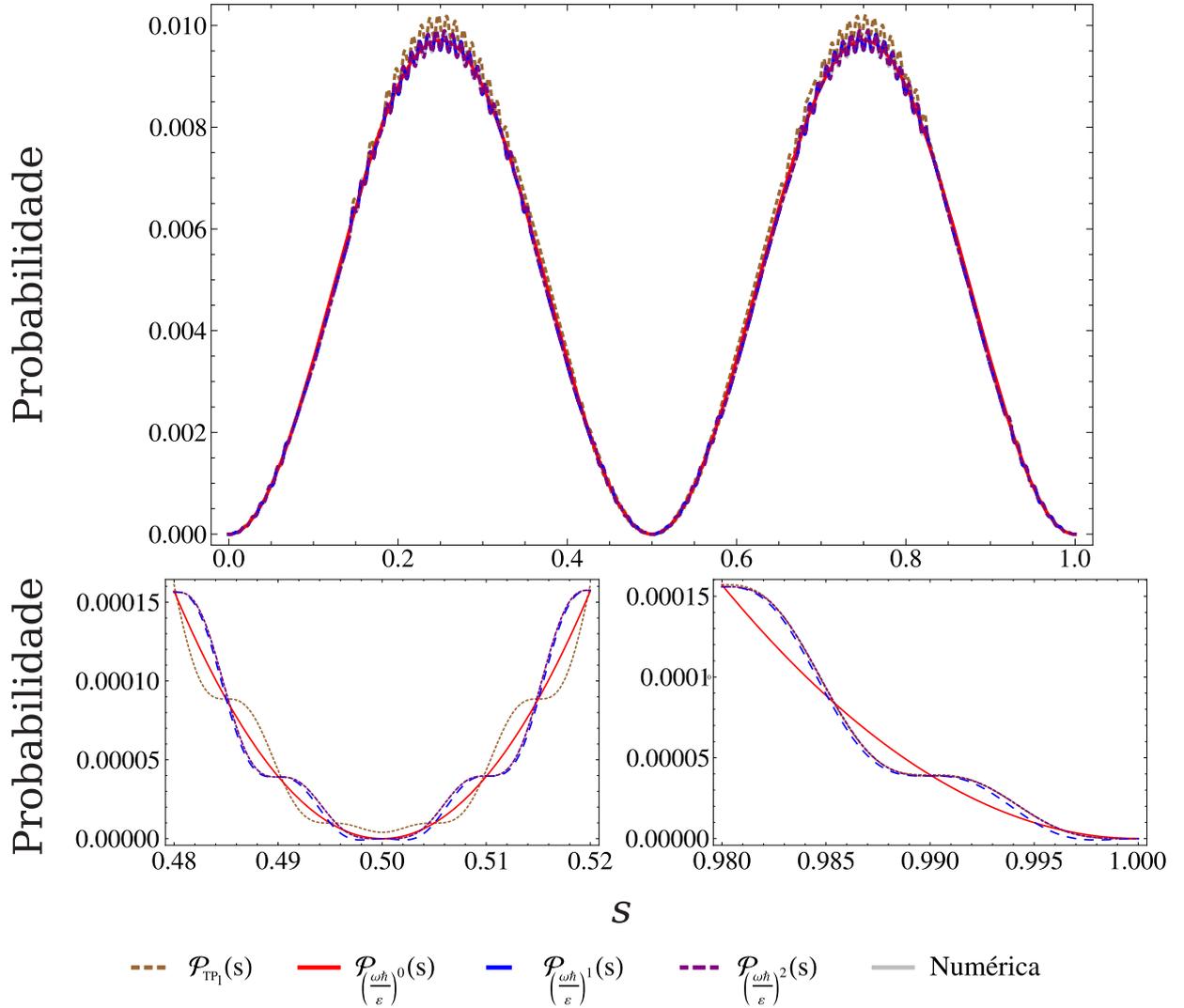


Figura 4.3: Probabilidade de transição. Gráficos obtidos através da teoria de perturbação dependente do tempo, equação (3.22), da teoria da perturbação adiabática, equações (3.49), (3.50) e (3.51), e da solução exata numericamente obtida resolvendo-se (3.3) com  $\alpha = 1$ ,  $\omega = 0.01$ , de modo que  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ , e  $\lambda = 0.1$ . No gráfico principal, podemos ver claramente que a teoria da perturbação adiabática apresenta melhores resultados. Nos detalhes, em  $s \approx 0.5$ ,  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s)$  é indistinguível da solução numérica exata. Em  $s \approx 1$ , as probabilidades tendem ao mesmo valor, com a  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s)$  ainda indistinguível da exata e  $\mathcal{P}_{TP_1}(s)$  melhor aproximada do que a  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^1}(s)$  e  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^0}(s)$ .

Em  $s = 0.5$ , tanto a ordem zero da teoria da perturbação adiabática quanto a primeira ordem de expansão da normalização não oferecem boas aproximações. A probabilidade  $\mathcal{P}_{TP_1}(s)$  se aproxima da solução numérica apenas para  $\lambda \lesssim 0.01$ . Contudo, expandindo

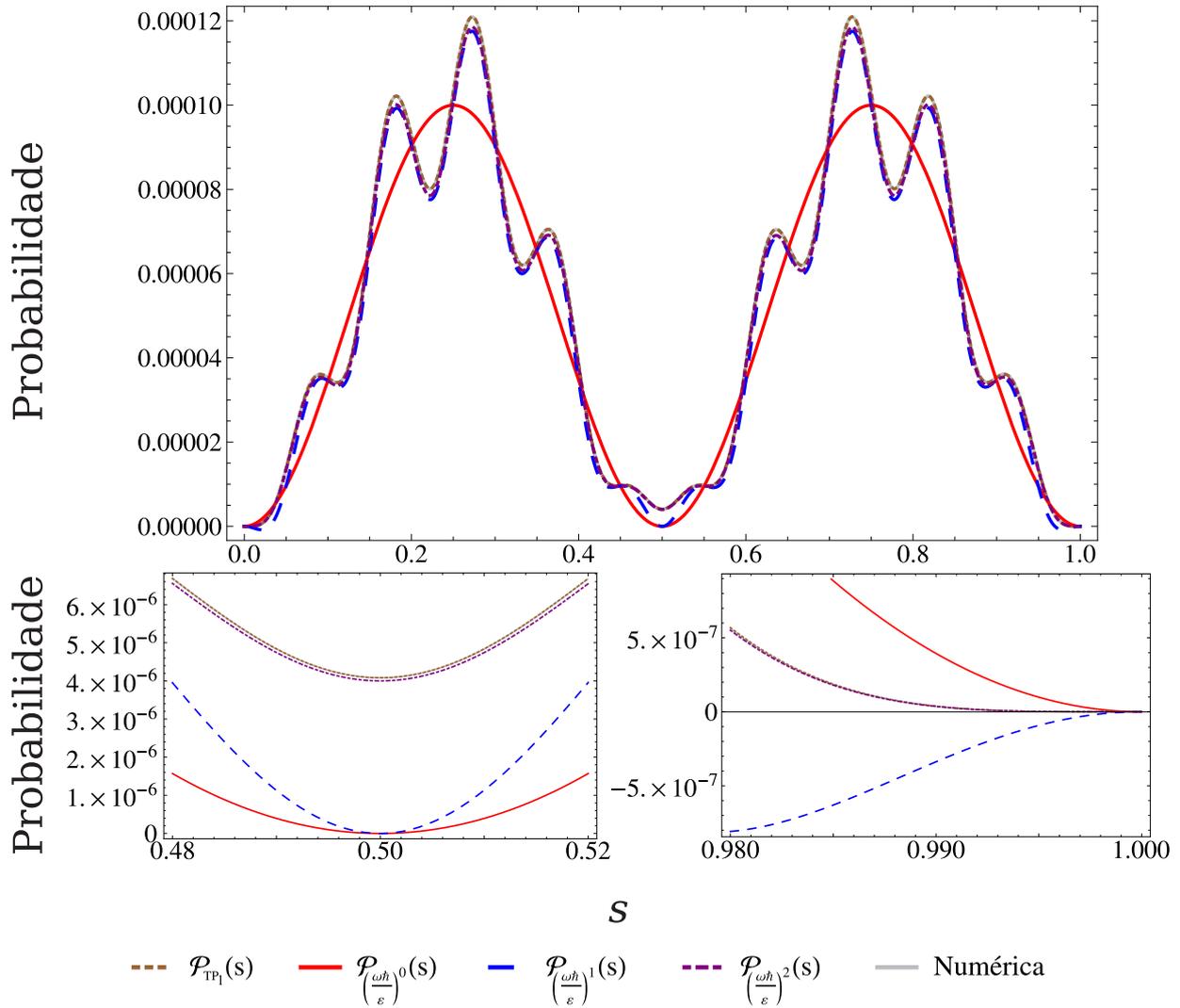


Figura 4.4: Probabilidade de transição. Gráficos obtidos através da teoria de perturbação dependente do tempo, equação (3.22), da teoria da perturbação adiabática, equações (3.49), (3.50) e (3.51), e da solução exata numericamente obtida resolvendo-se (3.3) com  $\alpha = 1$ ,  $\omega = 0.1$ , de modo que  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.1$ , e  $\lambda = 0.01$ . No gráfico principal podemos ver que a teoria padrão apresenta melhor resultado, pois  $\mathcal{P}_{TP_1}(s)$  é indistinguível da solução numérica exata. Nos detalhes, podemos perceber que  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s)$  apresenta uma aproximação muito boa em relação a solução exata, além de ser melhor aproximação em relação a  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^1}(s)$  e  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^0}(s)$ . A probabilidade padrão continua indistinguível da probabilidade exata.

a normalização até a segunda ordem para a perturbação adiabática, obtemos um acordo quase que perfeito entre a solução numérica e a solução perturbativa para todo o tempo, principalmente no gráfico 4.5, que em  $s = 1$  apresenta o resultado mais próximo da solução

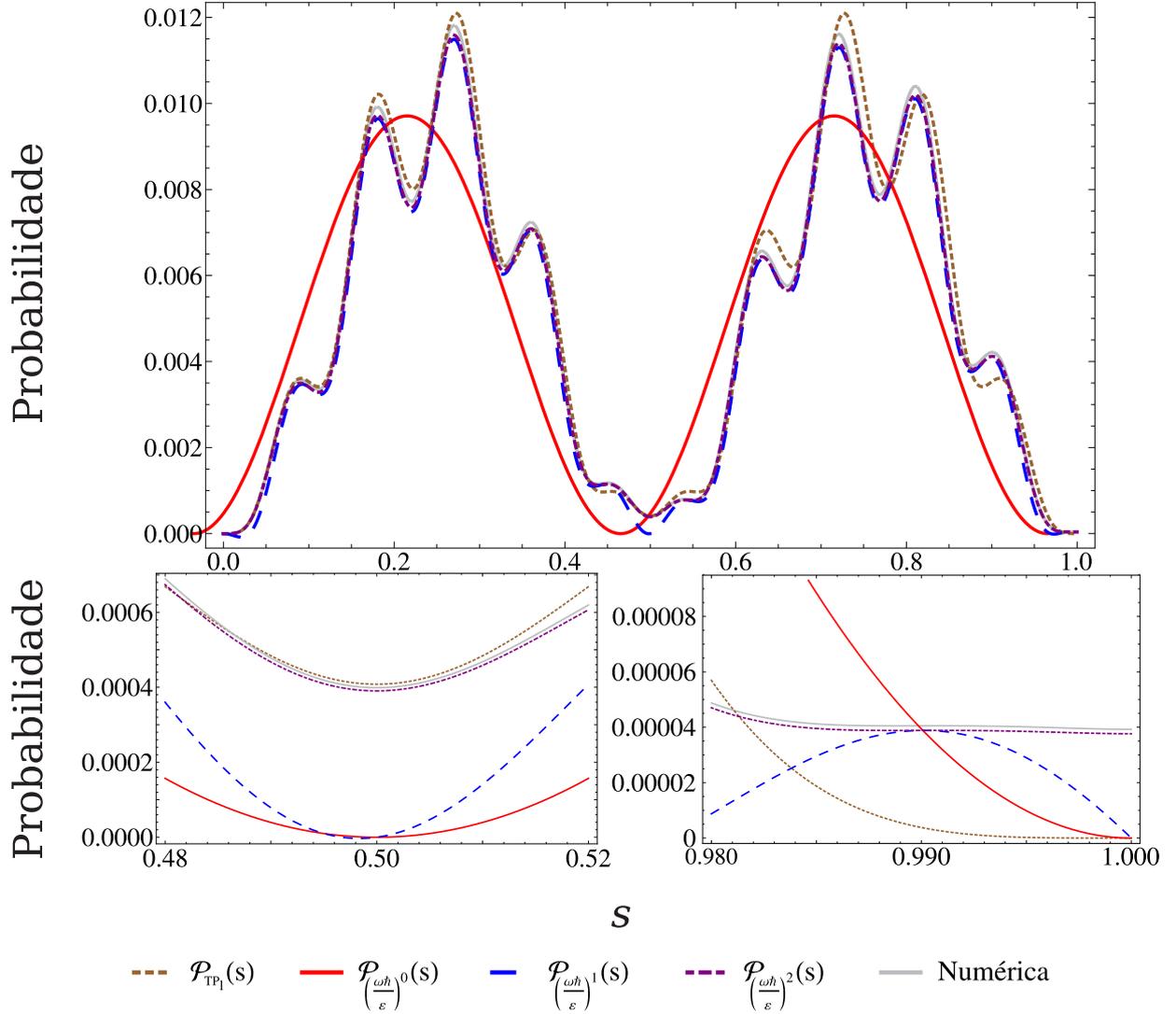


Figura 4.5: Probabilidade de transição. Gráficos obtidos através da teoria de perturbação dependente do tempo, equação (3.22), da teoria da perturbação adiabática, equações (3.49), (3.50) e (3.51), e da solução exata numericamente obtida resolvendo-se (3.3) com  $\alpha = 1$ ,  $\omega = 0.1$ , de modo que  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.1$ , e  $\lambda = 0.1$ . No gráfico principal, não é possível determinar claramente qual teoria mais se aproxima do resultado numérico exato, pois hora a  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s)$  está melhor, hora  $\mathcal{P}_{TP1}(s)$ . Nos detalhes, em  $s \approx 0.5$  a probabilidade  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s)$  é ligeiramente mais próxima da solução exata. Em  $s \approx 1$  somente  $\mathcal{P}_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s)$  está em acordo com a solução numérica exata. Portanto, concluímos que a teoria da perturbação adiabática apresenta melhor aproximação.

numérica exata.

No caso em que  $\lambda = \left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)$  é difícil dizer qual teoria é mais eficiente se olharmos apenas

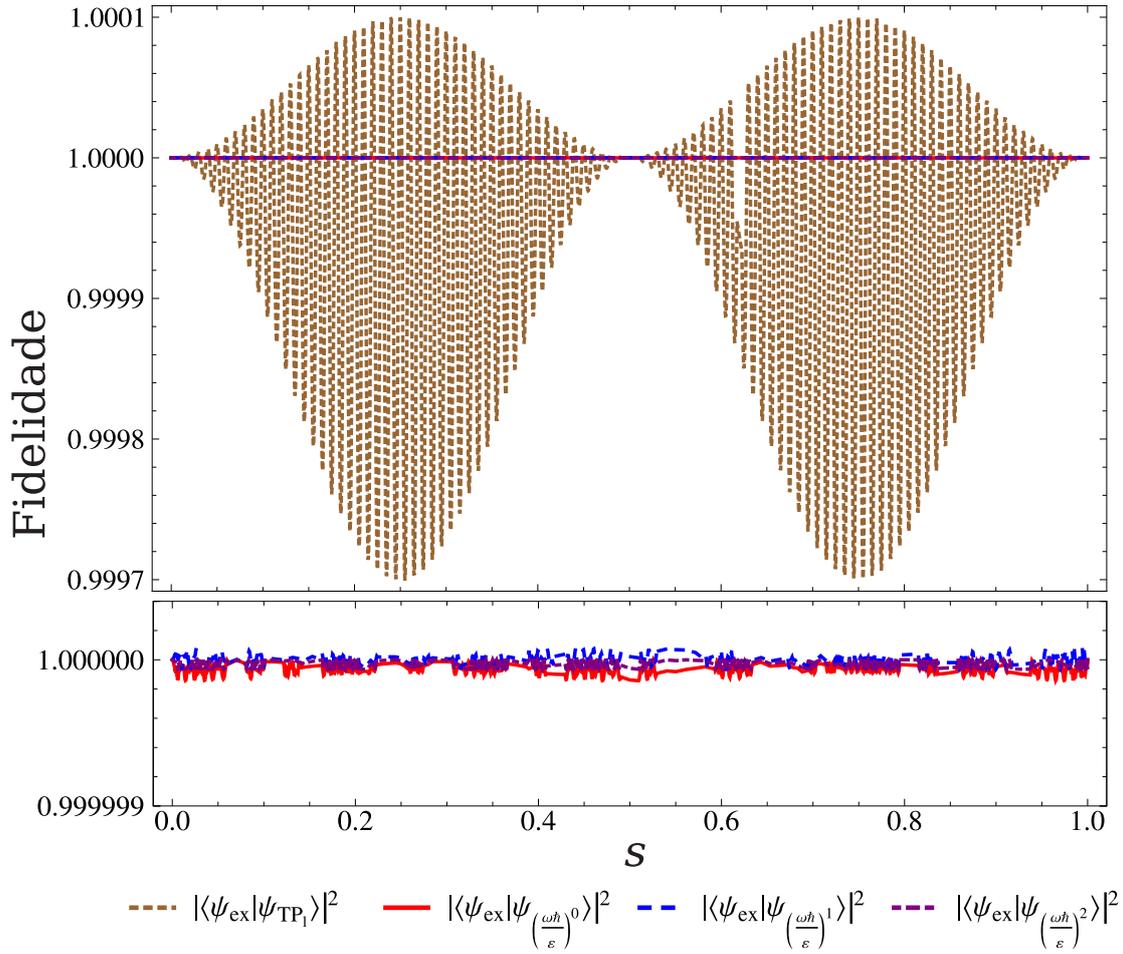


Figura 4.6: Fidelidade. Gráficos obtidos através da teoria de perturbação dependente do tempo, equação (3.19), da teoria da perturbação adiabática, equações (3.41), (3.46) e (3.47), e da função de onda numérica, equação (3.4), com  $\alpha = 1$ ,  $\omega = 0.01$ , de modo que  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ , e  $\lambda = 0.01$ . No gráfico principal, vemos claramente que a teoria da perturbação adiabática possui fidelidade mais próxima a 1. No detalhe,  $|\langle \psi_{\text{ex}}(s) | \psi_{\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)^2}(s) \rangle|^2$  possui a fidelidade mais próxima de 1 que as outras ordens da teoria adiabática.

para o comportamento da probabilidade de transição. Desse modo, usaremos a fidelidade, gráficos 4.6, 4.7, 4.8 e 4.9, para aferir qual teoria demonstra ser melhor aproximação à solução exata.

Em todos os gráficos a teoria da perturbação adiabática demonstra possuir fidelidade mais próxima de 1. Podemos perceber também que o valor  $\omega$  influencia no número de oscilações enquanto  $\lambda$  influencia nas escalas, facilmente verificado nos gráficos de mesmo valor de  $\left(\frac{\omega\hbar}{\alpha}\right)$  e gráficos com mesmo valor de  $\lambda$ .

De modo geral podemos afirmar que a teoria da perturbação adiabática é mais efi-

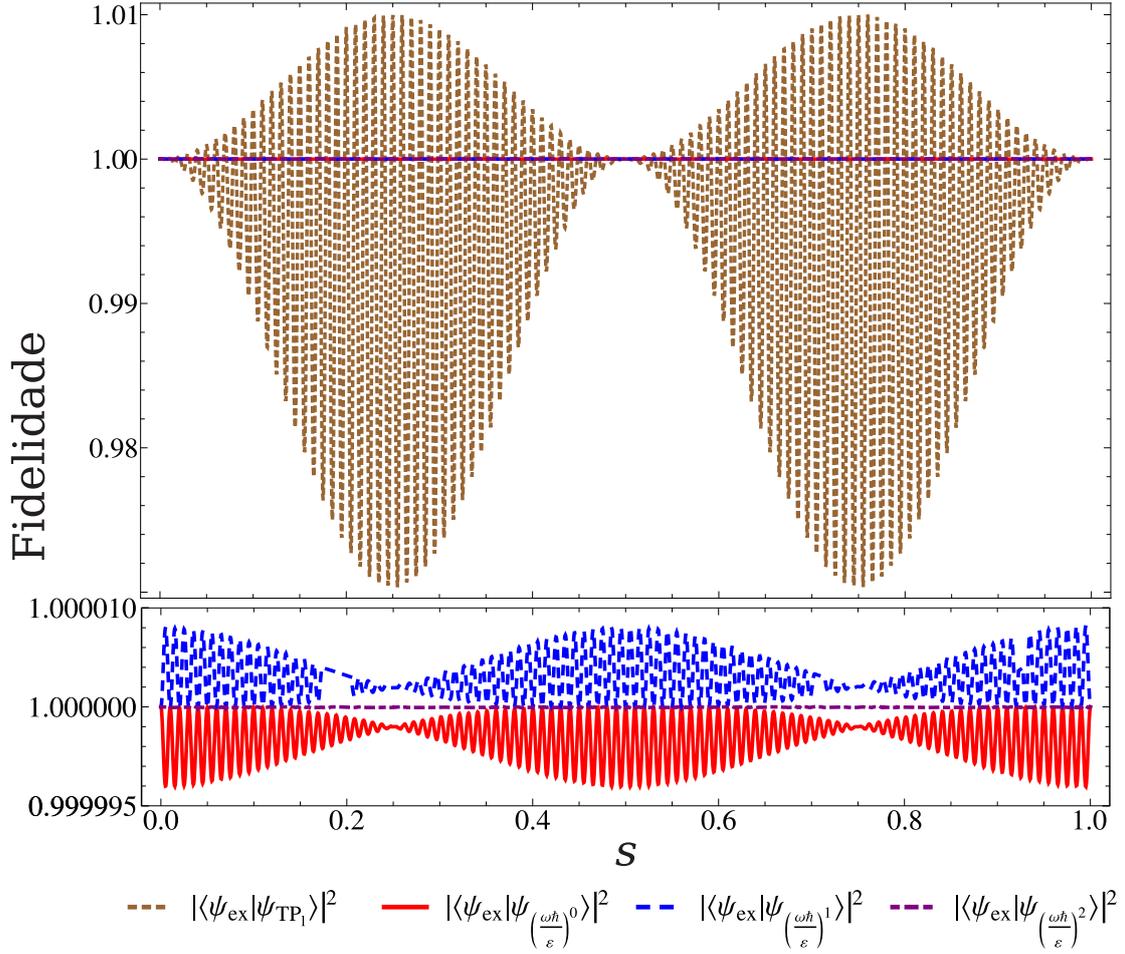


Figura 4.7: Fidelidade. Gráficos obtidos através da teoria de perturbação dependente do tempo, equação (3.19), da teoria da perturbação adiabática, equações (3.41), (3.46) e (3.47), e da função de onda numérica, equação (3.4), com  $\alpha = 1$ ,  $\omega = 0.01$ , de modo que  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.01$ , e  $\lambda = 0.1$ . No gráfico principal, vemos claramente que a teoria da perturbação adiabática possui fidelidade mais próxima a 1. No detalhe,  $|\langle \psi_{\text{ex}}(s) | \psi_{(\frac{\omega\hbar}{\alpha})^2}(s) \rangle|^2$  possui a fidelidade mais próxima de 1 que as outras ordens da teoria adiabática.

ciente que a teoria da perturbação dependente do tempo, em especial a com expansão da normalização até  $(\frac{\omega\hbar}{\alpha})^2$ , que apresentou resultados realmente favoráveis em todos os gráficos.

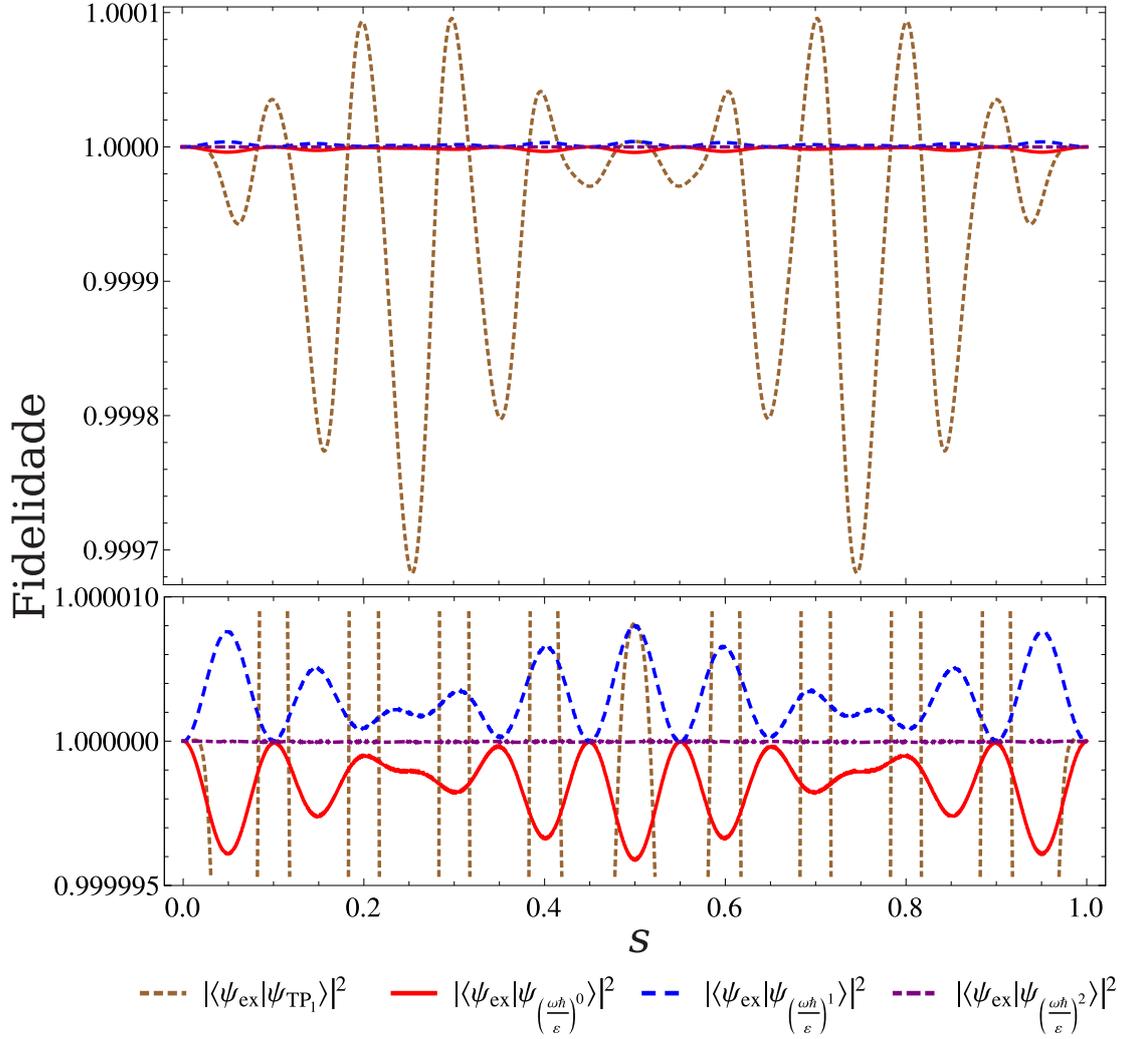


Figura 4.8: Fidelidade. Gráficos obtidos através da teoria de perturbação dependente do tempo, equação (3.19), da teoria da perturbação adiabática, equações (3.41), (3.46) e (3.47), e da função de onda numérica, equação (3.4), com  $\alpha = 1$ ,  $\omega = 0.1$ , de modo que  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.1$ , e  $\lambda = 0.01$ . No gráfico principal, vemos claramente que a teoria da perturbação adiabática possui fidelidade mais próxima a 1. No detalhe,  $|\langle \psi_{\text{ex}}(s) | \psi_{(\frac{\omega\hbar}{\alpha})^2}(s) \rangle|^2$  possui a fidelidade mais próxima de 1 que as outras ordens da teoria adiabática.

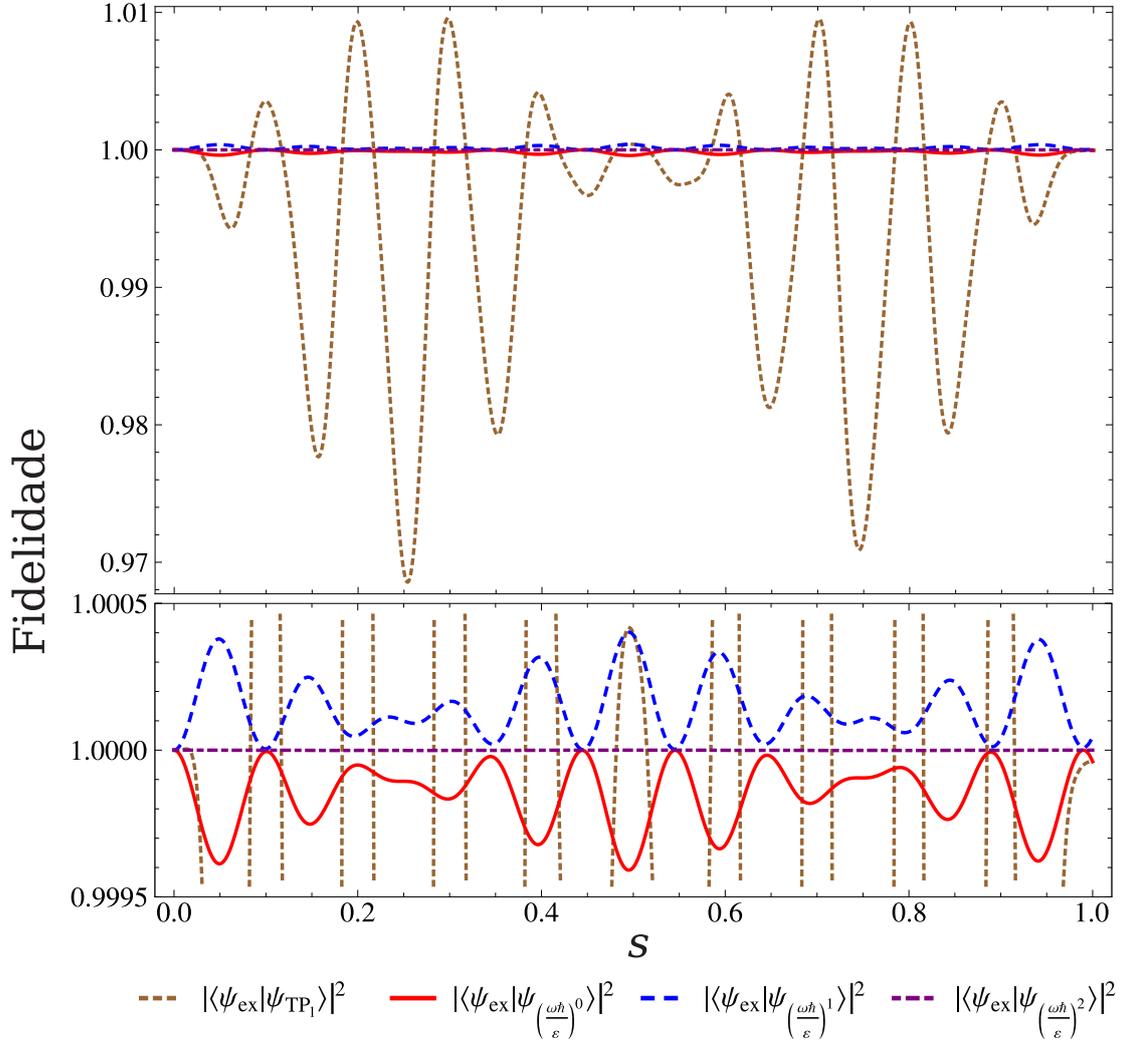


Figura 4.9: Fidelidade. Gráficos obtidos através da teoria de perturbação dependente do tempo, equação (3.19), da teoria da perturbação adiabática, equações (3.41), (3.46) e (3.47), e da função de onda numérica, equação (3.4), com  $\alpha = 1$ ,  $\omega = 0.1$ , de modo que  $\frac{\omega\hbar}{\alpha} = 0.1$ , e  $\lambda = 0.1$ . No gráfico principal, vemos claramente que a teoria da perturbação adiabática possui fidelidade mais próxima a 1. No detalhe,  $|\langle \psi_{\text{ex}}(s) | \psi_{(\frac{\omega\hbar}{\alpha})^2}(s) \rangle|^2$  possui a fidelidade mais próxima de 1 que as outras ordens da teoria adiabática.

# Capítulo 5

## Hamiltoniana de Landau-Zener

### O problema de Landau-Zener

O modelo padrão de Landau-Zener consiste em um sistema ideal de dois níveis de energia, cujos níveis se aproximam a uma velocidade constante  $\nu$  e são acoplados por uma constante de tunelamento  $\Delta$ . Apesar de ser um problema ideal ele foi amplamente empregado e estudado em diversas áreas como, por exemplo, no estudo de inversão de spins por campo magnéticos [18], sistemas ópticos [19], controle de reações químicas [20] e outros exemplos citados em [21].

A Hamiltoniana do modelo de Landau-Zener pode ser representada da seguinte forma,

$$\mathbf{H}_{LZ}(t) = \frac{\nu t}{2}\sigma_z + \frac{\Delta}{2}\sigma_x. \quad (5.1)$$

Apesar de aparentemente ser um sistema simples sua solução não é trivial. As primeiras soluções foram obtidas por Landau [22], Zener [23], Stuckelberg [24] e Majorana [25]. Os artigos de Landau e Zener encontraram independentemente a probabilidade de transição no limite assintótico do tempo, sendo esta nomeada de probabilidade de Landau-Zener,

$$\mathcal{P}_{LZ} = 1 - e^{-\frac{\pi}{2} \frac{\Delta^2}{\hbar\nu}}. \quad (5.2)$$

$\mathcal{P}_{LZ}$  dá a probabilidade de se encontrar a partícula no estado  $|\downarrow\rangle$ , considerando que a partícula no instante inicial seja preparada da seguinte forma

$$|\Psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle. \quad (5.3)$$

A Hamiltoniana de Landau-Zener é conhecida por evitar um cruzamento de níveis de

energia para todo tempo  $t$  se  $\Delta \neq 0$ . Nessa situação poderá ocorrer transição entre os níveis de energia já que o estado  $|\uparrow\rangle$  não é autoestado de (5.1). No limite quando  $|t| \gg \frac{\Delta}{\nu}$  os autoestados da Hamiltoniana tendem aos estados  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  já que a parte  $\frac{\Delta}{2}\sigma_x$  torna-se desprezível. Em outras palavras, para que tenhamos uma transição efetiva de nível a relação  $\frac{\nu t}{\Delta} \gg 1$  deve ser satisfeita, caso contrário o sistema ficará oscilando entre os dois níveis.

O modelo de Landau-Zener apresenta inúmeras soluções publicadas além das quatro inicialmente citadas. Nesta dissertação escolhemos três artigos para analisar e estudar em detalhes. Primeiramente estudamos o artigo de Zener [23], que foi uns dos pioneiros que obtiveram uma solução da probabilidade de transição no limite assintótico. O segundo estudado foi o artigo de Ho e Chibotaru [26] que apresenta uma solução elegante utilizando integrais complexas para obter a probabilidade de transição para tempos infinitos, método baseado na solução desenvolvida por Wittig [27]. Ambas soluções podem ser vistas nos apêndices A.1 e A.2, onde detalhamos todos os passos matemáticos para encontrar tais soluções.

Nesta dissertação optamos trabalhar mais intensamente com a solução obtida por Vitanov e Garraway [28], porque ele apresenta uma solução analítica para o problema considerando tempos finitos diferindo dos demais que se valem do limite assintótico para obter uma solução.

Nossa necessidade de uma solução analítica está no fato de querer compará-la com a solução da Hamiltoniana de Landau-Zener obtida pela teoria da perturbação dependente do tempo, seção 5.2, e com a solução calculada através da teoria da perturbação adiabática, seção 5.3, de tal forma a averiguar qual delas mais se aproxima da solução exata obtida na seção 5.1 através das técnicas apresentadas por Vitanov e Garraway [28].

Além da solução exata apresentada também calculamos a solução adiabática na subseção 5.1.1 de modo a compará-la com a ordem zero da teoria da perturbação adiabática.

## 5.1 Solução analítica da Hamiltoniana de Landau-Zener

Para resolver analiticamente o problema de Landau-Zener escrevemos a Hamiltoniana (5.1) na base que diagonaliza  $\sigma_z$ , isto é, na base  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ . Desse modo a Hamiltoniana de Landau-Zener pode ser representada na seguinte forma

$$\mathbf{H}_{LZ}(t) = \frac{\nu t}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) + \frac{\Delta}{2} (|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|). \quad (5.4)$$

A teoria da perturbação padrão e a teoria da perturbação adiabática, apresentadas nas subseções 2.1 e 2.2 respectivamente, foram desenvolvidas considerando o tempo  $t \geq 0$ . Já a Hamiltoniana de Landau-Zener  $\mathbf{H}_{LZ}(t)$  considera  $-\infty < t < \infty$ . Sendo assim, para aplicarmos ambas teorias de perturbação devemos transladar o tempo na Hamiltoniana de Landau-Zener.

Considerando que o tempo  $t$  de  $\mathbf{H}_{LZ}(t)$  varie de  $-\tau$  a  $\tau$ , para que a Hamiltoniana fique no intervalo de tempo delimitado pelas teorias perturbativas, devemos definir  $t = t' - \tau$  com  $t' \in [0, 2\tau]$ . Com isso a reescala do tempo realizada na teoria da perturbação adiabática na subseção 2.2 será  $s = vt'$ , onde  $v$  é o inverso do tempo necessário para a Hamiltoniana ir de sua configuração inicial a sua configuração final, isto é,  $v = \frac{1}{2\tau}$ . Com essa escolha  $s \in [0, 1]$ , obtemos uma reescala do tempo com  $s$  adimensional, facilitando a solução analítica do problema de Landau-Zener proposta por Vitanov e Garraway em [28]. Dessa forma  $t = (2s - 1)\tau$  e aplicando a reescala do tempo em (5.4) obtemos

$$\mathbf{H}_{LZ}(s) = \frac{\nu\tau(2s-1)}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) + \frac{\Delta}{2} (|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|). \quad (5.5)$$

A equação de Schrödinger dependente do tempo reescalado é

$$\frac{i\hbar}{2\tau} \frac{d}{ds} |\Psi_{LZ}(s)\rangle = \mathbf{H}_{LZ}(s) |\Psi_{LZ}(s)\rangle, \quad (5.6)$$

onde  $\frac{d}{dt} = \frac{1}{2\tau} \frac{d}{ds}$ . A função de onda solução da equação (5.6) pode ser expandida também na base de  $\sigma_z$ :

$$|\Psi_{LZ}(s)\rangle = c_{\uparrow}(s)|\uparrow\rangle + c_{\downarrow}(s)|\downarrow\rangle. \quad (5.7)$$

Substituindo a função de onda (5.7) na equação de Schrödinger reescalada (5.6) encontramos o sistema de equações diferenciais lineares acopladas

$$\begin{cases} i\dot{c}_{\uparrow}(s) &= \rho(s)c_{\uparrow}(s) + \delta c_{\downarrow}(s), \\ i\dot{c}_{\downarrow}(s) &= \delta c_{\uparrow}(s) - \rho(s)c_{\downarrow}(s). \end{cases} \quad (5.8)$$

Aqui o ponto significa  $\frac{d}{ds}$  e

$$\rho(s) = \frac{\beta^2}{\epsilon}(2s-1), \quad (5.9)$$

$$\delta = \frac{\beta}{\epsilon}, \quad (5.10)$$

com

$$\epsilon = \frac{\hbar\nu}{\Delta^2}, \quad (5.11)$$

$$\beta = \frac{\nu\tau}{\Delta}. \quad (5.12)$$

Eliminamos o acoplamento derivando novamente em relação a  $s$  a primeira linha da equação (5.8) e substituindo as derivadas primeiras,

$$\ddot{c}_\uparrow(s) + [\rho(s)^2 + \delta^2 + i\dot{\rho}(s)] c_\uparrow(s) = 0. \quad (5.13)$$

Substituindo (5.9) e (5.10) na equação (5.13) encontramos a nova equação diferencial de segunda ordem:

$$\ddot{c}_\uparrow(s) + \frac{4i\beta^2}{\epsilon} \left[ -\frac{i}{4\epsilon} + \frac{1}{2} - \frac{i(-1+2s)^2\beta^2}{4\epsilon} \right] c_\uparrow(s) = 0. \quad (5.14)$$

A equação (5.14) pode ser reescrita como equação de Weber [29, 30], discutida no Apêndice B se realizarmos uma nova mudança de variável

$$z^2 = \frac{i(-1+2s)^2\beta^2}{\epsilon}, \quad (5.15)$$

tal que

$$z = \pm(-1+2s)\beta\sqrt{\frac{i}{\epsilon}}. \quad (5.16)$$

Realizando a mudança de variável de  $s$  para  $z$  e tendo em mente que  $\frac{d}{ds} = \mp 2\beta\sqrt{\frac{i}{\epsilon}} \frac{d}{dz} \Rightarrow \frac{d^2}{ds^2} = \frac{4i\beta^2}{\epsilon} \frac{d^2}{dz^2}$  obtemos

$$\frac{d^2}{dz^2} c_\uparrow(z) + \left[ -\frac{i}{4\epsilon} + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4} \right] c_\uparrow(z) = 0. \quad (5.17)$$

Agora, a função de Weber-Hermite, mais comumente conhecida por funções parabólicas cilíndricas, satisfaz a equação diferencial

$$\frac{d^2}{dz^2} D_j(z) + \left[ j + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4} \right] D_j(z) = 0. \quad (5.18)$$

Assim, podemos afirmar que  $c_\uparrow(s)$  nada mais é que  $D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(\pm(1-2s)\beta\sqrt{\frac{i}{\epsilon}})$ .

As funções parabólicas cilíndricas possuem a propriedade de que se  $D_j(w)$  é solução,  $D_j(-w)$ ,  $D_{-j-1}(iw)$  e  $D_{-j-1}(-iw)$  também o são e podemos escrever  $D_j(w)$  como combinação destas funções [29]. No nosso caso, a variável  $z$  pode ser escrita como uma função positiva ou negativa de  $s$ . Portanto é plausível supor que a solução da nossa equação diferencial (5.14) é uma combinação linear de  $+z$  e  $-z$ . Assim, escolhendo  $z = (2s - 1) \frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}}$  podemos escrever que  $c_{\uparrow}(s)$  é

$$c_{\uparrow}(s) = a D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(z) + b D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(-z), \quad (5.19)$$

$$z = (2s - 1) \frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}}, \quad (5.20)$$

onde  $a$  e  $b$  são constantes que podem ser encontradas utilizando as condições iniciais do sistema e para isso precisamos também conhecer o coeficiente  $c_{\downarrow}(s)$ . Esse coeficiente pode ser encontrado substituindo (5.9) e (5.19) no conjunto de equações (5.8) e aplicar a relação B.6 na primeira linha do sistema. Os detalhes desses cálculos estão na seção C.2. Assim, os coeficientes são

$$\begin{aligned} c_{\uparrow}(s) &= a D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(z) + b D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(-z), \\ c_{\downarrow}(s) &= \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} \left[ a D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(z) - b D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(-z) \right], \\ z &= (2s - 1) \frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

As constantes  $a$  e  $b$ , definidas através das condições iniciais  $c_{\uparrow}(0)$  e  $c_{\downarrow}(0)$ , são

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\Gamma(1 + \frac{i}{4\epsilon})}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}\left(\frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}}\right) & 2\sqrt{\epsilon} e^{\frac{-i\pi}{4}} D_{-\frac{i}{4\epsilon}}\left(\frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}}\right) \\ D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}\left(-\frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}}\right) & -2\sqrt{\epsilon} e^{\frac{-i\pi}{4}} D_{-\frac{i}{4\epsilon}}\left(-\frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\uparrow}(0) \\ c_{\downarrow}(0) \end{pmatrix}. \quad (5.22)$$

As contas que nos levaram a obter (5.22) estão no apêndice C.3 e  $\Gamma(x)$  é a função gama. Com isso temos a solução analítica do problema de Landau-Zener apresentando por Vitanov e Garraway no artigo [28] adaptada para nosso modelo de Hamiltoniana (5.1). E no nosso caso vamos definir que no tempo  $s = 0$  a função de onda está preparada no estado  $|\uparrow\rangle$ , isto é,  $|\Psi_{LZ}(0)\rangle = |\uparrow\rangle$ . Portanto os coeficientes de  $|\Psi_{LZ}(s)\rangle$  são

$$c_{\uparrow}(s) = \frac{\Gamma(1 + \frac{i}{4\epsilon})}{\sqrt{2\pi}} \left[ D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1} \left( \frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}} \right) D_{-\frac{i}{4\epsilon}} \left( \frac{(2s-1)\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}} \right) \right. \\ \left. + D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1} \left( -\frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}} \right) D_{-\frac{i}{4\epsilon}} \left( -\frac{(2s-1)\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}} \right) \right], \quad (5.23)$$

$$c_{\downarrow}(s) = \frac{\Gamma(1 + \frac{i}{4\epsilon})e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \left[ D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1} \left( \frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}} \right) D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1} \left( \frac{(2s-1)\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}} \right) \right. \\ \left. - D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1} \left( -\frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}} \right) D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1} \left( -\frac{(2s-1)\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}} \right) \right]. \quad (5.24)$$

### 5.1.1 Solução aproximada do modelo de Landau-Zener no regime adiabático

Estudamos essa solução pois a teoria da perturbação adiabática considera a ordem zero como a aproximação adiabática e queremos compará-la com a solução adiabática obtida por Vitanov e Garraway [28].

A solução adiabática consiste em transformar a Hamiltoniana de Landau-Zener (5.1) por uma rotação  $\mathbf{R}(s)$  unitária,

$$\begin{pmatrix} c_{\uparrow}(s) \\ c_{\downarrow}(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta(s)) & -\sin(\theta(s)) \\ \sin(\theta(s)) & \cos(\theta(s)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0(s) \\ x_1(s) \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

A equação de Schrödinger 5.6 pode ser escrita na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} i\dot{c}_{\uparrow}(s) \\ i\dot{c}_{\downarrow}(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho(s) & \delta \\ \delta & -\rho(s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\uparrow}(s) \\ c_{\downarrow}(s) \end{pmatrix} \quad (5.26)$$

com  $\rho(s)$  e  $\delta$  dados por (5.9) e (5.10).

Substituindo a equação (5.25) na equação de Schrödinger matricial (5.26) e multiplicando ambos os lados pela inversa da rotação encontramos

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 0 & -i\dot{\theta}(s) \\ i\dot{\theta}(s) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0(s) \\ x_1(s) \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} \dot{x}_0(s) \\ \dot{x}_1(s) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \delta \sin(2\theta(s)) + \rho(s) \cos(2\theta(s)) & \delta \cos(2\theta(s)) - \rho(s) \sin(2\theta(s)) \\ \delta \cos(2\theta(s)) - \rho(s) \sin(2\theta(s)) & -\delta \sin(2\theta(s)) - \rho(s) \cos(2\theta(s)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0(s) \\ x_1(s) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Nosso objetivo é escolher  $\theta(s)$  de modo a eliminar o acoplamento entre as variáveis. Para isso acontecer devemos zerar os elementos fora da diagonal da matriz do lado direito da equação, isto é, definir  $\delta \cos(2\theta(s)) - \rho(s) \sin(2\theta(s)) = 0$ . Dessa forma estabelecemos três relações importantes,

$$\begin{aligned} \theta(s) &= \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{\delta}{\rho(s)} \right), \\ \sin(2\theta(s)) &= \frac{\delta}{\rho(s)} \cos(2\theta(s)), \\ \cos(2\theta(s)) &= \frac{\rho(s)}{\sqrt{\delta^2 + \rho(s)^2}}. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Aplicando a relação (5.28) em (5.27) obtemos

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_0(s) \\ \dot{x}_1(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\sqrt{\delta^2 + \rho(s)^2} & \dot{\theta}(s) \\ -\dot{\theta}(s) & i\sqrt{\delta^2 + \rho(s)^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0(s) \\ x_1(s) \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

O teorema da evolução adiabática de um sistema diz que um sistema evoluiu adiabaticamente se ele permanece no mesmo estado adiabático inicial [1] e isso pode ocorrer com alta probabilidade se os elementos fora da diagonal forem muito menores em relação aos da diagonal principal, ou seja, se  $|\dot{\theta}(s)| \ll |\sqrt{\delta^2 + \rho(s)^2}|$ . Substituindo  $\theta(s)$ ,  $\rho(s)$  e  $\delta$  pelas equações (5.28), (5.9) e (5.10) encontramos a condição para que a aproximação adiabática seja válida,

$$\frac{\epsilon}{(1 + (2s - 1)^2 \beta^2)^{\frac{3}{2}}} \ll 1. \quad (5.30)$$

Considerando que a condição anterior seja satisfeita e utilizando (5.9) podemos aproximar (5.29) da seguinte forma,

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_0(s) \\ \dot{x}_1(s) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} -i\frac{\beta}{\epsilon}\sqrt{1+(2s-1)^2\beta^2} & 0 \\ 0 & i\frac{\beta}{\epsilon}\sqrt{1+(2s-1)^2\beta^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0(s) \\ x_1(s) \end{pmatrix}, \quad (5.31)$$

que nada mais é que uma equação diferencial linear de primeira ordem, cuja solução pode ser escrita como

$$\begin{pmatrix} x_0(s) \\ x_1(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\zeta(s)} & 0 \\ 0 & e^{i\zeta(s)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0(0) \\ x_1(0) \end{pmatrix}, \quad (5.32)$$

com  $\zeta(s) = \int_0^s \frac{\beta}{\epsilon} \sqrt{1+(2s-1)^2\beta^2}$ .

Podemos escrever a equação (5.32) de volta em termo dos os coeficientes  $c_{\uparrow}(s)$  e  $c_{\downarrow}(s)$  através da inversa de (5.25). Para isso consideramos as condições iniciais  $c_{\uparrow}(0) = 1$  e  $c_{\downarrow}(0) = 0$  e substituímos  $\theta(s)$ ,  $\rho(s)$  e  $\delta$  pelas equações (5.28) e (5.9) obtendo os coeficientes adiabáticos da Hamiltoniana de Landau-Zener,

$$\begin{aligned} c_{\uparrow ad}i(s) = e^{-i\zeta(s)} \cos \left[ \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{1}{\beta} \right) \right] \cos \left[ \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{1}{(2s-1)\beta} \right) \right] \\ - e^{i\zeta(s)} \sin \left[ \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{1}{\beta} \right) \right] \sin \left[ \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{1}{(2s-1)\beta} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} c_{\downarrow ad}i(s) = e^{i\zeta(s)} \sin \left[ \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{1}{\beta} \right) \right] \cos \left[ \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{1}{(2s-1)\beta} \right) \right] \\ + e^{-i\zeta(s)} \cos \left[ \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{1}{\beta} \right) \right] \sin \left[ \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{1}{(2s-1)\beta} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.34)$$

onde

$$\zeta(s) = -\frac{\beta\sqrt{1+\beta^2} + (2s-1)\beta\sqrt{1+(2s-1)^2\beta^2} + \operatorname{arcsinh}(\beta) + \operatorname{arcsinh}((2s-1)\beta)}{4\epsilon}. \quad (5.35)$$

### Probabilidade de transição adiabática

Nosso sistema representado pela Hamiltoniana de Landau-Zener possui o estado inicial  $|\uparrow\rangle$ , isto é, a função de onda para o tempo  $s = 0$  é  $|\Psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$ . Lembrando que  $s = vt$  pertence ao intervalo real de  $[0, 1]$ , com  $v$  sendo o inverso do tempo total do experimento,

calculamos na seção anterior a função de onda adiabática para todo tempo  $s$ , de tal forma que a partir dela podemos obter resultados interessantes como a probabilidade de transição.

Como visto na subseção 2.3.1, a probabilidade de encontrarmos o sistema em um determinado estado é calculado tomando o produto interno da função de onda adiabática pelo estado de interesse. No nosso caso em específico queremos a probabilidade de transição que é obtida através de  $|\langle \downarrow | \Psi_{adi}(s) \rangle|^2 = c_{\downarrow adi}(s) \cdot c_{\downarrow adi}^*(s)$ . Definindo  $\mathcal{P}_{adi}(s)$  como a probabilidade de transição adiabática no tempo  $s$  temos

$$\mathcal{P}_{adi}(s) = \frac{1}{2} + \frac{(2s-1)\beta - \cos(2\zeta(s))}{2\sqrt{1+\beta^2}\sqrt{1+(2s-1)^2\beta^2}}. \quad (5.36)$$

A equação (5.36) foi obtida empregando as relações da equação (5.28). Outro aspecto importante de se observar é a probabilidade de transição para tempos muito grandes, isto é, em  $s = 1$  ( $\tau \rightarrow \infty$ ), que é a expansão que Landau e Zener apresentaram como solução da Hamiltoniana de Landau-Zener.

Expandir  $\mathcal{P}_{adi}(1)$  em  $\tau \rightarrow \infty$  é o mesmo que expandir em  $\beta \rightarrow \infty$  pois  $\beta$  e  $\tau$  apresentam dependência linear (veja a equação (5.12)). Outro fator a se considerar na expansão é o argumento do cosseno,  $\zeta(1) = -\frac{\beta\sqrt{1+\beta^2+\text{arcsinh}(\beta)}}{2\epsilon}$ , que depende de beta. Como a função cosseno é limitada entre  $-1$  e  $1$  podemos ignorá-la já que o denominador do cosseno na equação (5.36) leva o termo a zero quando beta tende a infinito. Portanto, expandindo a probabilidade em série de Taylor e ignorando a expansão do cosseno obtemos

$$\mathcal{P}_{\beta adi}(\beta) = 1 - \frac{\frac{1}{2}[1 + \cos(2\zeta(1))]}{\beta^2} + \frac{\frac{1}{2}[1 + \cos(2\zeta(1))]}{\beta^4}, \quad \text{com } \beta \gg 1. \quad (5.37)$$

### 5.1.2 Análise dos Resultados

Com base no artigo [28] conseguimos resolver analiticamente o modelo de Landau-Zener utilizando os parâmetros usados no nosso estudo, onde conseguimos reproduzir e compreender todos os cálculos necessários para que alcançássemos a solução da função de onda analítica do problema usando os coeficientes (5.23) e (5.24). Também calculamos, valendo-nos do artigo [28], a função de onda adiabática que possui os coeficientes (5.34) e (5.33) e a probabilidade de transição adiabática (5.36).

Para que a aproximação adiabática seja uma boa aproximação do resultado exato a condição (5.30) deve ser satisfeita. Assim, para que ela seja válida  $\epsilon$  deve ser pequeno e/ou  $\beta \gg 1$ .

O artigo [28] supracitado também contém outras expansões além da adiabática que, diferentemente dessa, recobram a probabilidade de Landau-Zener (5.2), já que a expansão adiabática para tempos muito grande,  $\beta \rightarrow \infty$ , tende a 1, como pode ser visto pela equação (5.37). O uso dessa aproximação é benéfica para explicar o que ocorre no limite da probabilidade de transição calculadas na seção 5.3 e poderá ser melhor compreendido na análise na subseção 5.3.3.

## 5.2 Solução do modelo de Landau-Zener através da teoria da perturbação dependente do tempo

A Hamiltoniana de Landau-Zener (5.1) possui um termo dependente do tempo e um independente, e isso atende ao principal pré-requisito para que teoria da perturbação dependente do tempo [5] apresentada na seção 2.1 possa ser aplicada. Podemos ver pela equação (5.1) que a parte independente do tempo é a que multiplica  $\sigma_x$ . Logo, nosso conjunto de soluções será expandido nessa base que definiremos como  $\{|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle\}$ , para ficar em concordância com a seção 2.1.

Calculando os autoestados de  $\sigma_x$  encontramos

$$\begin{aligned} |\phi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \\ |\phi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle), \end{aligned} \quad (5.38)$$

com autoenergias sendo

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= \frac{\Delta}{2}, \\ \varepsilon_1 &= -\frac{\Delta}{2}. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Na base de  $\sigma_x$  a Hamiltoniana de Landau-Zener transladada para  $t \rightarrow t - \tau$  torna-se

$$\mathbf{H}_{LZ}(t) = \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} + \nu \begin{pmatrix} \frac{t-\tau}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{t-\tau}{2} \end{pmatrix}, \quad \text{com } t \in [0, 2\tau]. \quad (5.40)$$

Podemos ver claramente que a Hamiltoniana (5.40) possui o mesmo padrão de (2.1). Assim, definimos o termo sem dependência explícita do tempo como  $\mathbf{H}_0$ ,  $\nu$  o termo per-

turbativo pequeno e  $\mathbf{V}(t)$  a perturbação temporal. Contudo, a parte temporal da Hamiltoniana para  $\nu\tau \gg \Delta$  deixará de ser pequena.

As frequências angulares de Bohr (2.9) são

$$\begin{aligned}\omega_{01} &= \frac{\Delta}{\hbar}, \\ \omega_{10} &= -\omega_{01}.\end{aligned}\tag{5.41}$$

As condições iniciais que estabelecemos para o problema (5.3) na base dos autoestados de  $\mathbf{H}_0$  nos permite obter os coeficientes de ordem zero da perturbação dependente do tempo, equação (2.16), como

$$\begin{aligned}b_0^{(0)}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ b_1^{(0)}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}.\end{aligned}\tag{5.42}$$

As demais ordens podem ser obtidas utilizando a relação de recorrência (2.12), onde substituímos  $\omega_{nk}$  e  $b_0^{(0)}(t)$  pelas equações (5.41) e (5.42) e  $V_{nk}(t)$  pelos elementos de matriz da parte dependente do tempo:  $V_{00}(t) = V_{11}(t) = 0$  e  $V_{01}(t) = V_{10}(t) = \frac{t-\tau}{2}$ . Dessa forma temos

$$\begin{aligned}i\hbar \dot{b}_0^{(1)}(t) &= \frac{(t-\tau)e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}}}{2\sqrt{2}}, \\ i\hbar \dot{b}_1^{(1)}(t) &= \frac{(t-\tau)e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}}}{2\sqrt{2}}.\end{aligned}\tag{5.43}$$

Integrando e simplificando a equação acima obtemos os coeficientes de primeira ordem,

$$\begin{aligned}b_0^{(1)}(t) &= -\frac{e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}} \left( \Delta t + \left(1 - e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}}\right) (i\hbar - \Delta\tau) \right)}{2\sqrt{2}\Delta^2}, \\ b_1^{(1)}(t) &= \frac{e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}} \left( \Delta t - \left(1 - e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}}\right) (i\hbar + \Delta\tau) \right)}{2\sqrt{2}\Delta^2}.\end{aligned}\tag{5.44}$$

Aplicando equação (2.34), (2.35) e (5.39) em (2.13) até  $j = 1$  verificamos que

$$\begin{aligned}|\bar{\Psi}(t)\rangle_1 &= \left( \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\nu e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}} \left( \Delta t + (-\Delta\tau + i\hbar) \left(1 - e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}}\right) \right)}{2\sqrt{2}\Delta^2} \right) e^{-i\frac{\Delta t}{2\hbar}} |\phi_0\rangle \\ &+ \left( \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\nu e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}} \left( \Delta t + (\Delta\tau + i\hbar) \left(-1 + e^{i\frac{\Delta t}{\hbar}}\right) \right)}{2\sqrt{2}\Delta^2} \right) e^{+i\frac{\Delta t}{2\hbar}} |\phi_1\rangle.\end{aligned}\tag{5.45}$$

### 5.2.1 Normalização

Normalizando a função de onda (5.45), que é a solução perturbativa até primeira ordem, encontramos

$$N_1 = \frac{1}{\sqrt{1 + \nu^2 \left( \frac{\hbar^2(1 - \cos(\frac{\Delta t}{\hbar}))}{2\Delta^4} - \frac{t\hbar \sin(\frac{\Delta t}{\hbar})}{2\Delta^3} + \frac{\tau^2 + 2\tau(t - \tau) \cos(\frac{\Delta t}{\hbar}) + (t - \tau)^2}{4\Delta^2} \right)}}. \quad (5.46)$$

Expandindo a normalização para  $\nu \ll 1$  obtemos

$$N_1 \approx 1 - \frac{1}{2}\nu^2 \left( \frac{\hbar^2 \sin^2\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right)}{\Delta^4} - \frac{t\hbar \sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)}{2\Delta^3} + \frac{\tau^2 + 2\tau(t - \tau) \cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) + (t - \tau)^2}{4\Delta^2} \right) + \mathcal{O}(\nu^3). \quad (5.47)$$

Como feito para a Hamiltoniana limitada, há duas formas de considerarmos essa normalização. Mantendo termos até a primeira e segunda ordem de  $\nu$  da expansão da normalização temos

$$\begin{aligned} N_{\nu^1} &= 1, \\ N_{\nu^2} &= 1 - \frac{1}{2}\nu^2 \left( \frac{\hbar^2 \sin^2\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right)}{\Delta^4} - \frac{t\hbar \sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)}{2\Delta^3} + \frac{\tau^2 + 2\tau(t - \tau) \cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) + (t - \tau)^2}{4\Delta^2} \right). \end{aligned} \quad (5.48)$$

Com as duas normalizações possíveis escrevemos duas funções de onda na base de  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  normalizada,  $|\Psi_{TP\nu}(t)\rangle$  e  $|\Psi_{TP\nu^2}(t)\rangle$ . Para isso substituímos na equação (2.44) as equações (5.38, 2.19) juntamente com a normalização (5.48). Com isso obtemos

$$\begin{aligned} |\Psi_{TP\nu}(t)\rangle &= \left[ \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) - \frac{i\nu(t - 2\tau) \sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right)}{2\Delta} \right] |\uparrow\rangle \\ &+ \left[ -i \sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) + \frac{\nu\left(2\hbar \sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) - \Delta t \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right)\right)}{2\Delta^2} \right] |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (5.49)$$

e, para a função expandida até ordem dois de  $\nu$ ,

$$|\Psi_{TP\nu^2}(t)\rangle = \left[ \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) - \nu \frac{i(t-2\tau) \sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right)}{2\Delta} - \nu^2 \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) F(t) \right] |\uparrow\rangle \\ + \left[ -i \sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) + \nu \frac{(16\hbar \sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) - 8\Delta t \cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right))}{16\Delta^2} + i\nu^2 \sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) F(t) \right] |\downarrow\rangle, \quad (5.50)$$

onde

$$F(t) = \frac{\Delta^2\tau^2 + 2(\Delta^2\tau(t-\tau) - \hbar^2) \cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) + \Delta^2(t-\tau)^2 - 2\Delta t\hbar \sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) + 2\hbar^2}{8\Delta^4}. \quad (5.51)$$

A solução exata da Hamiltoniana apresentada na seção 5.1 e na subseção 5.1.1 foi feita nos parâmetros  $\beta$ , equação (5.12),  $\epsilon$ , equação (5.11), e na variável  $s = vt = \frac{t}{2\tau}$ . Para manter o mesmo padrão iremos reescrever as funções (5.49) e (5.50) em termos desses parâmetros:

$$|\Psi_{TP\nu}(s)\rangle = \left[ \cos\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) - i\beta(s-1) \sin\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) \right] |\uparrow\rangle \\ + \left[ (\epsilon - i) \sin\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) - \beta s \cos\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) \right] |\downarrow\rangle, \quad (5.52)$$

$$|\Psi_{TP\nu^2}(s)\rangle = \left[ \cos\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) - i\beta(s-1) \sin\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) - \cos\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) F_\beta(s) \right] |\uparrow\rangle \\ + \left[ (\epsilon - i) \sin\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) - \beta s \cos\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) + i \sin\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) F_\beta(s) \right] |\downarrow\rangle, \quad (5.53)$$

onde

$$F_\beta(s) = \frac{1}{4} \left( (\beta^2(2s-1) - \epsilon^2) \cos\left(\frac{2\beta s}{\epsilon}\right) + \beta^2(2(s-1)s+1) - 2\beta s\epsilon \sin\left(\frac{2\beta s}{\epsilon}\right) + \epsilon^2 \right). \quad (5.54)$$

## 5.2.2 Probabilidade de Transição

Nós temos duas funções de onda provenientes da teoria da perturbação dependente do tempo. Uma considera a expansão da normalização até  $\nu$ , equação (5.49), e a seguinte considera expansão até  $\nu^2$ , equação (5.50).

Lembrando que  $\epsilon = \frac{\hbar\nu}{\Delta^2}$  e  $\beta = \frac{\nu\tau}{\Delta}$ , a probabilidade de transição, equação (2.43), obtida

via equação (5.49) é

$$\mathcal{P}_\nu(s) = \sin^2\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) + \mathcal{O}(\nu^2). \quad (5.55)$$

Agora, utilizando (5.50) temos

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\nu^2}(s) = \sin^2\left(\frac{\beta s}{\epsilon}\right) + \frac{\beta^2}{4} & \left( -\frac{\epsilon \sin\left(\frac{2\beta s}{\epsilon}\right)}{\beta} + (2s-1) \cos\left(\frac{2\beta s}{\epsilon}\right) + 1 \right) \\ & \times \left( -\frac{\epsilon \sin\left(\frac{2\beta s}{\epsilon}\right)}{\beta} + \cos\left(\frac{2\beta s}{\epsilon}\right) + (2s-1) \right) + \mathcal{O}(\nu^3). \end{aligned} \quad (5.56)$$

### 5.2.3 Análise dos Resultados

Foi discutido no começo da seção 5.2 que para a perturbação dependente do tempo funcionasse  $\nu\tau \ll \Delta$ , que é equivalente  $\beta \ll 1$  (veja (5.12)). Logo, essa teoria só pode ser considerada uma boa aproximação da solução se  $\beta$  for muito pequeno.

Assim, para  $\beta$  pequeno as probabilidades (5.55) e (5.56) são válidas e a probabilidade considerando termos até  $\mathcal{O}(\nu^2)$  é uma correção da probabilidade considerando termos até  $\mathcal{O}(\nu^1)$ . Note estas probabilidades podem ser escritas

$$\mathcal{P}_{\nu^2}(t) = \mathcal{P}_{\nu^1}(t) + \frac{\beta^2}{4} B(s)$$

onde  $B(s)$  é o termo que multiplica  $\frac{\beta^2}{4}$  em (5.56).

Na seção 5 discutimos que para que possamos encontrar o sistema no estado  $|\downarrow\rangle$ , isto é, para que ocorra uma transição entre os níveis de energia,  $\beta$  tem que ser muito maior que um. No entanto, a teoria da perturbação dependente do tempo não é válida nesse regime e portanto também não podemos realizar a expansão feita na subseção 5.1.1, que considera  $\beta \rightarrow \infty$ . Sendo assim, pela teoria da perturbação dependente do tempo não é possível se obter a probabilidade de transição de Landau-Zener (5.2).

### 5.3 Solução do modelo de Landau-Zener pela teoria de perturbação adiabática

A teoria da perturbação adiabática é uma expansão da função de onda em termos de  $v$ , equação (2.18), onde  $v$  é o inverso do tempo total para Hamiltoniana ir da sua configuração inicial à final. No nosso caso  $v = \frac{1}{2\tau}$ , já que fizemos uma reescala da Hamiltoniana de Landau-Zener, onde  $t = t' - \tau$  que, em termos de  $s$  vale,  $t = (2s - 1)\tau$  (veja seção 5.1).

A teoria da perturbação adiabática utiliza a equação de Schrödinger reescalada como dinâmica que rege o problema, equação (5.6), e a Hamiltoniana reescrita usando os parâmetros  $\beta$  e  $\epsilon$  definidos na seção 5.1:

$$\mathbf{H}_{LZ}(s) = \frac{\nu\tau}{2} \left[ (2s - 1)(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) + \frac{1}{\beta} (|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|) \right]. \quad (5.57)$$

Para simplificar expressões que surgirão daqui em diante definiremos a função  $h(s)$  como

$$h(s) = \sqrt{1 + (2s - 1)^2\beta^2}. \quad (5.58)$$

A partir da Hamiltoniana (5.57) escrevemos as autoenergias  $E_0(s)$  e  $E_1(s)$  e os autoestados instantâneos normalizados  $|0(s)\rangle$  e  $|1(s)\rangle$ :

$$\begin{aligned} E_0(s) &= -\frac{1}{2}\Delta h(s), \\ E_1(s) &= \frac{1}{2}\Delta h(s), \end{aligned} \quad (5.59)$$

$$\begin{aligned} |0(s)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}\sqrt{h(s) - \beta(2s - 1)}} \left[ (\beta(2s - 1) - h(s))|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \right], \\ |1(s)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}\sqrt{h(s) + \beta(2s - 1)}} \left[ (\beta(2s - 1) + h(s))|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \right]. \end{aligned} \quad (5.60)$$

Com as equações dos autoestados (5.60) da Hamiltoniana de Landau-Zener podemos determinar os  $M_{nm}(s)$  através da equação (2.25):

$$\begin{aligned}
M_{00}(s) &= 0, \\
M_{11}(s) &= 0, \\
M_{01}(s) &= -\frac{\beta}{h(s)^2}, \\
M_{10}(s) &= \frac{\beta}{h(s)^2}.
\end{aligned} \tag{5.61}$$

Perceba que a equação anterior satisfaz as propriedades básicas de  $M_{nm}(s)$ , propriedades que são obtidas através da ortogonalidade dos autoestados. Derivando em relação a  $s$  o produto interno  $\langle n(s)|m(s)\rangle = \delta_{nm}$  chegamos a  $M_{nm}(s) + M_{mn}^*(s) = 0$ , apêndice C.1. Note que  $M_{nm}(s)$  é puramente imaginário e como os autoestados são reais e derivadas de números reais também o são,  $M_{nm}(s)$  deve obrigatoriamente ser nulo. Com as autoenergias (5.59) encontramos  $\Delta_{nm}(s) = E_n(s) - E_m(s)$ ,

$$\begin{aligned}
\Delta_{01}(s) &= -\Delta h(s), \\
\Delta_{10}(s) &= \Delta h(s).
\end{aligned} \tag{5.62}$$

Em posse dos  $M_{nm}(s)$ , equação (5.61), e das autoenergias (5.59) podemos determinar as fases dinâmicas  $\omega_n(s)$ , equação (2.24), e as fases de Berry  $\gamma_n(s)$ , equação (2.23),

$$\begin{aligned}
\omega_0(s) &= -\frac{v}{4\epsilon} \left( \sinh^{-1}(\beta) + \sinh^{-1}(\beta(2s-1)) + \beta h(0) + \beta h(s)(\alpha s - 1) \right), \\
\omega_1(s) &= \frac{v}{4\epsilon} \left( \sinh^{-1}(\beta) + \sinh^{-1}(\beta(2s-1)) + \beta h(0) + \beta h(s)(\alpha s - 1) \right),
\end{aligned} \tag{5.63}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_0(s) &= 0, \\
\gamma_1(s) &= 0.
\end{aligned} \tag{5.64}$$

Com o intuito de simplificar a notação chamamos  $\mu_{nm}(s) = \frac{M_{nm}(s)}{\Delta_{nm}(s)}$  e como  $\frac{M_{01}(s)}{\Delta_{01}(s)} = \frac{M_{10}(s)}{\Delta_{10}(s)}$  definimos  $\mu_{nm}(s) = \mu(s)$ , onde

$$\mu(s) = \frac{\epsilon}{2v \hbar h(s)^3}. \tag{5.65}$$

Para calcular os  $J_{nm}(s)$ , equação (2.38), usamos as equações (5.61) e (5.62) e obtemos

$$\begin{aligned} J_{01}(s) &= -\frac{\beta}{6}\mu(s)g(s), \\ J_{10}(s) &= \frac{\beta}{6}\mu(s)g(s), \end{aligned} \quad (5.66)$$

com

$$g(s) = \frac{(2\beta^2 + 3)h(s)^3}{h(0)^3} + (2s - 1)(2\beta^2(2s - 1)^2 + 3). \quad (5.67)$$

As condições iniciais (5.3) escritas na base dos autoestados (5.60), cuja prova está na subseção C.4, são

$$\begin{aligned} b_0(0) &= -\frac{\sqrt{\beta + h(0)}}{\sqrt{2}\sqrt{h(0)}}, \\ b_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{h(0)}\sqrt{\beta + h(0)}}, \\ b_r(0) &= \frac{b_1(0)}{b_0(0)} = -\frac{1}{\beta + h(0)}. \end{aligned} \quad (5.68)$$

Aqui foi inserido  $b_r(0)$  que é a razão entre o coeficiente de  $|0(0)\rangle$  e o coeficiente de  $|1(0)\rangle$  e escreveremos  $b_1(0) = b_r(0)b_0(0)$  nas equações posteriores.

Agora temos todas as informações que são necessárias para calcularmos as funções de onda de ordem  $p$ , equação (2.19), da função de onda via teoria da perturbação adiabática. Começando pela ordem zero, utilizando a equação (2.30), temos que  $b_{nm}^{(0)}(s) = b_n(0)\delta_{nm}$  e dessa forma a função de onda de ordem zero é

$$|\Psi_{APT\epsilon^0}\rangle_0 = b_0(0)e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}} \left( |0(s)\rangle + b_r(0)e^{\frac{2i\omega_0(s)}{v}} |1(s)\rangle \right), \quad (5.69)$$

onde  $\omega_0(s)$  é a equação (5.63),  $b_0(0)$  e  $b_r(0)$  são dados por (5.68) e os autoestados por (5.60).

A ordem zero (5.69) já está normalizada porque é a aproximação adiabática, pois seus coeficientes são os coeficientes da condição inicial que já são normalizados.

A determinação dos coeficientes de primeira ordem requer que usemos a expressão (2.33), ou usemos diretamente (2.41):

$$|\Psi^{(1)}(s)\rangle = \frac{ib_0(0)\epsilon}{2vh(s)^3} \left\{ e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}} \left[ \frac{1}{6}\beta g(s) + b_r(0) \left( -\frac{h(s)^3}{h(0)^3} + e^{\frac{2i\omega_0(s)}{v}} \right) \right] |0(s)\rangle + e^{\frac{i\omega_0(s)}{v}} \left[ -\frac{1}{6}\beta b_r(0)g(s) - \frac{h(s)^3}{h(0)^3} + e^{-\frac{2i\omega_0(s)}{v}} \right] |1(s)\rangle \right\}, \quad (5.70)$$

com  $b_0(0)$ ,  $b_r(0)$ ,  $h(s)$ ,  $g(s)$  e  $\omega_0(s)$  definidos nas páginas anteriores.

### 5.3.1 Normalização

A função de onda de ordem zero (5.69) já está normalizada. Para a perturbação até ordem um,  $|\Psi_{APT}\rangle_1 = |\Psi^{(0)}(s)\rangle + v|\Psi^{(1)}(s)\rangle$ , a normalização exata é

$$\tilde{N}_1 = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{144}\epsilon^2 \left( \frac{36}{h(0)^6} + \frac{36 + \beta^2 g(s)^2}{h(s)^6} - \frac{72 \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right)}{h(0)^3 h(s)^3} \right)}}. \quad (5.71)$$

Como discutido anteriormente a função  $|\Psi_{APT}(s)\rangle_1$  não possui dependência explícita de  $v$ , nos levando a analisar a função para definir o termo efetivo de perturbação. Com base na função de onda e na normalização podemos notar que o termo perturbativo efetivo é  $\epsilon = \frac{\hbar\nu}{\Delta^2}$ .

Nós definimos a Hamiltoniana variando inicialmente de  $-\tau$  a  $\tau$ , logo temos  $v = \frac{1}{2\tau} = \frac{\nu}{\beta\Delta}$  conforme foi definido na seção 5.1. Perceba aqui que o termo perturbativo efetivo possui a característica de ser  $\hbar$  multiplicado por uma frequência característica do sistema,  $\frac{\nu}{\Delta}$ , dividido pelo *gap* mínimo de energia,  $\Delta$ .

Expandindo a normalização para  $\epsilon \ll 1$  encontramos

$$\tilde{N}_1 \approx 1 - \frac{\epsilon^2}{8} \left( \frac{1}{h(0)^6} + \frac{36 + \beta^2 g(s)^2}{36h(s)^6} - \frac{2 \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right)}{h(0)^3 h(s)^3} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3). \quad (5.72)$$

Nesse caso, análogo à subseção 5.2.1, podemos considerar duas aproximações para a normalização,

$$\begin{aligned} N_{\epsilon^1} &= 1 + \mathcal{O}(\epsilon^2), \\ N_{\epsilon^2} &= 1 - \frac{\epsilon^2}{8} \left( \frac{1}{h(0)^6} + \frac{36 + \beta^2 g(s)^2}{36h(s)^6} - \frac{2 \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right)}{h(0)^3 h(s)^3} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3). \end{aligned} \quad (5.73)$$

Com isso podemos escrever a primeira função de onda aproximada pela teoria da perturbação adiabática considerando a expansão da normalização até ordem de  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} |\Psi_{APT\epsilon}(s)\rangle_1 = & b_0(0)e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}} \left[ 1 + \frac{i\epsilon}{2h(s)^3} \left( \frac{\beta}{6}g(s) + b_r(0)e^{\frac{2i\omega_0(s)}{v}} - \frac{b_r(0)h(s)^3}{h(0)^3} \right) \right] |0(s)\rangle \\ & + b_0(0)e^{\frac{i\omega_0(s)}{v}} \left[ b_r(0) + \frac{i\epsilon}{2h(s)^3} \left( e^{-\frac{2i\omega_0(s)}{v}} - \frac{1}{6}\beta b_r(0)g(s) - \frac{h(s)^3}{h(0)^3} \right) \right] |1(s)\rangle. \end{aligned} \quad (5.74)$$

Por sua vez, mantendo termos da expansão da normalização até ordem dois em  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} |\Psi_{APT\epsilon^2}(s)\rangle_1 = & b_0(0)e^{-\frac{i\omega_0(s)}{v}} \left[ 1 + \frac{i\epsilon}{2h(s)^3} \left( \frac{\beta}{6}g(s) + b_r(0)e^{\frac{2i\omega_0(s)}{v}} - \frac{b_r(0)h(s)^3}{h(0)^3} \right) - \frac{\epsilon^2}{8}G(s) \right] |0(s)\rangle \\ & + b_0(0)e^{\frac{i\omega_0(s)}{v}} \left[ b_r(0) + \frac{i\epsilon}{2h(s)^3} \left( e^{-\frac{2i\omega_0(s)}{v}} - \frac{1}{6}\beta b_r(0)g(s) - \frac{h(s)^3}{h(0)^3} \right) - \frac{\epsilon^2}{8}b_r(0)G(s) \right] |1(s)\rangle, \end{aligned} \quad (5.75)$$

com

$$G(s) = \frac{1}{h(0)^6} + \frac{36 + \beta^2 g(s)^2}{36h(s)^6} - \frac{2 \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right)}{h(0)^3 h(s)^3}. \quad (5.76)$$

### 5.3.2 Probabilidade de Transição

Para a teoria de perturbação adiabática temos três funções de onda aproximadas para analisar. A primeira delas é a ordem zero em  $v$ , que nada mais é do que a aproximação adiabática. Para ordem um em  $v$  temos duas possibilidades, dependendo de qual expansão em  $\epsilon$  usamos para a normalização.

Para a ordem zero em  $v$  temos a seguinte probabilidade de transição,

$$\mathcal{P}_{APT0}(s) = \frac{1}{2} + \frac{2b_0(0)^2 b_r(0) \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right) + \beta(2b_0(0)^2 - 1)(2s - 1)}{2h(s)}. \quad (5.77)$$

Após transcrito o experimento, isto é, quando  $s = 1$ , podemos calcular a probabilidade de transição no limite para tempos muito grandes, como foi feito por Zener, apêndice A.1. Assim, expandindo a probabilidade (5.77) para  $\beta \rightarrow \infty$  encontramos

$$\mathcal{P}_{\beta APT_0}(\beta) = 1 - \frac{1 + \cos\left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right)}{2\beta^2} + \frac{1 + \cos\left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right)}{2\beta^4}, \quad \beta \gg 1. \quad (5.78)$$

Analogamente à subseção 5.1.1, aqui desconsideramos a expansão do argumento dos cossenos,  $\frac{2\omega_0(1)}{v} = -\frac{\beta\sqrt{\beta^2+1+\sinh^{-1}(\beta)}}{\epsilon}$ , pois para qualquer  $\beta$  o cosseno estará entre  $-1$  e  $1$ . Esse mesmo raciocínio será empregado para as expansões das demais probabilidades.

Seguindo para a solução aproximada até primeira ordem, inicialmente para a função de onda (5.74), a probabilidade foi determinada desprezando termos  $\epsilon^2$  e após simplificações obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{APT\epsilon}(s) = & \frac{1}{2} + \frac{2b_0(0)^2 b_r(0) \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right) + \beta(2b_0(0)^2 - 1)(2s - 1)}{2h(s)} \\ & + \epsilon \left[ \frac{\beta b_0(0)^2 b_r(0)(g(s) + 6(1 - 2s))}{6h(s)^4} + \frac{2b_0(0)^2 - 1}{2h(0)^3 h(s)} \right] \sin\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right), \end{aligned} \quad (5.79)$$

cuja expansão para  $\beta \rightarrow \infty$  dá

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\beta APT\epsilon}(\beta) = & 1 - \frac{1 + \cos\left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right) + \frac{2}{3}\epsilon \sin\left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right)}{2\beta^2} \\ & + \frac{1 + \cos\left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right) + \frac{8}{3}\epsilon \sin\left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right)}{2\beta^4}, \quad \beta \gg 1. \end{aligned} \quad (5.80)$$

A última probabilidade de transição é proveniente da função de onda de ordem um normalizada até  $\epsilon^2$ , equação (5.75):

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{APT\epsilon^2}(s) = & \frac{1}{2} + \frac{2b_0(0)^2 b_r(0) \cos\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right) + \beta(2b_0(0)^2 - 1)(2s - 1)}{2h(s)} \\ & + \epsilon \left[ \frac{\beta b_0(0)^2 b_r(0)(g(s) + 6(1 - 2s))}{6h(s)^4} + \frac{2b_0(0)^2 - 1}{2h(0)^3 h(s)} \right] \sin\left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right) \\ & + \epsilon^2 R(s), \end{aligned} \quad (5.81)$$

onde

$$\begin{aligned}
R(s) = & \frac{\beta \left(\frac{1}{2} - b_0(0)^2\right) (2s - 1)}{2h(0)^6 h(s)} - \frac{b_0(0)^2 b_r(0) \sin^2 \left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right)}{2h(0)^3 h(s)^4} \\
& + \frac{\beta b_0(0)^2 b_r(0) g(s) (\beta(1 - 2s) - \beta^3(2s - 1)^3)}{12h(0)^3 h(s)^6} + \frac{\left(\frac{1}{2} - b_0(0)^2\right) \left(\beta(2s - 1) - \frac{1}{6}\beta g(s)\right)}{2h(s)^7} \\
& + \left[ \frac{\beta^2 b_0(0)^2 b_r(0) g(s) \left(-\frac{g(s)}{6} + 2s - 1\right)}{12h(s)^7} + \frac{\left(b_0(0)^2 - \frac{1}{2}\right) \left(\beta(2s - 1) - \frac{1}{12}\beta g(s)\right)}{h(0)^3 h(s)^4} \right] \\
& \times \cos \left(\frac{2\omega_0(s)}{v}\right). \quad (5.82)
\end{aligned}$$

Sua expansão para  $\beta \rightarrow \infty$  dá

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{\beta APT\epsilon^2}(\beta) = & 1 - \frac{1 + \cos \left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right) + \frac{2}{3}\epsilon \sin \left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right) - \frac{2}{9}\epsilon^2 \cos \left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right)}{2\beta^2} \\
& + \frac{1 + \cos \left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right) + \frac{8}{3}\epsilon \sin \left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right) + \frac{2}{3}\epsilon^2 \left(1 - \frac{4}{3} \cos \left(\frac{2\omega_0(1)}{v}\right)\right)}{2\beta^4}, \quad \beta \gg 1. \quad (5.83)
\end{aligned}$$

### 5.3.3 Análise dos Resultados

Podemos perceber que a diferença entre as funções de onda (5.74) e (5.75) está somente no termo proporcional  $\epsilon^2$ . Isso era de se esperar pois em (5.74) desprezamos o termo proporcional a  $\epsilon^2$  enquanto em (5.75) o mantivemos. O mesmo ocorre com as probabilidades (5.77), (5.79) e (5.81) e nos casos em que  $\beta \rightarrow \infty$ , como pode ser observado em (5.78), (5.80) e (5.83). Vale ressaltar, do comportamento aditivo para as probabilidades, que a teoria da perturbação adiabática oferece correções da aproximação adiabática.

As probabilidades de transição determinadas via teoria da perturbação não recobram a probabilidade de Landau-Zener (5.2) quando  $\beta \rightarrow \infty$ , pois elas tendem a 1, ao passo que (5.2) não. Isso ocorre porque para aplicarmos a teoria de perturbação adiabática além de estabelecermos  $\beta$  muito grande, foi considerado  $\epsilon \ll 1$ . Ou seja, existe uma hipótese extra na teoria da perturbação adiabática. Se aplicarmos essa mesma hipótese em (5.2) temos

$$\mathcal{P}_{LZ} = 1 - e^{-\frac{\pi}{2} \frac{\Delta^2}{\hbar v}} = 1 - e^{-\frac{\pi}{2} \frac{1}{\epsilon}} \Rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{P}_{LZ} = 1. \quad (5.84)$$

Com a hipótese extra recobramos o mesmo que as probabilidades da teoria da pertur-

bação adiabática preveem. Contudo, a hipótese de que  $\beta \gg 1$  e  $\epsilon \ll 1$  é a condição para aplicação da solução adiabática (5.30) na seção 5.1.1 e por isso utilizamos essa solução para compararmos com a ordem zero da teoria da perturbação adiabática.

Podemos afirmar que a probabilidade de transição adiabática (5.36) e a probabilidade de transição de ordem zero da teoria da perturbação adiabática (5.77) são idênticas, notando que  $\zeta(s) = \frac{\omega_0(s)}{v}$ . Veja as equações (5.35) e (5.63). Para  $\beta \rightarrow \infty$  as probabilidades (5.37) e (5.78) são equivalentes.

Outro fato importante a ser considerado é que o termo considerado pequeno nas expansões foi o  $\epsilon = \frac{\hbar\nu}{\Delta^2}$ , equação (5.11). Mas podemos escrever  $\frac{\nu}{\Delta} = \frac{2\beta}{2\tau} = 2v\beta$ , equação (5.12). Logo,  $\epsilon = \frac{2\beta v\hbar}{\Delta}$ . Semelhantemente ao ocorrido na seção 3.2, novamente temos que o fator pequeno é a razão  $v\hbar$  sobre o *gap* de energia, nos levando a conclusão que para que a teoria da perturbação adiabática seja melhor aplicada, não somente  $v$  deve ser pequeno, mas também a razão entre  $\frac{v\hbar}{E}$ , onde  $E$  é o *gap* mínimo de energia.

## Capítulo 6

# Comparação para Hamiltoniana de Landau-Zener

Nas seções 5.2 e 5.3 encontramos as funções de onda perturbativas e suas respectivas probabilidades de transição para a Hamiltoniana de Landau-Zener. Neste capítulo comparamos os resultados das duas teorias, almejando descobrir qual delas mais aproxima da solução exata.

Como já vimos, a teoria padrão somente é válida para  $\beta < 1$  e a teoria da perturbação adiabática para  $\epsilon < 1$ . Com isso em mente analisamos ambas teorias de perturbação usando combinações de  $\epsilon = 0.01$  e  $\epsilon = 0.1$  com  $\beta = 0.01$  e  $\beta = 0.1$ . Além disso, tomamos  $\hbar = 1$  em todas as análises que se seguem.

Os gráficos referentes a probabilidade de transição são as figuras de 6.1 a 6.4. As fidelidades podem ser observadas nos gráficos 6.5 a 6.8. Esses oito gráficos citados nos permitiram comparar as teorias de forma bastante clara e as conclusões que chegamos estão expostas na seção 6.1.

Comparamos também os resultados advindos da teoria de perturbação adiabática com a solução exata do problema de Landau-Zener, isto é, estudamos o cenário para o qual  $\beta \gg 1$ , onde a teoria padrão não é válida. As análises feitas para  $\epsilon = 0.1$  e  $\beta = 10$  ou  $\beta = 30$  podem ser vistas nas figuras 6.9 a 6.12.

Nos gráficos seguintes, 6.13 a 6.15 plotamos as probabilidades no limite assintótico ( $\beta \rightarrow \infty$ ) comparadas com a solução exata.

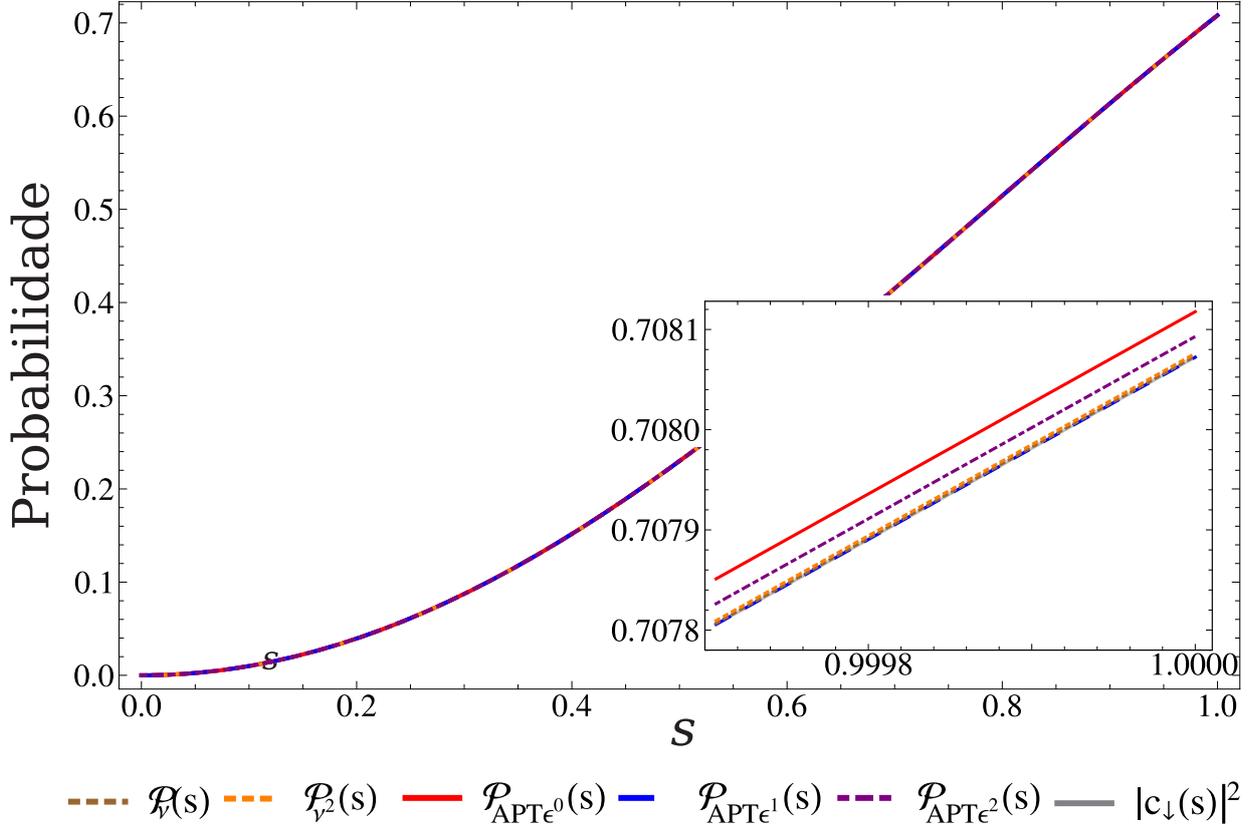


Figura 6.1: Comparação entre as probabilidades de transição da teoria de perturbação dependente do tempo (5.55) e (5.56) e da teoria da perturbação adiabática (5.77), (5.79) e (5.81), em relação a solução exata,  $|c_\downarrow(s)|^2$  (5.24). Aqui  $\epsilon = 0.01$  e  $\beta = 0.01$ . No gráfico principal as curvas são indistinguíveis entre si. No detalhe, podemos ver no conjunto inferior de curvas a  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^1}(s)$  em acordo com probabilidade exata e levemente acima a  $\mathcal{P}_\nu(s)$  seguida por  $\mathcal{P}_{\nu^2}(s)$ . Concluindo, a teoria da perturbação adiabática apresenta melhor aproximação.

## 6.1 Análise dos resultados

Para analisar os resultados citamos diversas vezes a palavra "expansão", que se refere às expansões da normalização. Devemos ter sempre em mente que a primeira e segunda ordem de expansões foram obtidas considerando as funções perturbativas até ordem 1 em ambas as teorias.

Analisando os gráficos 6.1 a 6.4 podemos perceber que  $\beta$  pequeno não é favorável para a aproximação adiabática, pois  $\beta$  pequeno equivale a uma mudança muito rápida da Hamiltoniana. Entretanto a teoria da perturbação adiabática apresenta correções para a aproximação adiabática, as quais podem ser vistas nos detalhes dos gráficos, melhorando

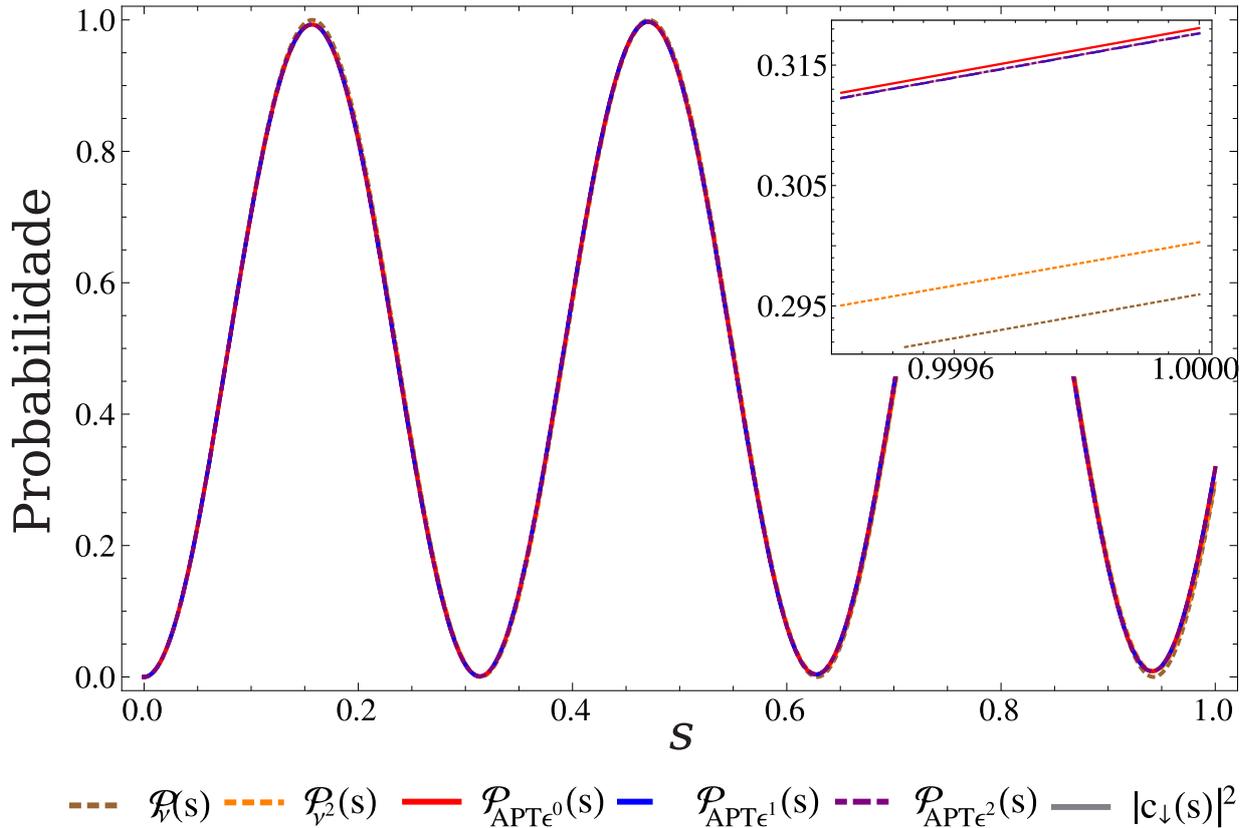


Figura 6.2: Comparação entre as probabilidades de transição da teoria de perturbação dependente do tempo (5.55) e (5.56) e da teoria da perturbação adiabática (5.77), (5.79) e (5.81) em relação a solução exata,  $|c_{\downarrow}(s)|^2$  (5.24). Aqui  $\epsilon = 0.01$  e  $\beta = 0.1$ . No gráfico principal podemos perceber que as probabilidades da teoria padrão vão se distanciar da solução exata a cada período. No detalhe, percebemos no conjunto superior de curvas temos  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^1}(s)$  e  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^2}(s)$  em acordo com probabilidade exata, e a ordem zero apresentando um pequeno desvio. A teoria da perturbação adiabática apresenta melhor aproximação.

significativamente a solução aproximada.

As probabilidades  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^2}(s)$ , equação (5.81), e  $\mathcal{P}_{\nu^2}(s)$ , equação (5.56), que eram esperadas serem mais precisas que as probabilidades de primeira ordem de expansão da normalização em  $\nu$  e  $\epsilon$ , não demonstraram serem as melhores expansões.

A possível explicação é não termos considerados as funções perturbadas até ordem 2, pois  $\beta < 1$  é uma variação brusca da Hamiltoniana para aplicar a aproximação adiabática exigindo mais ordens de perturbação. Contudo,  $\beta \approx 0.1 \Rightarrow \nu\tau \approx 0.1\Delta$  pode ser considerado um alto valor para a teoria dependente do tempo e também requer mais ordens de perturbação.

Analisando os gráfico concluímos também que para a probabilidade de transição, de

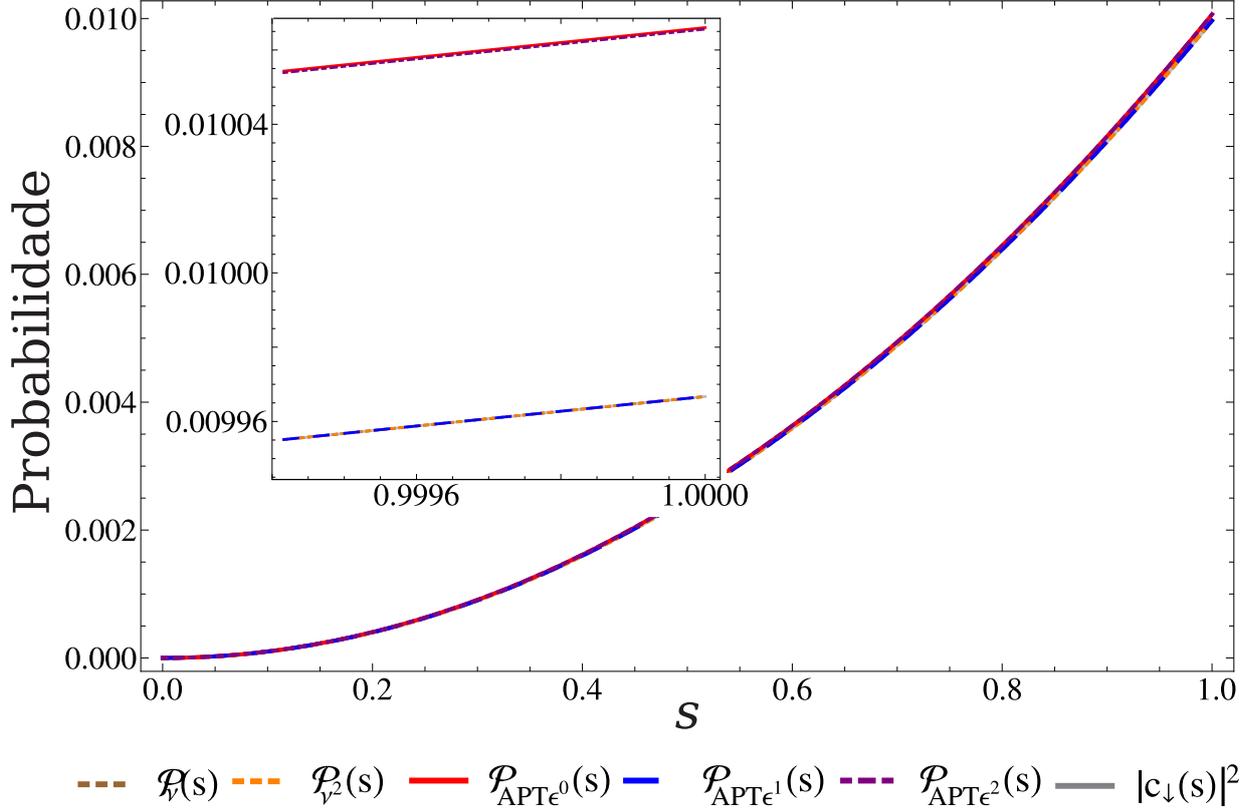


Figura 6.3: Comparação entre as probabilidades de transição da teoria de perturbação dependente do tempo (5.55) e (5.56) e da teoria da perturbação adiabática (5.77), (5.79) e (5.81) em relação a solução exata,  $|c_\downarrow(s)|^2$  (5.24). Aqui  $\epsilon = 0.1$  e  $\beta = 0.01$ . No gráfico principal podemos visualizar a  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^0}(s)$  e  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^2}(s)$  desviando da probabilidade exata. No detalhe, no conjunto inferior temos  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^1}(s)$ ,  $\mathcal{P}_v(s)$  e  $\mathcal{P}_v^2(s)$  em acordo com a solução exata. Ambas teorias apresentam bons resultados se considerarmos somente a expansão da normalização em primeira ordem de  $\epsilon$  na teoria adiabática.

modo geral, a teoria de perturbação adiabática apresenta melhores resultados em relação a teoria de perturbação dependente do tempo. Entretanto, se analisarmos somente as expansões da normalização de segunda ordem, a teoria da perturbação dependente do tempo apresenta melhores resultados.

Os gráficos da fidelidade, figuras 6.5 a 6.8, nos mostram que as expansões de segunda ordem são mais próximas da função de onda obtida analiticamente, E olhando nos detalhes das imagens podemos concluir que a teoria da perturbação dependente do tempo é a que apresenta melhores resultados.

Podemos perceber também que a ordem zero da teoria de perturbação adiabática possui melhor fidelidade que a de primeira ordem da expansão da normalização da mesma teoria.

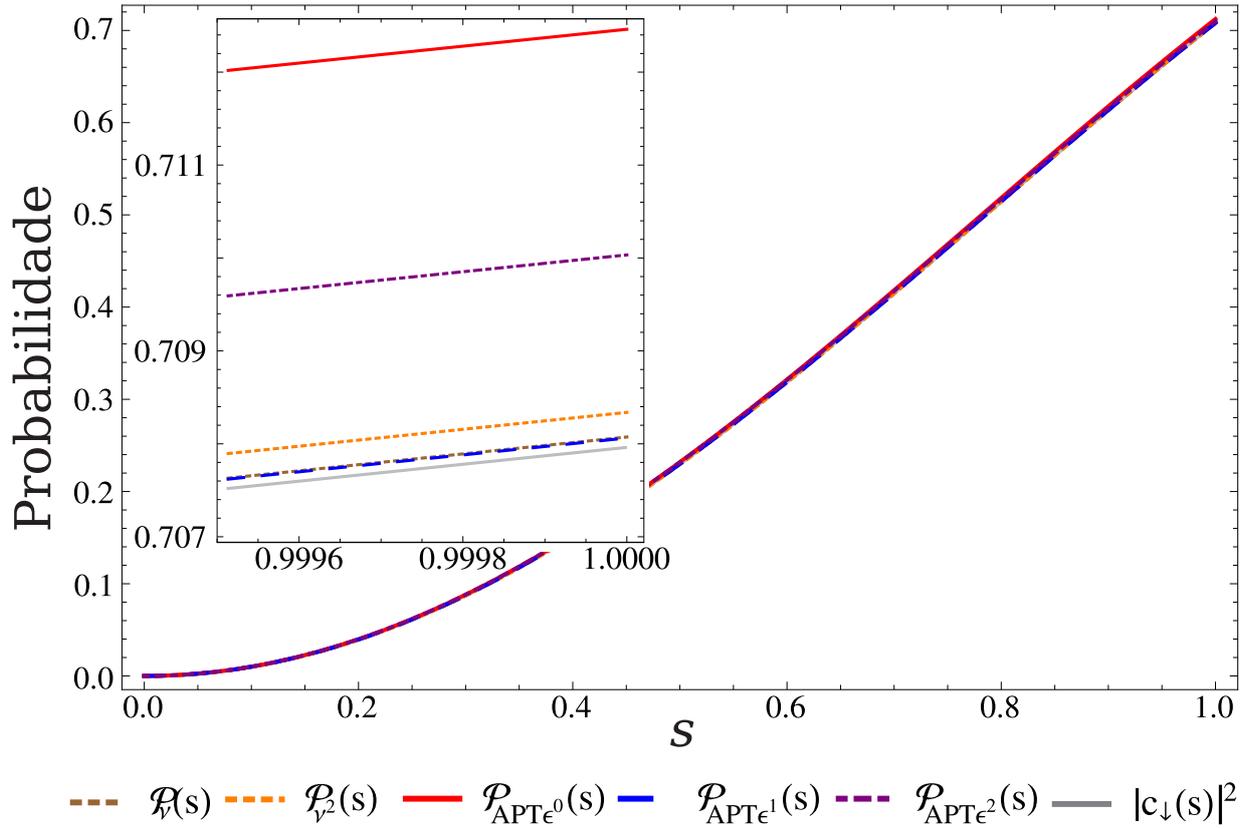


Figura 6.4: Comparação entre as probabilidades de transição da teoria de perturbação dependente do tempo (5.55) e (5.56) e da teoria da perturbação adiabática (5.77), (5.79) e (5.81) em relação a solução exata,  $|c_\downarrow(s)|^2$  (5.24). Aqui  $\epsilon = 0.1$  e  $\beta = 0.1$ . No gráfico principal podemos visualizar a  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^0}(s)$  e  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^2}(s)$  com um pequeno desvio da probabilidade exata. No detalhe, no conjunto inferior temos a solução exata, seguida pela  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^1}(s)$ , logo após pela  $\mathcal{P}_v(s)$  e  $\mathcal{P}_v^2(s)$ . A teoria de perturbação adiabática é ligeiramente melhor que a teoria dependente do tempo.

Podemos entender o ocorrido do seguinte modo:  $\beta$  ser pequeno implica que a Hamiltoniana evolui rapidamente até sua configuração final. Assim, a expansão da normalização de primeira ordem não foi o suficiente para corrigi-la, de modo que, a aproximação exigiu a segunda ordem de expansão da normalização para apresentar resultados satisfatórios.

No regime assintótico do modelo de Landau-Zener  $\beta \gg 1$ , onde consideramos somente a teoria adiabática já que a teoria padrão não pode ser empregada, podemos perceber pelos gráficos 6.9 e 6.10 que as probabilidades  $\mathcal{P}_{APT0\epsilon}(s)$ , equação (5.79), e  $\mathcal{P}_{APT0\epsilon^2}(s)$ , equação (5.81), possuem melhores resultados que a aproximação adiabática, mostrando que a teoria da perturbação adiabática efetivamente apresenta correções à ordem zero. Também podemos perceber o quão bem as probabilidade de transição obtidas via teoria

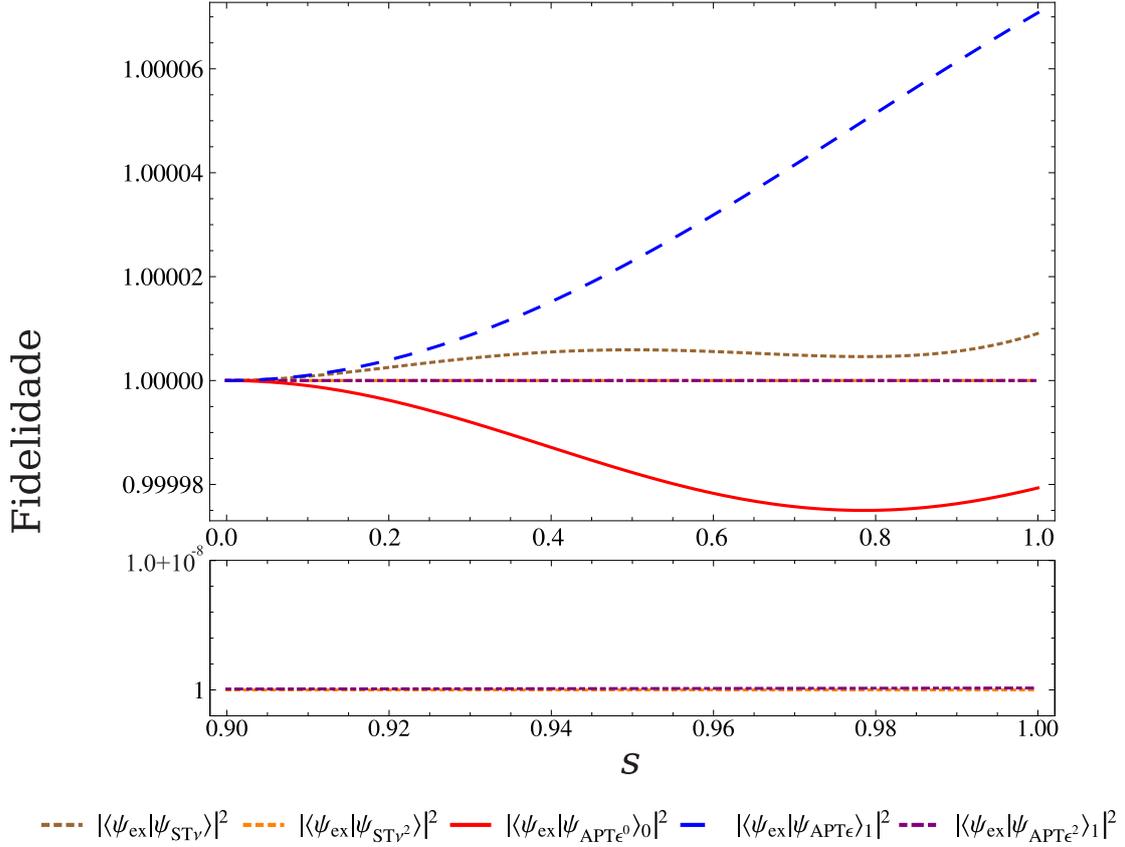


Figura 6.5: Fidelidade obtida usando as funções de onda (5.49), (5.50), (5.69), (5.74), (5.75) e a função exata  $|\Psi_{EX}(s)\rangle$  dado por (5.24) e (5.23). Consideramos  $\epsilon = 0.01$  e  $\beta = 0.01$ . No gráfico principal temos que as expansões de ordem 2 da normalização possuem fidelidades mais próximas de 1. No detalhe podemos perceber um leve desvio de  $\langle \psi_{\text{ex}}(s) | \psi_{\text{APT}\epsilon^2}(s) \rangle$  da fidelidade igual a 1. A teoria padrão é levemente superior a teoria adiabática.

da perturbação adiabática coincidem com a probabilidade obtida analiticamente.

Contudo, as curvas para as fidelidades, figuras 6.11 e 6.12, ilustram que ao utilizarmos a solução aproximada de ordem 1 com a normalização expandida até ordem  $\epsilon$  não obtemos bons resultados após  $s = 0.5$ , tempo no qual temos o menor *gap* de energia. Ao expandirmos a normalização até ordem  $\epsilon^2$  obtivemos ótimos resultados, mesmo em torno de  $s = 0.5$ , onde vimos apenas pequenas flutuações em torno do valor da fidelidade igual a 1.

Analisando as expansões de  $\beta \rightarrow \infty$  podemos ver claramente nas imagens (6.13), (6.14) e (6.15) que as expansões assintóticas da teoria de perturbação adiabática tendem ao valor da probabilidade de Landau-Zener.

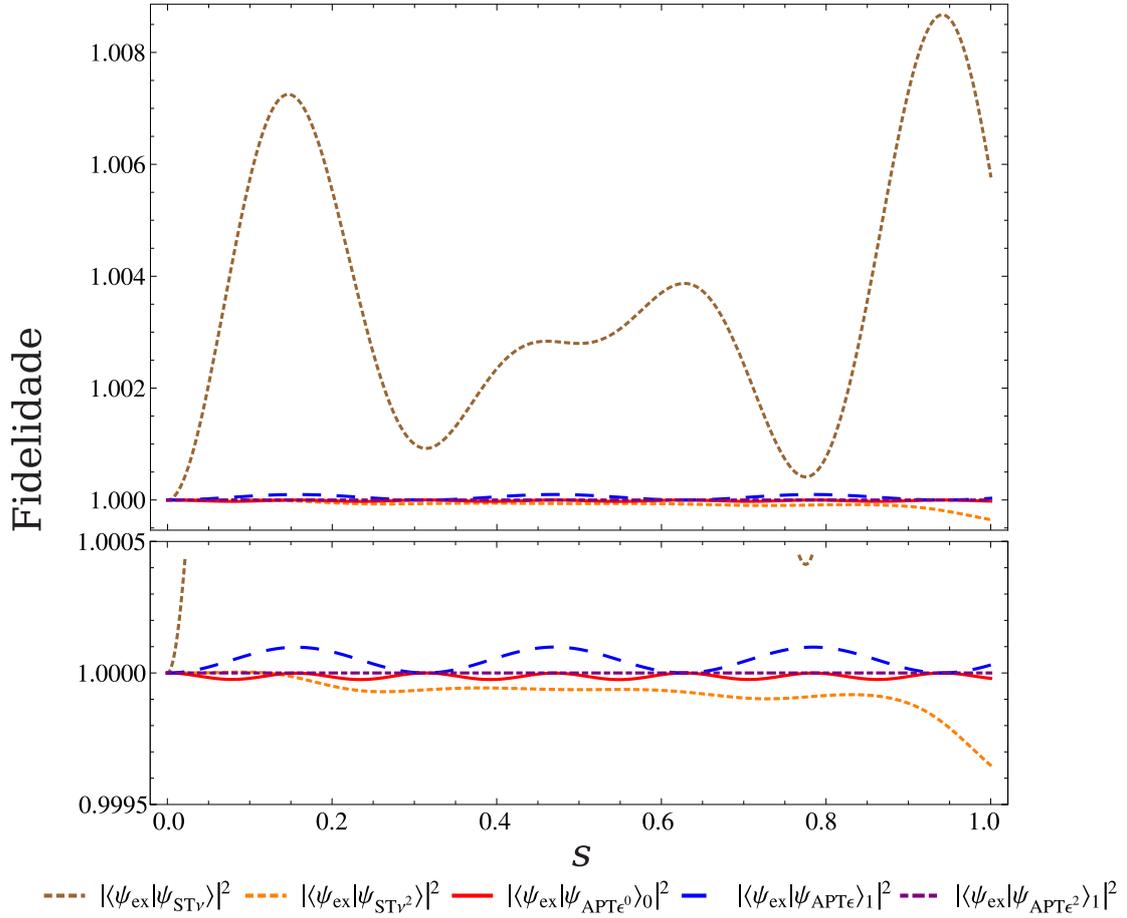


Figura 6.6: Fidelidade obtida usando as funções de onda (5.49), (5.50), (5.69), (5.74), (5.75) e a função exata  $|\Psi_{EX}(s)\rangle$  dado por (5.24) e (5.23). Consideramos  $\epsilon = 0.01$  e  $\beta = 0.1$ . No gráfico principal temos que as fidelidades das funções de ondas perturbativas da teoria adiabática possui melhor fidelidade. No detalhe,  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{APT\epsilon^2}(s) \rangle$  possui a fidelidade mais próxima de 1 seguido por  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{APT\epsilon^0}(s) \rangle$ . A teoria da perturbação adiabática apresenta melhor fidelidade.

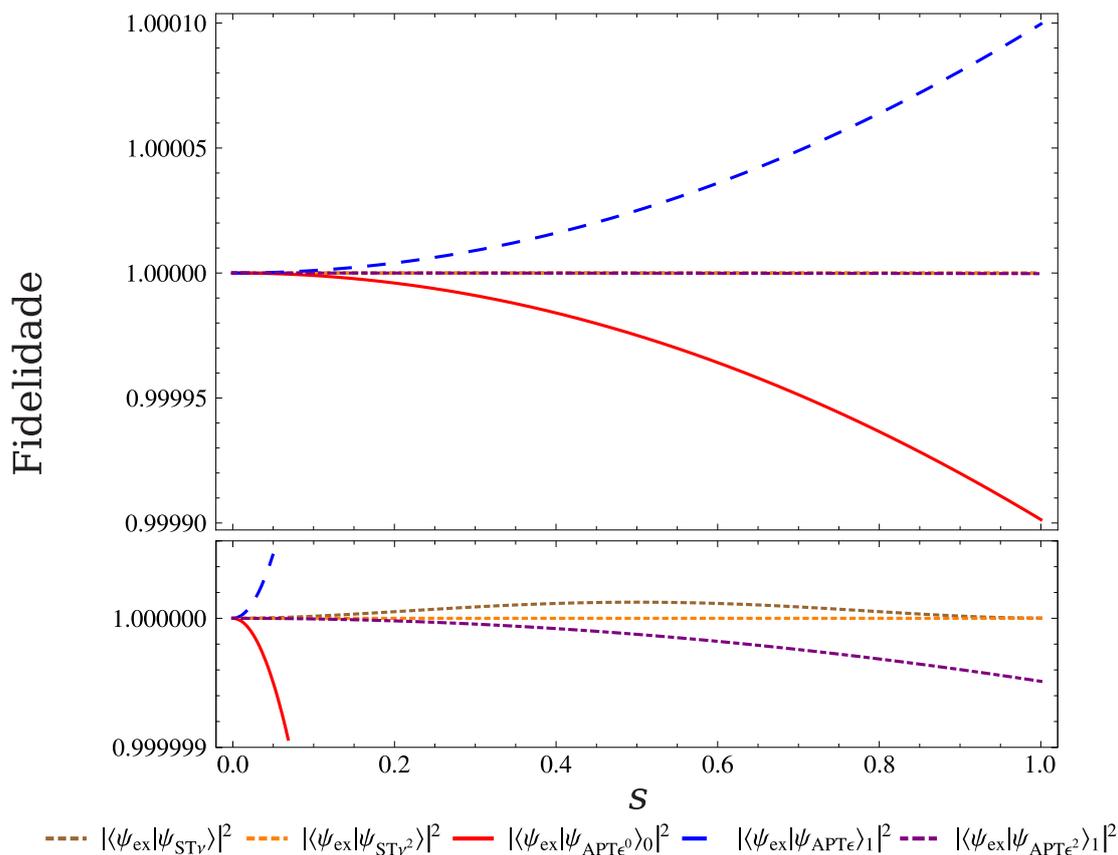


Figura 6.7: Fidelidade obtida usando as funções de onda (5.49), (5.50), (5.69), (5.74), (5.75) e a função exata  $|\Psi_{EX}(s)\rangle$  dado por (5.24) e (5.23). Consideramos  $\epsilon = 0.1$  e  $\beta = 0.01$ . No gráfico principal,  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{APT\epsilon^2}(s) \rangle$ ,  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{L^2}(s) \rangle$  e  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{L^1}(s) \rangle$  possuem fidelidades aproximadamente igual a 1. No detalhe,  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{L^2}(s) \rangle$  apresenta melhor fidelidade,  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{APT\epsilon^2}(s) \rangle$  desvia da fidelidade 1. A teoria da perturbação dependente do tempo possui melhor resultado.

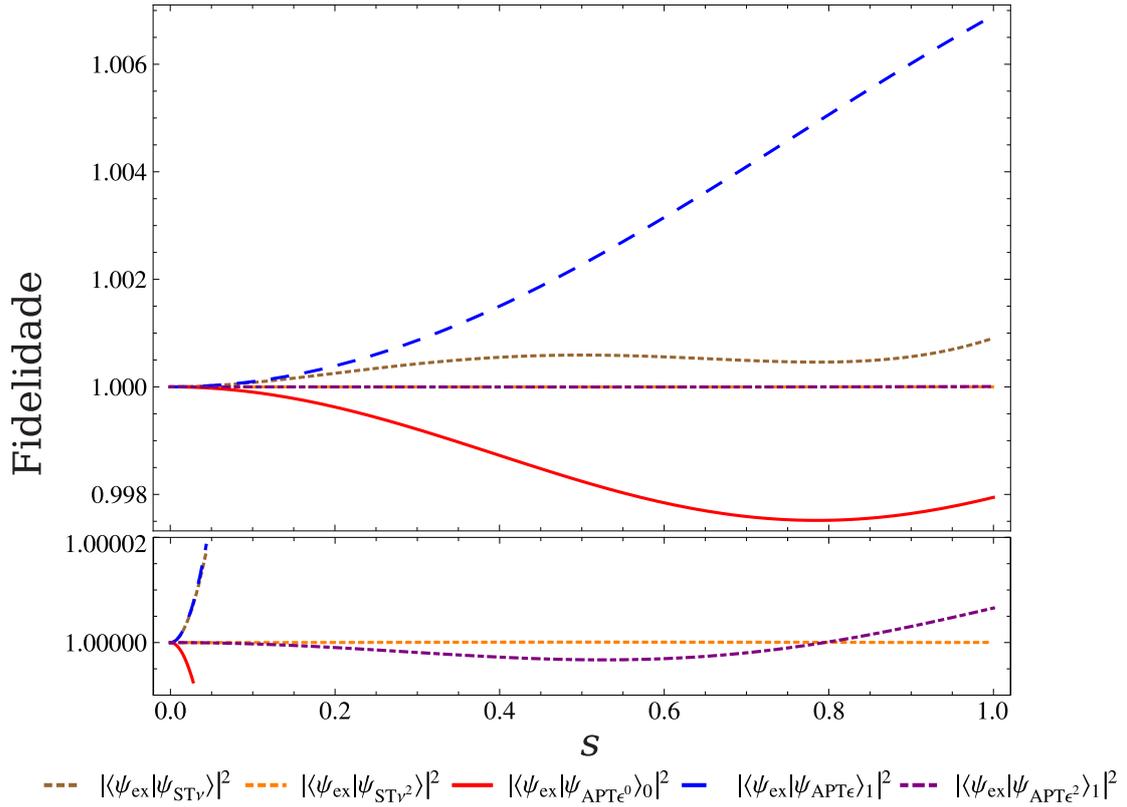


Figura 6.8: Fidelidade obtida usando as funções de onda (5.49), (5.50), (5.69), (5.74), (5.75) e a função exata  $|\Psi_{EX}(s)\rangle$  dado por (5.24) e (5.23). Consideramos  $\epsilon = 0.1$  e  $\beta = 0.1$ . No gráfico principal,  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{APT\epsilon^2}(s) \rangle$  e  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{\nu^2}(s) \rangle$  possuem fidelidades aproximadamente igual a 1. No detalhe,  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{\nu^2}(s) \rangle$  apresenta melhor fidelidade,  $\langle \psi_{ex}(s) | \psi_{APT\epsilon^2}(s) \rangle$  desvia da fidelidade 1. A teoria da perturbação dependente do tempo possui melhor resultado.

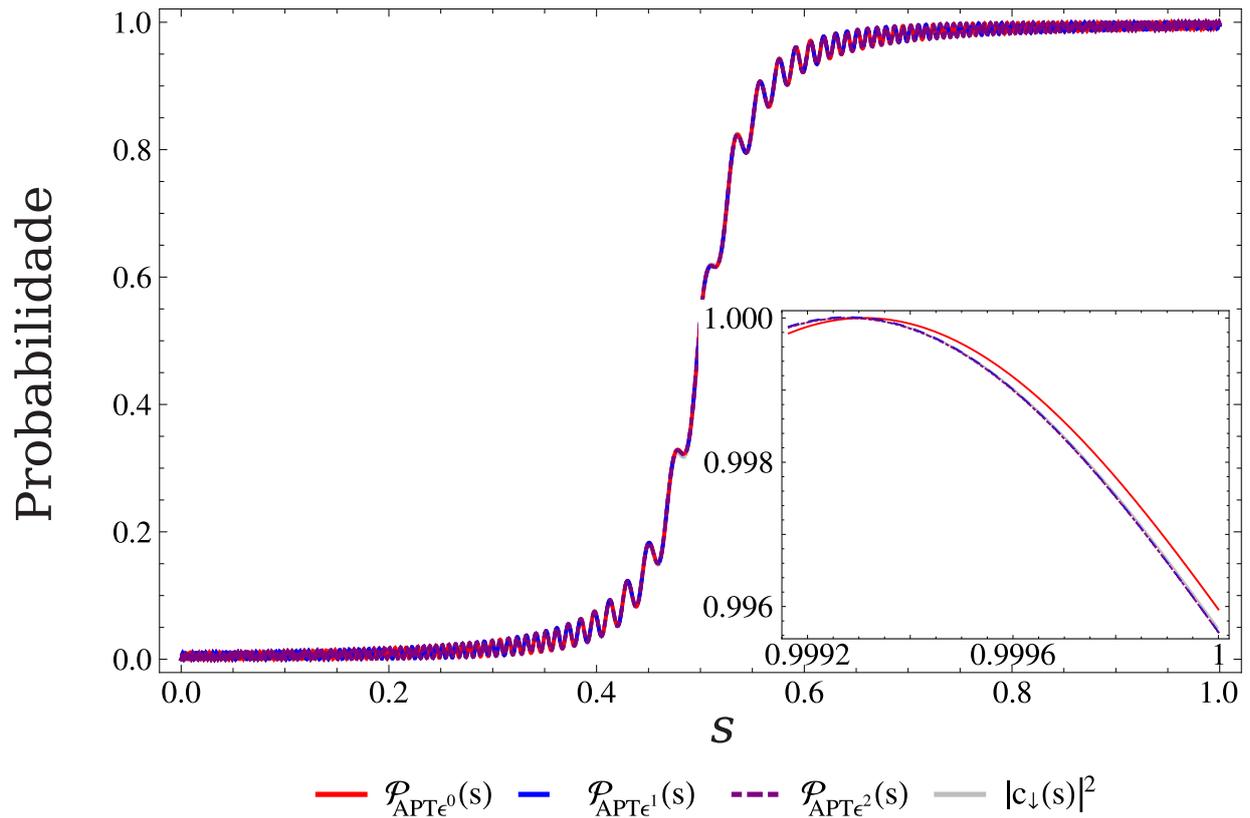


Figura 6.9: Probabilidade de transição comparando a teoria da perturbação adiabática através das equações de probabilidade (5.77), (5.79) e (5.81) com a probabilidade da solução exata, isto é,  $|c_{\downarrow}(s)|^2$  (5.24). Consideramos  $\epsilon = 0.1$  e  $\beta = 10$ . No gráfico principal as curvas são indistinguíveis. No detalhe,  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^1}(s)$  e  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^2}(s)$  são indistinguíveis entre si muito próximas a probabilidade exata.

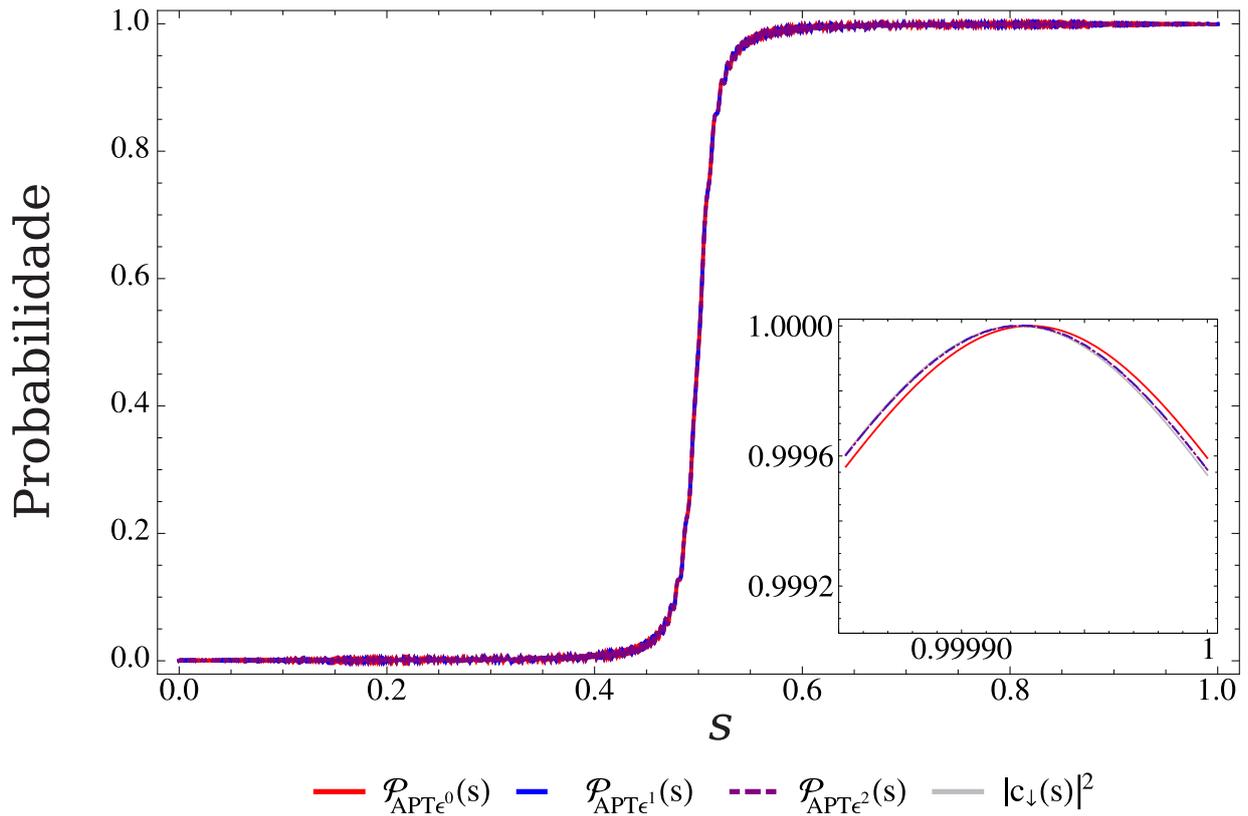


Figura 6.10: Probabilidade de transição comparando a teoria da perturbação adiabática através das equações de probabilidade (5.77), (5.79) e (5.81) com a probabilidade da solução exata, isto é,  $|c_{\downarrow}(s)|^2$  (5.24). Consideramos  $\epsilon = 0.1$  e  $\beta = 30$ . No gráfico principal as curvas são indistinguíveis. No detalhe,  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^1}(s)$  e  $\mathcal{P}_{APT\epsilon^2}(s)$  são indistinguíveis entre si e muito próximas a probabilidade exata.

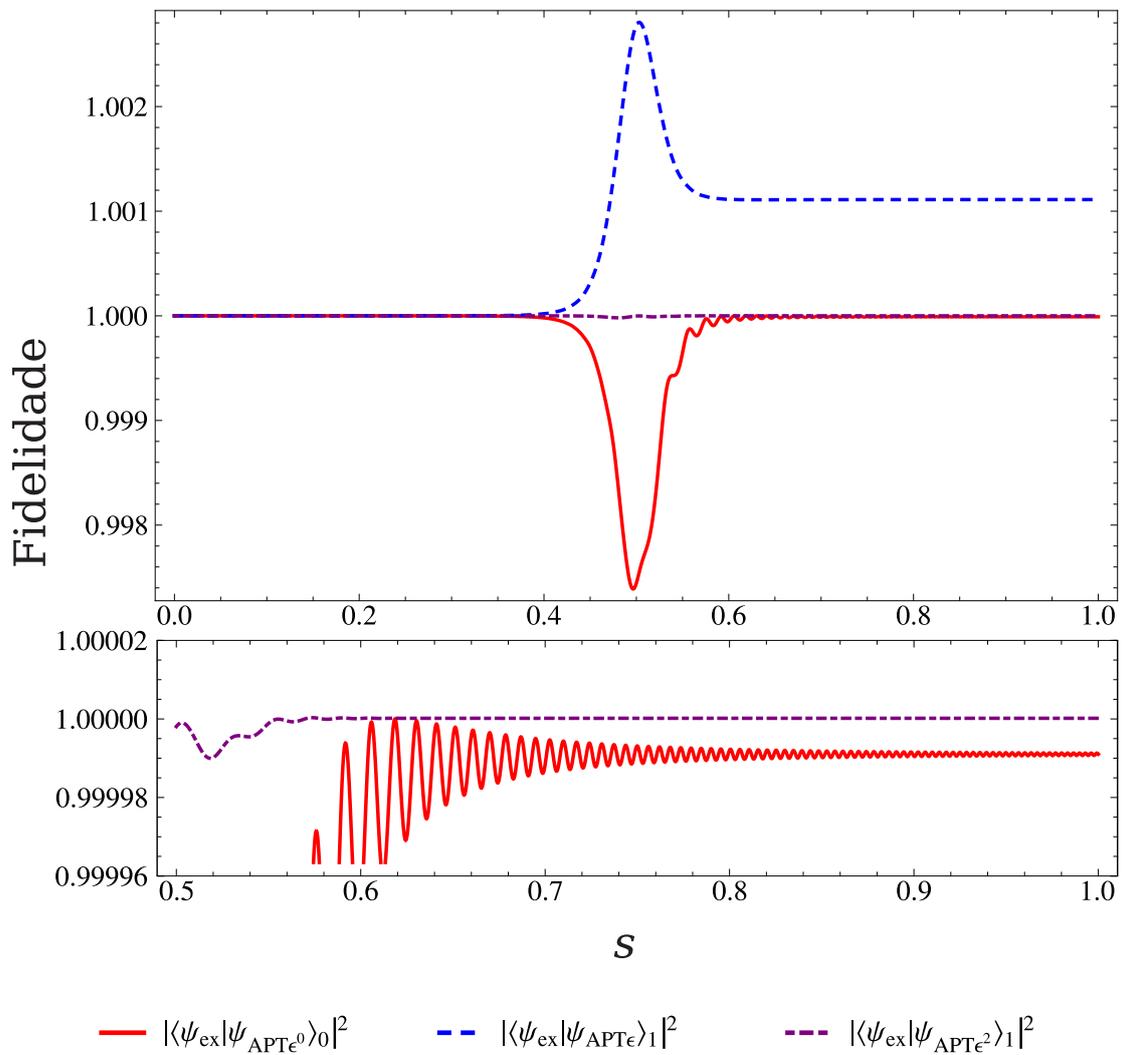


Figura 6.11: Fidelidade obtida usando as funções de onda perturbativas (5.69), (5.74), (5.75) e a função exata  $|\Psi_{EX}(s)\rangle$  dado por (5.24) e (5.23). Consideramos  $\epsilon = 0.1$  e  $\beta = 10$ . Nos gráficos podemos ver que  $\langle \psi_{\text{ex}}(s) | \psi_{\text{APT}\epsilon^2}(s) \rangle$  apresenta fidelidade 1, enquanto  $\langle \psi_{\text{ex}}(s) | \psi_{\text{APT}\epsilon}(s) \rangle$  perde a fidelidade enquanto se aproxima do menor *gap* de energia.

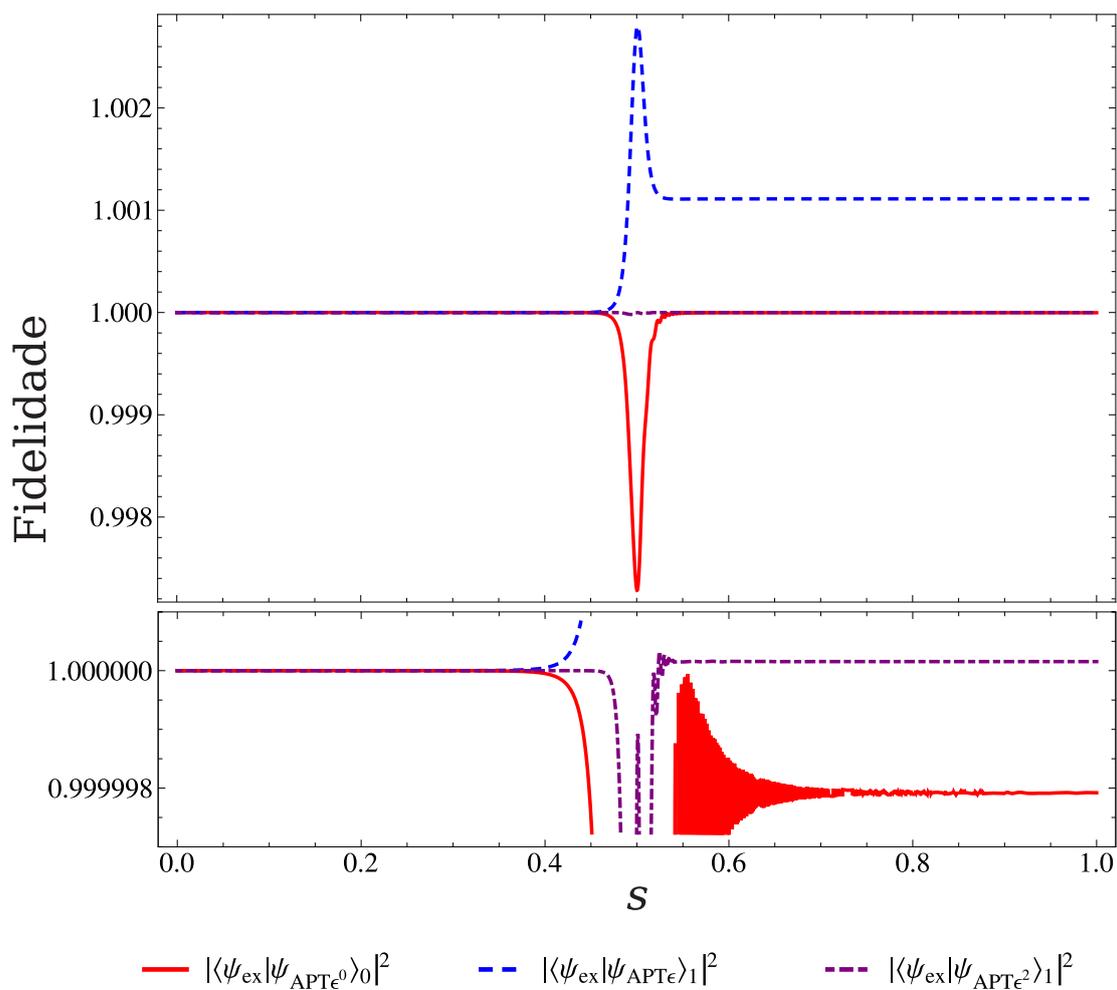


Figura 6.12: Fidelidade obtida usando as funções de onda perturbativas (5.69), (5.74), (5.75) e a função exata  $|\Psi_{EX}(s)\rangle$  dado por (5.24) e (5.23). Consideramos  $\epsilon = 0.1$  e  $\beta = 30$ . Nos gráficos podemos ver que  $\langle \psi_{\text{ex}}(s) | \psi_{\text{APT}\epsilon^2}(s) \rangle$  apresenta fidelidade 1, enquanto  $\langle \psi_{\text{ex}}(s) | \psi_{\text{APT}\epsilon}(s) \rangle$  perde a fidelidade enquanto se aproxima do menor *gap* de energia.

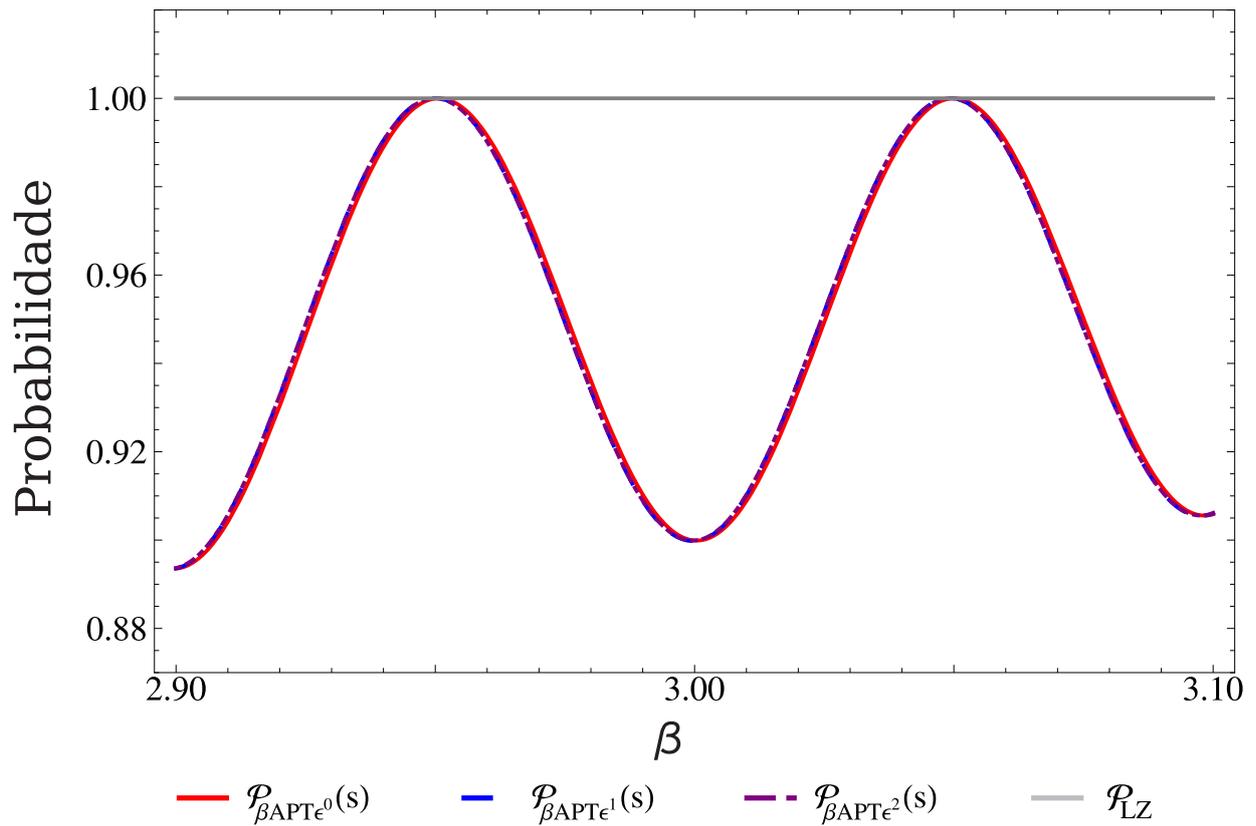


Figura 6.13: Probabilidade de transição considerando as expansões para  $\beta \gg 1$  e  $\epsilon = 0.1$ . Equações (5.78), (5.80) e (5.83) com a probabilidade de Landau-Zener, equação (5.2). Note que as curvas oscilam de 0.89 a 1.00, relativamente longe de  $\mathcal{P}_{LZ}$  devido a  $\beta \approx 3$  ainda não ser considerado o limite assintótico do tempo.

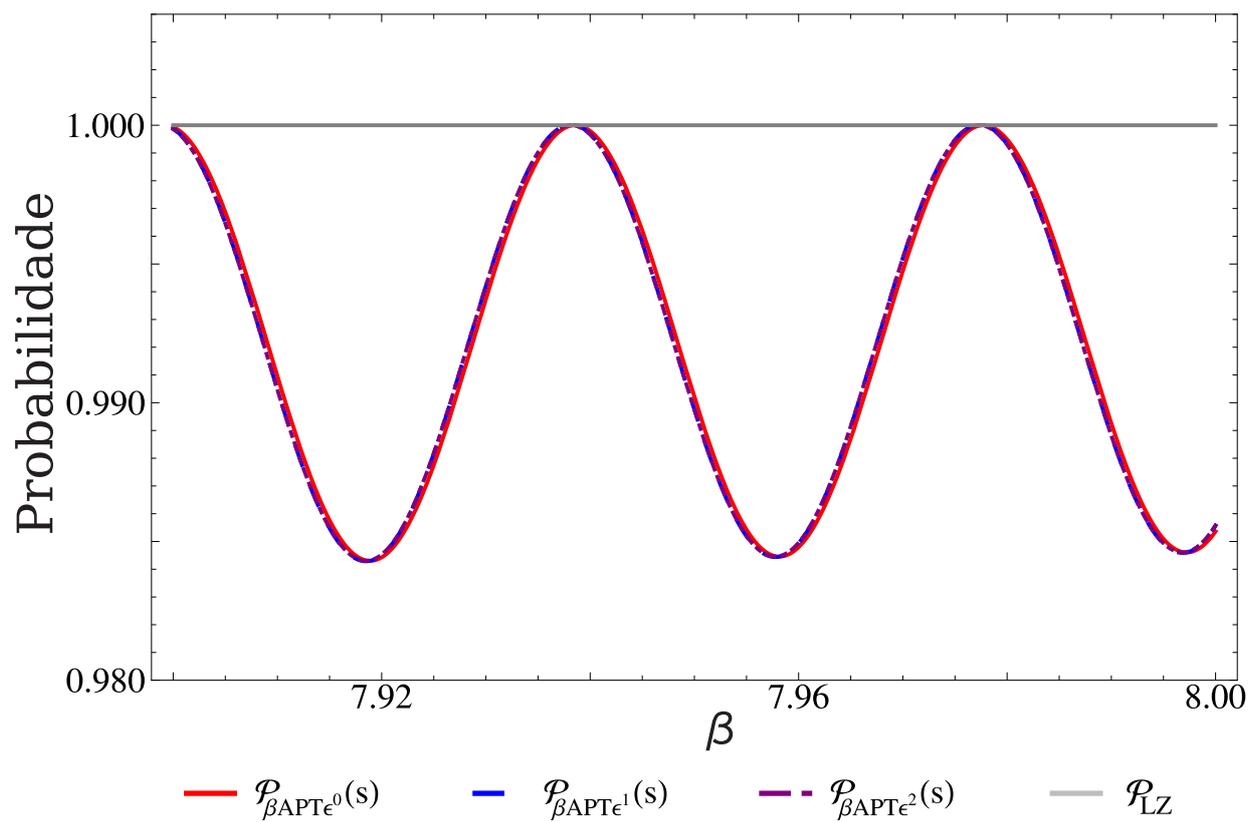


Figura 6.14: Probabilidade de transição considerando as expansões para  $\beta \gg 1$  e  $\epsilon = 0.1$ . Equações (5.78), (5.80) e (5.83) com a probabilidade de Landau-Zener, equação (5.2). Note que as curvas oscilam de 0.980 a 1.000, relativamente próximo de  $\mathcal{P}_{LZ}$  pois  $\beta \approx 8$  já pode ser considerado o limite assintótico do tempo.

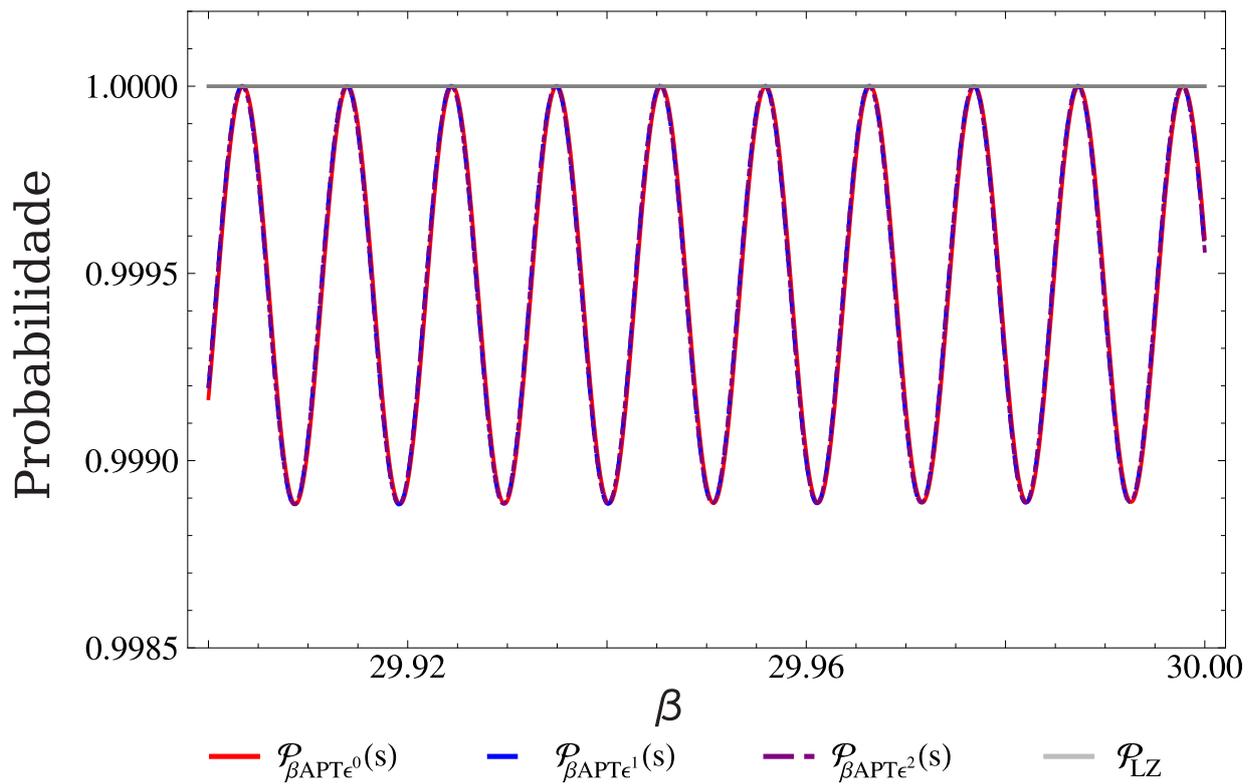


Figura 6.15: Probabilidade de transição considerando as expansões para  $\beta \gg 1$  e  $\epsilon = 0.1$ . Equações (5.78), (5.80) e (5.83) com a probabilidade de Landau-Zener, equação (5.2). Note que as curvas oscilam de 0.9988 a 1.0000, mais próximo de  $\mathcal{P}_{\text{LZ}}$ .  $\beta \approx 30$  pode ser considerado o limite assintótico do tempo.

# Capítulo 7

## Conclusão

Poucos são os sistemas físicos com Hamiltonianas com dependência explícita no tempo que possuem solução analítica e é por isso que o uso de soluções aproximadas tornou-se uma ferramenta extremamente útil para se poder entender a dinâmica destes sistemas. Nesta dissertação nosso objetivo central foi estudar e comparar dois métodos perturbativos para se encontrar a solução de sistemas físicos descritos por Hamiltonianas dependentes do tempo. Em particular, estudamos Hamiltonianas que podem ser separadas em um termo independente do tempo e outro dependente do tempo.

A teoria da perturbação dependente do tempo usualmente estudada nos livros textos (veja seção 2.1) foi desenvolvida exatamente para esse tipo de Hamiltoniana. A teoria da perturbação adiabática (veja seção 2.2), por sua vez, abre mão dessa hipótese, e somente exige que o cálculo dos autoestados e autoenergias da Hamiltoniana instantânea (para tempos fixos) seja analítica ou numericamente viável. Em outras palavras, a teoria de perturbação adiabática transforma um problema dependente do tempo numa sequência de problemas independentes do tempo. Aqui, nesta dissertação, utilizamos as duas teorias de perturbação acima descritas para resolver dois tipos de Hamiltonianas. Uma delas limitada/cíclica, equação (3.1), e a outra relacionada ao problema de Landau-Zener, equação (5.1), que possui uma dependência linear no tempo e portanto não limitada.

A Hamiltoniana limitada foi estudada na seção 3.1 via a teoria de perturbação usual, onde calculamos as funções de onda perturbativas até ordem 1 bem como as respectivas probabilidades de transição. Estudamos vários regimes, incluindo regimes perto e na ressonância. Verificamos que as probabilidades de transição obtidas fora da ressonância tenderam exatamente aos valores obtidos impondo desde o início as condições que nos levam aos regimes perto e na ressonância, realçando a consistência de todos cálculos feitos

até aquele ponto da dissertação.

Posteriormente, na seção 3.2, determinamos a solução aproximada para a Hamiltoniana cíclica usando a teoria de perturbação adiabática. Fomos até ordem 1 e com as funções de onda aproximadas calculamos as respectivas probabilidades de transição. A teoria da perturbação adiabática, no entanto, não nos permitiu analisar o que ocorre exatamente na ressonância, uma vez que a condição de ressonância faz com que o sistema esteja muito além do regime adiabático ou quase-adiabático. Com isso, o parâmetro perturbativo associado à teoria de perturbação adiabática é maior do que um, inviabilizando um ataque perturbativo na solução do problema neste regime.

Finalizamos nosso estudo da Hamiltoniana cíclica no capítulo 4, onde comparamos a probabilidade de transição calculada por meio das duas teorias de perturbação com a obtida através da solução exata do problema. Comparamos também a fidelidade dos estados quânticos obtidos via teorias de perturbação com o estado obtido via solução exata. Após extensa análise, concluímos que a teoria da perturbação adiabática apresentou os melhores resultados, principalmente quando expandimos a normalização da função de onda aproximada até segunda ordem. Acreditamos que se usarmos a normalização exata da função de onda perturbada até ordem 1 em  $v$ , os resultados serão ainda melhores.

Na seção 5 apresentamos a Hamiltoniana de Landau-Zener como originalmente se vê na literatura científica atual. Em seguida reescrevemos a escala de tempo da Hamiltoniana, para que o início da evolução temporal acontecesse a partir do tempo zero. Com essa reescala deixamos a Hamiltoniana de Landau-Zener pronta para ser resolvida via os métodos perturbativos aqui apresentados. Conseguimos reproduzir em todos seus detalhes matemáticos as soluções analíticas para esta Hamiltoniana por três métodos distintos encontrados na literatura. Um deles nos dá a solução exata para tempos finitos e os outros dois no limite assintótico. Com a solução exata para tempos finitos obtida na seção 5.1 pudemos comparar esta solução com àquelas advindas das duas teorias de perturbação e calculadas nos capítulos seguintes. Vale a pena realçar que a solução exata para tempos finitos é fundamental para que possamos comparar com a solução aproximada obtida via a teoria usual de perturbação dependente do tempo. De fato, para tempos muito grandes, lembrando que o problema de Landau-Zener é linear no tempo, não teremos mais a parte dependente do tempo da Hamiltoniana pequena se comparada à parte independente do tempo, condição esta fundamental para se aplicar tal teoria de perturbação.

Na seção 5.1 também mostramos que a aproximação adiabática do modelo de Landau-Zener, que para ser uma boa aproximação da solução exata deve satisfazer a relação (5.30),

é idêntica a ordem zero proveniente da teoria da perturbação adiabática. Essa análise nos ajudou a compreender porque a probabilidade de transição assintótica da teoria de perturbação adiabática não recupera exatamente a probabilidade de transição assintótica de Landau-Zener, Eq. (5.2). De fato, para que a teoria de perturbação adiabática possa ser empregada, devemos supor  $\epsilon \ll 1$ , uma das condições necessárias para a validade da aproximação adiabática. Por outro lado, ao tomarmos o limite assintótico ( $\beta \gg 1$ ) para a probabilidade de transição obtida via teoria de perturbação adiabática, obtemos o valor 1 e não aquele dado pela equação (5.2). No entanto, ao incluirmos a hipótese de que  $\epsilon \ll 1$  na equação (5.2), obtemos o valor 1, mesmo resultado do limite assintótico da teoria de perturbação adiabática. Esse é mais um exemplo que ilustra a consistência da teoria de perturbação adiabática.

Na seção 5.2 determinamos a função de onda perturbada e sua respectiva probabilidade de transição utilizando a teoria padrão para o modelo de Landau-Zener. Como já dissemos, esse método perturbativo não permite calcular a transição de Landau-Zener no limite assintótico, porque ele só é válido para tempo muito pequeno. Na seção 5.3 encontramos as funções de onda e as probabilidades de transição usando a teoria de perturbação adiabática. Verificamos, no capítulo 6, que as soluções aproximadas via teoria de perturbação adiabática dão correções importantes à aproximação adiabática que de fato são necessárias para se descrever bem a dinâmica do sistema quando deixamos o regime de validade da aproximação adiabática.

No capítulo 6 verificamos também o seguinte fato ao se estudar as probabilidades de transição no regime em que  $\beta < 1$ . Notamos que os melhores resultados perturbativos, mais próximos da solução exata, nem sempre foram obtidos ao expandirmos a normalização das soluções perturbadas até ordem dois, principalmente os casos provenientes da teoria de perturbação adiabática, que apresentavam resultados iguais ou piores de quando expandimos a normalização até primeira ordem. No entanto, para  $\beta > 1$  as probabilidades de transição apresentaram o comportamento esperado, isto é, quanto mais termos incluímos da expansão da normalização, melhores os resultados. Vale lembrar que para  $\beta > 1$  consideramos somente a teoria de perturbação adiabática, já que a teoria padrão não se aplica nesse regime, como já dissemos acima. Em contraposição à análise descrita acima para as probabilidades de transição, para a fidelidade os melhores resultados foram obtidos expandindo-se a normalização até segunda ordem.

Os resultados descritos acima para a Hamiltoniana de Landau-Zener bem como aqueles obtidos para a Hamiltoniana cíclica, mostram que ao lidarmos com o cálculo da fidelidade

entre o estado aproximado e o estado exato, devemos expandir a normalização da solução aproximada até ordem 2. Por outro lado, devemos expandir a normalização até primeira ordem para obtermos os melhores resultados quando queremos lidar com a probabilidade de transição.

Comparando a eficácia de ambas teorias perturbativas em fornecer uma boa solução aproximada para as duas Hamiltonianas estudadas, podemos afirmar que na maioria dos regimes estudados para a Hamiltoniana de Landau-Zener a teoria de perturbação adiabática demonstrou excelentes resultados até mesmo quando foram utilizados parâmetros não necessariamente favoráveis a validade da aproximação adiabática. Para a Hamiltoniana cíclica, a teoria de perturbação adiabática mostrou-se superior a teoria usual de perturbação dependente do tempo em praticamente todos os regimes estudados, mesmo quando os parâmetros utilizados favoreciam a teoria padrão.

Além disso, ao estudarmos a teoria de perturbação adiabática verificamos que o parâmetro perturbativo efetivo sempre possui a propriedade de ser uma frequência característica do sistema multiplicada pela constante de Planck e dividido por uma potência do gap de energia. De fato, temos  $\frac{\omega\hbar}{\alpha}$  para a Hamiltoniana limitada e  $\frac{\nu\hbar}{\Delta^2}$  para o modelo de Landau-Zener. Note que estas observações foram feitas para sistemas com dois níveis de energia. Seria interessante investigar se isso se mantém para sistemas com três ou mais níveis de energia.

Por fim, queremos listar algumas outras dúvidas que surgiram no decorrer da dissertação e que podem levar a novas linhas de investigação. Será que a expansão da normalização até terceira ordem, ou até mesmo a normalização exata da solução perturbada, melhora ou piora os resultados para as probabilidades de transição quando  $\beta \ll 1$  na Hamiltoniana de Landau-Zener? O que aconteceria se considerarmos a função de onda perturbada até ordem 2 em  $v$ ? Outro ponto interessante que merece mais investigação diz respeito ao limite assintótico da probabilidade de transição para a Hamiltoniana de Landau-Zener. De fato, mostramos que o limite assintótico da probabilidade de transição da teoria de perturbação adiabática até ordem 1 em  $v$  não tende ao valor assintótico da solução exata do problema de Landau-Zener. Como dissemos, isso ocorreu pois há uma hipótese extra ( $\epsilon \ll 1$ ) ao aplicarmos a teoria de perturbação adiabática. Gostaríamos, então, de saber se a expansão das funções parabólicas cilíndricas, que dão as soluções exatas do problema de Landau-Zener, ao supormos  $\epsilon \ll 1$ , além da hipótese usual de que  $\beta \gg 1$ , tendem ao resultado obtido via teoria de perturbação adiabática.

# Apêndice A

## Soluções do modelo de Landau-Zener

### A.1 Solução apresentada por Clarence Zener

Nesta seção vamos reproduzir a solução do problema de Landau-Zener resolvido por Zener no artigo [23]. Foram realizadas algumas alterações sobre o artigo original para que se adapte as notações atuais.

Clarence Zener, para analisar o cruzamento de níveis de energia, propôs uma molécula que apresentava dois possíveis estados: polar e apolar, e que possuía duas autofunções, sendo uma polar e outra apolar e elas invertiam suas características após o cruzamento de nível. Assim o estado final da molécula seria uma combinação linear das autofunções.

Além disso ele considerou que essas autofunções formavam dois estados,  $|\phi_1\rangle$  e  $|\phi_2\rangle$ , que eram respectivamente puramente polar e apolar em todo o tempo, mas esses estados não eram autofunções da Hamiltoniana, logo

$$\begin{aligned}\mathbf{H}|\phi_1\rangle &= \varepsilon_1|\phi_1\rangle + \varepsilon_{12}|\phi_2\rangle, \\ \mathbf{H}|\phi_2\rangle &= \varepsilon_{12}|\phi_1\rangle + \varepsilon_2|\phi_2\rangle.\end{aligned}\tag{A.1}$$

Considerou que a região de transição era muito pequena de tal forma que  $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$  era linear no tempo e nessa região  $\varepsilon_{12}$  e os estados polar e apolar não variavam no tempo, portanto

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 - \varepsilon_2 &= -\hbar\nu t, \\ \dot{\varepsilon}_{12} = |\dot{\phi}_1\rangle &= |\dot{\phi}_2\rangle = 0.\end{aligned}\tag{A.2}$$

Note que no artigo original Zener usou  $\alpha$  ao invés de  $-\nu$ .

Considerando que a aproximação entre os níveis de energia ocorrem a velocidade cons-

tante, temos que as autoenergias da Hamiltoniana são hipérboles tendo  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  como assíntotas e a menor distância entre esses níveis sendo  $2\varepsilon_{12}$ , que definiremos como

$$\varepsilon_{12} = \frac{\Delta}{2}. \quad (\text{A.3})$$

Na base  $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$  a Hamiltoniana é

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1(t) & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_2(t) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Se  $\varepsilon_{12} = 0$  a Hamiltoniana seria trivialmente resolvida através da equação de Schrödinger com a solução sendo uma constante vezes uma fase dado pela integral da energia. Desse modo, pode-se supor como solução da equação de Schrödinger para a Hamiltoniana (A.4)

$$|\psi(t)\rangle = C_1(t)e^{-\frac{i}{\hbar} \int \varepsilon_1 dt} |\phi_1\rangle + C_2(t)e^{-\frac{i}{\hbar} \int \varepsilon_2 dt} |\phi_2\rangle. \quad (\text{A.5})$$

Essa função de onda difere por um sinal de menos na fase da função proposta por Zener porque ele considerou a equação de Schrödinger como sendo  $\mathbf{H}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle$ , ou seja, com o sinal trocado em relação a forma tradicional da equação de Schrodinger. Substituindo (A.5) e (A.3) em (2.2) encontramos

$$\begin{cases} i\hbar \dot{C}_1(t) = \frac{\Delta}{2} C_2(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) dt}, \\ i\hbar \dot{C}_2(t) = \frac{\Delta}{2} C_1(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) dt}. \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

A condição inicial é que em  $t = -\infty$  o sistema esteja no estado  $|\phi_2\rangle$ . Com isso

$$|C_1(-\infty)|^2 = 0, \quad (\text{A.7})$$

$$|C_2(-\infty)|^2 = 1, \quad (\text{A.8})$$

onde a probabilidade de transição é  $\mathcal{P} = |C_1(\infty)|^2$ .

Com intuito de encontrar os valores de  $C_1(t)$  e  $C_2(t)$  eliminamos o acoplamento do conjunto de equações (A.6) derivando a primeira linha em  $t$  e utilizando a segunda linha:

$$\ddot{C}_1(t) + i\nu t \dot{C}_1(t) + \frac{\Delta^2}{4\hbar^2} C_1(t) = 0, \quad (\text{A.9})$$

onde utilizamos (A.2). Fazendo a mudança de variável

$$C_1(t) = U(t)e^{-\frac{i\nu t^2}{4}}, \quad (\text{A.10})$$

eliminamos a primeira derivada e obtemos  $\ddot{U}(t) + \left[ \frac{\Delta^2}{4\hbar^2} - \frac{i\nu}{2} + \frac{\nu^2 t^2}{4} \right] U(t) = 0$ . Por fim definindo

$$z = \nu^{\frac{1}{2}} t e^{-\frac{i\pi}{4}} \quad (\text{A.11})$$

resulta em

$$\frac{d^2}{dz^2} U(z) + \left[ \frac{i\Delta^2}{4\nu\hbar^2} + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4} \right] U(z) = 0. \quad (\text{A.12})$$

As funções parabólicas cilíndricas ou de Weber-Hermite, equação (B.2), são a solução da equação (A.12). Devemos agora impor a condição inicial (A.7) para chegar a conclusão do problema físico que queremos resolver.

Para descobrirmos qual função parabólica desaparece em  $t \rightarrow -\infty$  consideramos os quatro possíveis valores de  $U(z)$ . Para isso utilizamos a expansão assintótica das funções parabólicas cilíndricas (B.8). Inicialmente para  $U(z) = b_{\pm} D_{in}(\pm z)$ , com  $n = \frac{\Delta^2}{4\nu\hbar^2}$  real, temos, usando (A.11)

$$\begin{aligned} C_1(z) &= e^{\frac{z^2}{4}} b_{\pm} e^{-\frac{(\pm z)^2}{4}} (\pm z)^{in} \\ &= b_{\pm} (\pm z)^{in}, \\ |C_1(z)|^2 &= |b_{\pm}|^2 |(\pm z)^{in}|^2 \\ &= |b_{\pm}|^2 |t^{in}|^2 |(\pm\sqrt{\nu}e^{-i\frac{\pi}{4}})^{in}|^2 \\ &= |b_{\pm}|^2 |(\pm\sqrt{\nu}e^{-i\frac{\pi}{4}})^{in}|^2 \neq 0. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

A última equação acima não se anula para  $t \rightarrow -\infty$ , pois o  $t^{in}$  é um número real elevado a um imaginário puro que possui norma igual a 1:  $|t^{in}|^2 = (t)^{in}(t)^{-in} = 1$ .

Considerando agora  $U(z) = a_{\pm} D_{-in-1}(\pm iz)$  temos

$$\begin{aligned}
C_1(z) &= e^{\frac{z^2}{4}} a_{\pm} e^{-\frac{(\pm iz)^2}{4}} (\pm iz)^{-in-1} \\
&= a_{\pm} e^{\frac{z^2}{2}} \frac{(\pm iz)^{in}}{\pm iz} \\
&= a_{\pm} e^{\frac{-i\nu t^2}{2}} \frac{t^{in} (\pm \sqrt{\nu} e^{i\frac{\pi}{4}})^{in}}{\pm t \sqrt{\nu} e^{i\frac{\pi}{4}}}, \\
|C_1(t)|^2 &= |a_{\pm}|^2 |e^{\frac{-i\nu t^2}{2}} t^{in}|^2 \left| \frac{(\pm \sqrt{\nu} e^{i\frac{\pi}{4}})^{in}}{\sqrt{\nu} e^{i\frac{\pi}{4}}} \right|^2 \frac{1}{|t|^2} \\
&= |a_{\pm}|^2 \left| \frac{(\pm \sqrt{\nu} e^{i\frac{\pi}{4}})^{in}}{\sqrt{\nu} e^{i\frac{\pi}{4}}} \right|^2 \frac{1}{t^2}.
\end{aligned} \tag{A.14}$$

Note que agora  $|C_1(-\infty)|^2 \rightarrow 0$ . Portanto  $U(z) = a_{\pm} D_{-i\frac{\Delta^2}{4\nu\hbar^2}-1}(\pm iz)$  satisfaz a condição (A.7) e desse modo  $C_1(t)$  pode ser escrito de duas formas

$$C_1(t) = e^{-\frac{i\nu t^2}{4}} a_{\pm} D_{-i\frac{\Delta^2}{4\nu\hbar^2}-1}(\pm it \sqrt{\nu} e^{-i\frac{\pi}{4}}). \tag{A.15}$$

Resta agora calcular o valor da constante  $a_{\pm}$  que pode ser feito a partir da condição inicial (A.8). Para determinar  $C_2(t)$  utilizamos a segunda linha de (A.6). Com isso

$$\dot{C}_2(t) = \frac{\Delta}{2i\hbar} C_1(t) e^{\frac{i\nu t^2}{2}}. \tag{A.16}$$

Nós queremos somente  $C_2(-\infty)$ , portanto usaremos novamente a expansão assintótica da função parabólica cilíndricas (B.8) na equação (A.15), onde devemos levar em conta que  $\nu > 0$ .

Analisando as duas possibilidades para  $C_1(t \gg 1)$ , compatíveis com  $\nu > 0$ , e lembrando que  $\frac{\Delta^2}{4\nu\hbar^2} = n$ , obtemos as seguintes expressões para (A.16) após realizarmos a integração no tempo:

$$\begin{aligned}
C_2(t \rightarrow -\infty) &\approx -\frac{2a_+ \sqrt{\nu} \hbar}{\Delta} \left( e^{\frac{\pi\Delta^2}{16\nu\hbar^2} + \frac{3i\pi}{4}} (\sqrt{\nu} t)^{-\frac{i\Delta^2}{4\nu\hbar^2}} \right) && \text{para } a_+, \\
C_2(t \rightarrow -\infty) &\approx \frac{2a_- \sqrt{\nu} \hbar}{\Delta} \left( e^{-\frac{3\pi\Delta^2}{16\nu\hbar^2} + \frac{3i\pi}{4}} (\sqrt{\nu} t)^{-\frac{i\Delta^2}{4\nu\hbar^2}} \right) && \text{para } a_-.
\end{aligned} \tag{A.17}$$

Com condição inicial (A.8) encontramos os valores das constantes  $a_{\pm}$  tomando o módulo quadrado e simplificando,

$$|a_+|^2 = \frac{\Delta^2 e^{-\frac{5\pi\Delta^2}{8\nu\hbar^2}}}{4\nu\hbar^2}, \quad (\text{A.18})$$

$$|a_-|^2 = \frac{\Delta^2 e^{-\frac{\pi\Delta^2}{8\nu\hbar^2}}}{4\nu\hbar^2}. \quad (\text{A.19})$$

Dessa forma, a função solução do problema de Landau-Zener, equação (A.15), está completa. Resta agora calcularmos a probabilidade de transição no limite assintótico.

Para obtermos a probabilidade calculamos o módulo quadrado da equação (A.15). Contudo, podemos transformar as funções parabólicas cilíndricas através funções (B.10) e (B.11), dependendo da fase do argumento da função parabólica cilíndrica.

No caso, para  $+it\sqrt{\nu}e^{-i\frac{\pi}{4}}$  o argumento é  $\frac{\pi}{4}$  e para  $-it\sqrt{\nu}e^{-i\frac{\pi}{4}}$  temos  $-\frac{3\pi}{4}$ . Portanto usaremos somente a transformação (B.11) e consideramos apenas  $-it\sqrt{\nu}e^{-i\frac{\pi}{4}}$ .

A probabilidade de transição é tomada em  $t \rightarrow \infty$ , por isso usaremos novamente a expansão das parabólicas cilíndricas, equação (B.8). Desse modo obtemos

$$C_1(t) \approx a_- e^{-\frac{1}{4}i\nu t^2} \left( (\sqrt{\nu}t)^{-1 - \frac{i\Delta^2}{4\nu\hbar^2}} e^{\left(-\frac{3}{16}\pi\left(\frac{\Delta^2}{\nu\hbar^2} - 4i\right) - \frac{1}{4}i\nu t^2\right)} + \frac{\sqrt{2\pi} e^{-\frac{\pi\Delta^2}{16\nu\hbar^2} + \frac{1}{4}i\nu t^2} (\sqrt{\nu}t)^{\frac{i\Delta^2}{4\nu\hbar^2}}}{\Gamma\left(1 + \frac{i\Delta^2}{4\nu\hbar^2}\right)} \right), \quad (\text{A.20})$$

calculando o  $\lim_{t \rightarrow \infty} |C_1(t)|^2$  obtemos

$$|C_1(\infty)|^2 \approx \frac{2\pi |a_-|^2 e^{-\frac{\pi\Delta^2}{8\nu\hbar^2}}}{\Gamma\left(1 - \frac{i\Delta^2}{4\nu\hbar^2}\right) \Gamma\left(\frac{1+i\Delta^2}{4\nu\hbar^2}\right)}. \quad (\text{A.21})$$

Usando que  $\frac{1}{\Gamma(1+ix)\Gamma(1-ix)} = \frac{\sinh(\pi x)}{\pi x}$  e substituindo  $a_-$  por (A.19) encontramos

$$|C_1(\infty)|^2 \approx 1 - e^{-\frac{\pi\Delta^2}{2\nu\hbar^2}}. \quad (\text{A.22})$$

A equação (A.22) é a probabilidade de Landau-Zener (5.2) obtida por Zener através das expansões das funções parabólicas cilíndricas.

## A.2 Solução apresentada por Le Tuan Anh Ho e Liviu F. Chibotaru

A solução para modelo de Landau-Zener apresentada por Ho e Chibotaru [26] é inspirada pela elegante solução apresentada por Wittig [27] corrigindo o comportamento assintótico das autofunções. Consideramos a Hamiltoniana de Landau-Zener (5.1) como proposto na seção 5, ou seja,  $\nu$  e  $\Delta$  maior que zero. Supondo que a solução das autofunções possua a forma

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t) |\uparrow\rangle + c_2(t) |\downarrow\rangle \quad (\text{A.23})$$

e substituindo na equação de Schrödinger (2.2) temos

$$\dot{c}_1(t) = -\frac{i\nu}{2\hbar}c_1(t) - \frac{i\Delta}{2\hbar}c_2(t), \quad (\text{A.24})$$

$$\dot{c}_2(t) = -\frac{i\Delta}{2\hbar}c_1(t) + \frac{i\nu}{2\hbar}c_2(t). \quad (\text{A.25})$$

Derivando em  $t$  a equação (A.24) e manipulando utilizando (A.25) encontramos

$$\ddot{c}_1 + \left( \frac{i\nu}{2\hbar} + \frac{\Delta^2}{4\hbar^2} + \frac{\nu^2 t^2}{4\hbar^2} \right) c_1(t) = 0 \quad (\text{A.26})$$

Fisicamente falando para  $t \rightarrow \infty$  o módulo de  $c_1$  não diverge, pois está associado a probabilidade de transição. Portanto para tempos muito grande podemos escrever  $c_1(t) = |c_1|e^{-i\phi(t)}$  que substituindo em (A.26) dá

$$\left( -i\ddot{\phi} - \dot{\phi}^2 + \frac{i\nu}{2\hbar} + \frac{\Delta^2}{4\hbar^2} + \frac{\nu^2 t^2}{4\hbar^2} \right) c_1(t) = 0. \quad (\text{A.27})$$

Separando em partes real e imaginária encontramos

$$\begin{cases} \dot{\phi} = \pm \frac{1}{2\hbar} \sqrt{\Delta^2 + \nu^2 t^2}, \\ \ddot{\phi} = \frac{\nu}{2\hbar}, \end{cases} \quad (\text{A.28})$$

que pode ser reduzida para

$$\begin{cases} \dot{\phi} = \frac{\nu t}{2\hbar} \sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{\nu^2 t^2}}, \\ \ddot{\phi} = \frac{\nu}{2\hbar}. \end{cases} \quad (\text{A.29})$$

Por causa de  $t$  ser muito grande a função (A.29) pode ser aproximada para

$$\dot{\phi} \approx \frac{\nu t}{2\hbar} \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\nu^2 t^2} \right) = \frac{\nu t}{2\hbar} + \frac{1}{4\hbar} \frac{\Delta^2}{\nu t} \quad \text{se } t \rightarrow \pm\infty. \quad (\text{A.30})$$

Agora, calculando a razão entre  $\dot{c}_1(t)$  e  $c_1(t)$  temos

$$\left. \frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)} \right|_{t \rightarrow \pm\infty} = -i\dot{\phi}_{t \rightarrow \pm\infty} = -i \left( \frac{\nu t}{2\hbar} + \frac{1}{4\hbar} \frac{\Delta^2}{\nu t} \right). \quad (\text{A.31})$$

Supondo que  $\frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)}$  é bem comportado no eixo dos reais, esta razão pode ser analiticamente expandida para o domínio de integração dos complexos e em especial que seja analítica sobre o domínio definido pelo caminho fechado  $\gamma$ . Considerando o caminho  $\gamma$  um semicírculo com a base nos reais e usando o teorema integral de Cauchy temos

$$\int_{\gamma} \frac{\dot{c}_1(z)}{c_1(z)} dz = 0 \quad \Rightarrow \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)} dt = - \int_C \frac{\dot{c}_1(z)}{c_1(z)} dz, \quad (\text{A.32})$$

com o caminho  $C$  do lado direito da equação sendo o semicírculo centrado em  $z = 0$  no sentido anti-horário se considerarmos  $\gamma$  contido no plano acima do eixo, ou no sentido horário se estiver abaixo do eixo. A integral em relação a  $t$  pode ser facilmente resolvida:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)} dt = \ln \left( \frac{c_1(+\infty)}{c_1(-\infty)} \right). \quad (\text{A.33})$$

Definimos por hipótese que  $\frac{\dot{c}_1(z)}{c_1(z)}$  é analítica no domínio definido por  $\gamma$ . Portanto, como  $\left. \frac{\dot{c}_1(z)}{c_1(z)} \right|_{|z| \rightarrow \infty} = -i \left( \frac{\nu z}{2\hbar} + \frac{1}{4\hbar} \frac{\Delta^2}{\nu z} \right)$  temos ao definir o caminho  $C : z = R e^{i\theta}$  com  $R \rightarrow \infty$  e  $dz = i R e^{i\theta} d\theta$ ,

$$-\int_C \frac{\dot{c}_1(z)}{c_1(z)} dz = i \int_C \left( \frac{\nu z}{2\hbar} + \frac{1}{4\hbar} \frac{\Delta^2}{\nu z} \right) dz \quad (\text{A.34})$$

$$= i \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\pm\pi} \frac{i\nu R^2 e^{2i\theta}}{2\hbar} + \frac{i\Delta^2}{4\hbar\nu} d\theta \quad (\text{A.35})$$

$$= \lim_{R \rightarrow \infty} \left[ \frac{i\nu R^2}{4\hbar} (e^{\pm i2\pi} - 1) - \frac{\Delta^2}{4\hbar\nu} (\pm\pi - 0) \right] \quad (\text{A.36})$$

$$= \mp \frac{\pi\Delta^2}{4\hbar\nu} \quad (\text{A.37})$$

Note que o limite superior da integral em (A.35),  $\pm\pi$ , representa o caminho horário ( $+\pi$ ) ou anti-horário ( $-\pi$ ).

Juntando os resultados de (A.33) e (A.37) obtemos

$$c_1(+\infty) = c_1(-\infty) e^{\mp \frac{\pi\Delta^2}{4\hbar\nu}}. \quad (\text{A.38})$$

Tomando o módulo quadrado da equação anterior obtemos a probabilidade de encontrarmos o estado  $|\uparrow\rangle$  e, considerando que  $|c_1(-\infty)|^2 = 1$ , temos

$$|c_1(+\infty)|^2 = e^{\mp \frac{\pi\Delta^2}{2\hbar\nu}}. \quad (\text{A.39})$$

A probabilidade deve sempre ser menor do que 1. Então, para qualquer valor de  $\Delta$  e  $\nu > 0$  a solução física correta é aquela onde temos o sinal negativo. Consequentemente o caminho  $C$  a ser considerado deverá ser o anti-horário.

A probabilidade de encontrarmos o estado  $|\downarrow\rangle$  é  $1 - |c_1(+\infty)|^2$ . Portanto, a probabilidade de transição de Landau-Zener é

$$\mathcal{P}_{LZ} = 1 - e^{-\frac{\pi\Delta^2}{2\hbar\nu}}. \quad (\text{A.40})$$

# Apêndice B

## Funções Parabólicas Cilíndricas

As funções parabólicas cilíndricas [29–32] são funções que satisfazem as equações diferenciais de Weber [30, 33]. Essas equações são originadas pela separação de variáveis da equação de Laplace em coordenadas parabólicas cilíndricas  $x_1 = \xi\eta$ ,  $x_2 = \frac{\xi^2}{2} - \frac{\eta^2}{2}$  e  $x_3 = \zeta$ , resultando nas equações

$$\frac{d^2\mathcal{U}}{d\xi^2} + (\lambda + \sigma\xi^2)\mathcal{U} = 0, \quad \frac{d^2\mathcal{V}}{d\eta^2} - (\lambda - \sigma\eta^2)\mathcal{V} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{d^2\mathcal{W}}{d\zeta^2} - (\sigma + f(\zeta))\mathcal{W} = 0. \quad (\text{B.1})$$

Se tivermos  $\lambda = -j - \frac{1}{2}$  e  $\sigma = -\frac{1}{4}$ , e  $\xi = iw$  ou  $\eta = -w$  encontramos que as duas primeiras equações podem ser escritas como

$$\frac{d^2}{dw^2} D_j(w) + \left[ j + \frac{1}{2} - \frac{w^2}{4} \right] D_j(w) = 0, \quad (\text{B.2})$$

cujas soluções  $D_j(w)$  são chamadas de funções parabólicas cilíndricas ou função de Weber-Hermite.

As funções parabólicas cilíndricas podem ser expressas em termos do confluyente da função hipergeométrica quando  $\arg(w) < \frac{3\pi}{4}$ ,

$$D_j(w) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) 2^{\frac{j}{2} + \frac{1}{4}} w^{-\frac{1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{j}{2}\right)} M_{\frac{j}{2} + \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}}\left(\frac{w^2}{2}\right) + \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) 2^{\frac{j}{2} + \frac{1}{4}} w^{-\frac{1}{2}}}{\Gamma\left(-\frac{j}{2}\right)} M_{\frac{j}{2} + \frac{1}{4}, \frac{1}{4}}\left(\frac{w^2}{2}\right) \quad (\text{B.3})$$

onde

$$M_{k,m}(w) = w^{\frac{1}{2}+m} e^{-\frac{w}{2}} \left\{ 1 + \frac{\frac{1}{2} + m - k}{1!(2m+1)} w + \frac{\left(\frac{1}{2} + m - k\right) \left(\frac{3}{2} + m - k\right)}{2!(2m+1)(2m+2)} w^2 + \dots \right\}. \quad (\text{B.4})$$

As funções  $D_j(w)$  possuem a seguinte propriedade

$$\frac{d}{dw} \left[ e^{\frac{w^2}{4}} D_j(w) \right] = j e^{\frac{w^2}{4}} D_{j-1}(w), \quad (\text{B.5})$$

que origina

$$\frac{d}{dw} D_j(w) + \frac{w}{2} D_j(w) = j D_{j-1}(w). \quad (\text{B.6})$$

O Wronskiano vale

$$W\{D_j(w), D_j(-w)\} \equiv D_j(w) \frac{dD_j(-w)}{dw} - D_j(-w) \frac{dD_j(w)}{dw} = \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-j)}. \quad (\text{B.7})$$

$D_j(w)$  possui várias expansões [30] mas a principal é feita por Whittakker e Watson [29],

$$D_j(w) \approx e^{-\frac{w^2}{4}} w^j \left\{ 1 - \frac{j(j-1)}{2w^2} + \frac{j(j-1)(j-2)(j-3)}{2.4 w^4} \right\}, \quad |\arg(w)| < \frac{3\pi}{4}. \quad (\text{B.8})$$

Substituindo  $w \rightarrow -w$  na equação diferencial (B.2) não acarreta alteração, pois  $\frac{d^2}{d(-w)^2} = \frac{d^2}{dw^2}$  e do mesmo modo se alterarmos  $w \rightarrow \pm iw$  juntamente com  $j \rightarrow -j - 1$  temos  $\frac{d^2}{d(\pm iw)^2} = -\frac{d^2}{dw^2}$  cuja substituição na equação diferencial (B.2) resulta em  $-\frac{d^2}{dw^2} D_{-j-1}(\pm iw) + \left( (-j-1) + \frac{1}{2} + \frac{w^2}{4} \right) D_{-j-1}(\pm iw)$ , recobrando a mesma equação após simplificação.

Conseqüentemente, se  $D_j(w)$  é solução então  $D_j(-w)$  também o é juntamente com  $D_{-j-1}(\pm iw)$ . Portanto, podemos escrever uma em função das outras. Utilizando a função parabólica cilíndrica (B.3) e observando as ordens de  $w$  podemos escrever as relações

$$D_j(w) = \frac{\Gamma(j+1)}{\sqrt{2\pi}} \left( e^{-\frac{i\pi}{2}j} D_{-j-1}(-iw) + e^{\frac{\pi i j}{2}} D_{-j-1}(iw) \right), \\ -\frac{5\pi}{4} < \arg(z) < \frac{3\pi}{4} \quad \text{ou} \quad -\frac{\pi}{4} < \arg(w) < \frac{\pi}{4}, \quad (\text{B.9})$$

$$D_j(w) = e^{i\pi j} D_j(-w) + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-j)} e^{\frac{1}{2}i\pi(j+1)} D_{-j-1}(-iw), \quad \frac{\pi}{4} < \arg(w) < \frac{5\pi}{4}, \quad (\text{B.10})$$

$$D_j(w) = e^{-i\pi j} D_j(-w) + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-j)} e^{-\frac{1}{2}i\pi(j+1)} D_{-j-1}(-iw), \quad -\frac{\pi}{4} > \arg(w) > \frac{3\pi}{4}. \quad (\text{B.11})$$



# Apêndice C

## Prova dos Cálculos

### C.1 Prova de $M_{nm}(s) = -M_{nm}^*(s)$

Os autoestados  $\{|n(s)\rangle\}$  são normalizados e completos,

$$\langle n(s) | m(s) \rangle = \delta_{nm}. \quad (\text{C.1})$$

Derivando ambos os lados em relação a  $s$  resulta em

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}(s) | m(s) \rangle + \langle n(s) | \dot{m}(s) \rangle &= 0, \\ \langle m(s) | \dot{n}(s) \rangle^* + \langle n(s) | \dot{m}(s) \rangle &= 0, \\ M_{mn}^*(s) + M_{nm}(s) &= 0, \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

onde usamos a relação (2.25) para obtermos equação acima.

### C.2 Prova do coeficiente $c_{\downarrow}(s)$

Na subseção 5.1 descobrimos  $c_{\uparrow}(s)$ , equação (5.19). No entanto os coeficientes de  $|\Psi_{LZ}(s)\rangle$  satisfazem um conjunto de equações diferenciais acopladas (5.8). Logo, para encontrarmos o coeficiente  $c_{\downarrow}(s)$  nos valeremos da primeira linha desse conjunto de equações. Inicialmente vamos encontrar  $\dot{c}_{\uparrow}(s)$  dependente das funções parabólicas cilíndricas, ou seja, iremos derivar em relação a  $s$  a equação (5.19). Utilizando que  $\frac{d}{ds} = \frac{dz}{ds} \frac{d}{dz}$  e  $\frac{d(-z)}{ds} = -\frac{dz}{ds}$  e para simplificar chamando  $-\frac{i}{4\epsilon} = j$  encontramos

$$\dot{c}_{\uparrow}(s) = \left[ a \frac{d}{dz} [D_j(z)] - b \frac{d}{d(-z)} [D_j(-z)] \right] \frac{dz}{ds} \quad (\text{C.3})$$

e, usando a relação (B.6), chegamos a

$$\dot{c}_\uparrow(s) = [aD_{j-1}(z) - bD_{j-1}(-z)]j \frac{dz}{ds} - [aD_j(z) + bD_j(-z)] \frac{z}{2} \frac{dz}{ds}. \quad (\text{C.4})$$

Reconhecendo que o termo que esta entre colchetes multiplicado pelo fator  $\frac{z}{2} \frac{dz}{ds}$  é exatamente  $c_\uparrow(s)$ , equação (5.19), multiplicando por  $i$ , reduzimos a equação a

$$i\dot{c}_\uparrow(s) = i[aD_{j-1}(z) - bD_{j-1}(-z)]j \frac{dz}{ds} - ic_\uparrow(s) \frac{z}{2} \frac{dz}{ds}. \quad (\text{C.5})$$

Substituindo a equação anterior (C.5) em (5.8) encontramos

$$c_\downarrow(s) = \frac{\epsilon}{\beta} [aD_{j-1}(z) - bD_{j-1}(-z)]i j \frac{dz}{ds} - \left[ i \frac{z}{2} \frac{dz}{ds} + \rho(s) \right] \frac{\epsilon}{\beta} c_\uparrow(s). \quad (\text{C.6})$$

Substituindo  $\rho(s)$  e  $z(s)$ , equações (5.9) e (5.20), respectivamente, e  $j = \frac{-i}{4\epsilon}$  encontramos o coeficiente  $c_\downarrow(s)$  da função de onda,

$$c_\downarrow(s) = \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} \left[ a D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(z) - b D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(-z) \right]. \quad (\text{C.7})$$

### C.3 Prova das constantes $a$ e $b$

Para provar os valores nas constantes escrevemos a função de onda solução do problema de Landau-Zener (5.7) na forma matricial, assim como a equação dos coeficientes *up* e *down*, equação (5.21), de modo que agrupando as duas em uma só encontramos

$$|\Psi_{LZ}(s)\rangle = \begin{pmatrix} c_\uparrow(s) \\ c_\downarrow(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(z) & D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(-z) \\ \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(z) & -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(-z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (\text{C.8})$$

Para simplificar representamos a segunda parte da igualdade como  $\mathbf{C}(s) = \mathbf{M}(z)\mathbf{A}$ , Desse modo podemos encontrar o valor das constantes multiplicando ambos lados da equação pelo inverso da matriz  $\mathbf{M}$ . Desse modo verificamos que  $\mathbf{A} = \mathbf{M}^{-1}(z)\mathbf{C}(s)$ , e para  $s = 0$  podemos definir exatamente os valores das constantes. Definindo  $z_0$  o valor de  $z$  para  $s = 0$  temos

$$\mathbf{M}^{-1}(z_0) = \frac{1}{\text{Det}[\mathbf{M}(z_0)]} \text{Cof}[\mathbf{M}(z_0)]^T. \quad (\text{C.9})$$

Resolvendo primeiramente o determinante e definindo  $-\frac{i}{4\epsilon} = j$  temos

$$\begin{aligned}
\text{Det} [\mathbf{M}(z_0)] &= -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} \left[ D_j(z_0)D_{j-1}(-z_0) + D_j(-z_0)D_{j-1}(z_0) \right], \\
&= -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} \left\{ D_j(z_0) \left[ \frac{j e^{\frac{(-z_0)^2}{4}}}{j e^{\frac{(-z_0)^2}{4}}} D_{j-1}(-z_0) \right] + D_j(-z_0) \left[ \frac{j e^{\frac{z_0^2}{4}}}{j e^{\frac{z_0^2}{4}}} D_{j-1}(z_0) \right] \right\}, \\
&= -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon} j e^{\frac{z_0^2}{4}}} \left\{ D_j(z_0) \left[ j e^{\frac{(-z_0)^2}{4}} D_{j-1}(-z_0) \right] + D_j(-z_0) \left[ j e^{\frac{z_0^2}{4}} D_{j-1}(z_0) \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{C.10}$$

Aplicando a relação (B.5) na equação acima encontramos

$$\text{Det} [\mathbf{M}(z_0)] = -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon} j e^{\frac{z_0^2}{4}}} \left\{ D_j(z_0) \left[ -\frac{d}{dz_0} \left[ e^{\frac{(-z_0)^2}{4}} D_j(-z_0) \right] + D_j(-z_0) \left[ \frac{d}{dz_0} \left[ e^{\frac{z_0^2}{4}} D_j(z_0) \right] \right] \right\}. \tag{C.11}$$

Abrindo a derivada dos produtos encontramos que o determinante pode ser escrito como o Wronskiano (B.7) de  $D_j(z_0)$  e  $D_j(-z_0)$ . Assim obtemos

$$\begin{aligned}
\text{Det} [\mathbf{M}(z_0)] &= \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon} j} \left\{ D_j(z_0) \frac{d}{dz_0} [D_j(-z_0)] - D_j(-z_0) \left[ \frac{d}{dz_0} [D_j(z_0)] \right] \right\}, \\
&= \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon} j} W[D_j(z_0), D_j(-z_0)], \\
&= -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} \frac{\sqrt{2\pi}}{(-j)\Gamma(-j)}, \\
&= -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1-j)}.
\end{aligned} \tag{C.12}$$

Para finalizar substituimos o valor de  $j = -\frac{i}{4\epsilon}$  para alcançarmos o valor do determinante,

$$\text{Det} [\mathbf{M}(z_0)] = -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1 + \frac{i}{4\epsilon})}. \tag{C.13}$$

Para calcular a inversa da matriz  $\mathbf{M}$  resta somente calcular o transposto da matriz dos

cofatores. Para matrizes dois por dois temos que

$$\text{Cof}[\mathbf{X}] = \begin{pmatrix} (-1)^{1+1}x_{22} & (-1)^{1+2}x_{21} \\ (-1)^{2+1}x_{12} & (-1)^{2+2}x_{11} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.14})$$

no qual  $x_{ij}$  é o elemento  $i$   $j$  da matriz  $\mathbf{X}$ . A transposta do cofator fica

$$\text{Cof}[\mathbf{X}]^T = \begin{pmatrix} x_{22} & -x_{12} \\ -x_{21} & x_{11} \end{pmatrix} \quad (\text{C.15})$$

e desse modo

$$\text{Cof}[\mathbf{M}(z_0)]^T = \begin{pmatrix} -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(-z_0) & -D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(-z_0) \\ -\frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2\sqrt{\epsilon}} D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(z_0) & D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(z_0) \end{pmatrix}. \quad (\text{C.16})$$

Como encontramos o determinante e a matriz dos cofatores transposta  $\mathbf{M}(z_0)$ , equações (C.13) e (C.16) respectivamente, basta aplica-los na equação (C.9) para encontrarmos a inversa de  $\mathbf{M}(z_0)$ . Com isso encontramos os valores das constantes  $a$  e  $b$  a partir da relação  $\mathbf{A} = \mathbf{M}^{-1}(z_0)\mathbf{C}(0)$ ,

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\Gamma(1 + \frac{i}{4\epsilon})}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(-z_0) & 2\sqrt{\epsilon} e^{\frac{-i\pi}{4}} D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(-z_0) \\ D_{-\frac{i}{4\epsilon}-1}(z_0) & -2\sqrt{\epsilon} e^{\frac{-i\pi}{4}} D_{-\frac{i}{4\epsilon}}(z_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\uparrow}(0) \\ c_{\downarrow}(0) \end{pmatrix}, \quad (\text{C.17})$$

lembrando que  $z_0$  é o valor de  $z$  para  $s = 0$ , ou seja,  $z_0 = -\frac{\beta e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\epsilon}}$ .

## C.4 Prova das condições iniciais na base $\{|0(s)\rangle, |1(s)\rangle\}$

Os autoestados (5.60) podem ser escritos na forma matricial

$$\begin{pmatrix} |0(s)\rangle \\ |1(s)\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(2s-1)\beta-h(s)}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}\sqrt{(1-2s)\beta+h(s)}} & \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}\sqrt{(1-2s)\beta+h(s)}} \\ \frac{\sqrt{(2s-1)\beta+h(s)}}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}} & \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}\sqrt{(2s-1)\beta+h(s)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix}. \quad (\text{C.18})$$

Logo, os coeficientes  $|\uparrow(s)\rangle$  e  $|\downarrow(s)\rangle$  podem ser escritos em função dos autoestados multiplicando pelo inverso da matriz dos coeficientes, resultando em

$$\begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{-2s\beta+\beta+h(s)}}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}} & \frac{\sqrt{2s\beta-\beta+h(s)}}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}} \\ \frac{\sqrt{-2s\beta+\beta+h(s)}((2s-1)\beta+h(s))}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}} & \frac{(-2s\beta+\beta+h(s))\sqrt{2s\beta-\beta+h(s)}}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |0(s)\rangle \\ |1(s)\rangle \end{pmatrix}. \quad (\text{C.19})$$

Portanto

$$|\uparrow\rangle = -\frac{\sqrt{h(s) + \beta(1 - 2s)}}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}} |0(s)\rangle + \frac{\sqrt{h(s) + \beta(2s - 1)}}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}} |1(s)\rangle, \quad (\text{C.20})$$

$$\begin{aligned} |\downarrow\rangle = & \frac{\sqrt{h(s) + \beta(1 - 2s)}(h(s) + \beta(2s - 1))}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}} |0(s)\rangle \\ & + \frac{\sqrt{h(s) + (2s - 1)(h(s) + \beta(1 - 2s))}}{\sqrt{2}\sqrt{h(s)}} |1(s)\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

A condição inicial (5.3) nos diz que queremos

$$|\Psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle = b_0(0) |0(0)\rangle + b_1(0) |1(0)\rangle. \quad (\text{C.22})$$

Assim, usando (C.20) na equação anterior obtemos

$$\begin{aligned} b_0(0) &= -\frac{\sqrt{\beta + h(0)}}{\sqrt{2}\sqrt{h(0)}}, \\ b_1(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{h(0)}\sqrt{\beta + h(0)}}. \end{aligned}$$

Dividindo  $\frac{b_1(0)}{b_0(0)}$  encontramos

$$b_r(0) = -\frac{1}{\beta + h(0)},$$

que são as condições (5.68) da seção 5.3.



# Referências Bibliográficas

- 1 MESSIAH, A. **Quantum Mechamics**. Amsterdam: North-Holland, 1962.
- 2 RIGOLIN, G.; ORTIZ, G.; PONCE, V. H. Beyond the quantum adiabatic approximation: Adiabatic perturbation theory. **Physical Review A**, v. 78, n. 5, p. 052508, nov. 2008.
- 3 GRIFFITHS, D. **Introduction to Quantum Mechanics**. [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2005. (Pearson international edition). ISBN 9780131911758.
- 4 NAYFEH, A. **Introduction to perturbation techniques**. [S.l.]: Wiley, 1981. (Wiley classics library). ISBN 9780471080336.
- 5 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics**. [S.l.]: Wiley, 1977. (Quantum Mechanics, v. 2).
- 6 RIGOLIN, G.; ORTIZ, G. Adiabatic perturbation theory and geometric phases for degenerate systems. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 104, p. 170406, Apr 2010.
- 7 ALBASH, T. et al. Quantum adiabatic markovian master equations. **New Journal of Physics**, v. 14, n. 12, p. 123016, 2012.
- 8 GRANDI, C. D.; POLKOVNIKOV, A.; SANDVIK, A. W. Microscopic theory of non-adiabatic response in real and imaginary time. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 25, n. 40, p. 404216, 2013.
- 9 MARAGA, A. et al. Nonadiabatic stationary behavior in a driven low-dimensional gapped system. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 90, p. 041111, Jul 2014.
- 10 CARR, L. **Understanding Quantum Phase Transitions**. [S.l.]: CRC Press, 2010. (Condensed Matter Physics). ISBN 9781439802618.
- 11 BERRY, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 392, n. 1802, p. 45–57, 1984. ISSN 0080-4630.

- 12 MARZLIN, K.-P.; SANDERS, B. C. Inconsistency in the application of the adiabatic theorem. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 93, p. 160408, Oct 2004.
- 13 MARZLIN, K.-P.; SANDERS, B. C. Marzlin and sanders reply:. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 97, p. 128903, Sep 2006.
- 14 TONG, D. M. et al. Quantitative conditions do not guarantee the validity of the adiabatic approximation. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 95, p. 110407, Sep 2005.
- 15 TONG, D. M. et al. Sufficiency criterion for the validity of the adiabatic approximation. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 98, p. 150402, Apr 2007.
- 16 JANSEN, S.; RUSKAI, M.-B.; SEILER, R. Bounds for the adiabatic approximation with applications to quantum computation. **Journal of Mathematical Physics**, v. 48, n. 10, p. –, 2007.
- 17 MACKENZIE, R. et al. Validity of the adiabatic approximation in quantum mechanics. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 76, p. 044102, Oct 2007.
- 18 RAEDT, H. D. et al. Theory of quantum tunneling of the magnetization in magnetic particles. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 56, p. 11761–11768, Nov 1997.
- 19 SPREEUW, R. J. C. et al. Classical realization of a strongly driven two-level system. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 65, p. 2642–2645, Nov 1990.
- 20 FRIEDMAN, R. S.; ALLISON, T. C.; TRUHLAR, D. G. Exciplex funnel resonances in chemical reaction dynamics: The nonadiabatic tunneling case associated with an avoided crossing at a saddle point. **Phys. Chem. Chem. Phys.**, The Royal Society of Chemistry, v. 1, p. 1237–1247, 1999.
- 21 SAITO, K. et al. Dissipative landau-zener transitions of a qubit: Bath-specific and universal behavior. **Physical Review B**, v. 75, n. 21, p. 214308, jun 2007.
- 22 LANDAU, L. D. Zur theorie der energieubertragung. ii. **Physics of the Soviet Union**, v. 2, n. 46-51, p. 28, 1932.
- 23 ZENER, C. Non-adiabatic crossing of energy levels. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 137, n. 833, p. 696–702, 1932. ISSN 0950-1207.
- 24 STUECKELBERG, E. Theorie der unelastischen stösse zwischen atomen. **Helvetica Physica Acta**, v. 5, p. 369, 1932.
- 25 MAJORANA, E. Atomi orientati in campo magnetico variabile. **Il Nuovo Cimento (1924-1942)**, Società Italiana di Fisica, v. 9, n. 2, p. 43–50, 1932.

- 26 HO, L. T. A.; CHIBOTARU, L. F. A simple derivation of the landau-zener formula. **Phys. Chem. Chem. Phys.**, The Royal Society of Chemistry, v. 16, p. 6942–6945, 2014.
- 27 WITTIG, C. The landau-zener formula. **The Journal of Physical Chemistry B**, v. 109, p. 8428–8430, 2005.
- 28 VITANOV, N. V.; GARRAWAY, B. M. Landau-zener model: Effects of finite coupling duration. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 53, p. 4288–4304, Jun 1996.
- 29 WHITTAKER, E.; WATSON, N. **A Course of Modern Analysis**. Fourth. [S.l.]: Cambridge University Press, 1996. ISBN 0521588073.
- 30 BATEMAN, H. **Higher Transcendental Functions**. [S.l.]: Mc Graw-Hill Book Company, Inc., 1953.
- 31 WEISSTEIN, E. W. **Parabolic Cylinder Function**. MathWorld – A Wolfram Web Resource. Disponível em: <<http://mathworld.wolfram.com/ParabolicCylinderFunction.html>>. Acesso em: ago 2015.
- 32 TEMME, N. M. **Parabolic Cylinder Function**. Digital Library of Mathematical Functions. Disponível em: <<http://dlmf.nist.gov/12>>. Acesso em: ago 2015.
- 33 WEISSTEIN, E. W. **Weber Differential Equations**. MathWorld – A Wolfram Web Resource. Disponível em: <<http://mathworld.wolfram.com/WeberDifferentialEquations.html>>. Acesso em: ago 2015.