

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS
MESTRADO EM CIÊNCIAS - FÍSICA**

DANILO CIUS

**SISTEMAS QUÂNTICOS DISCRETOS INCLUINDO SIMETRIA $SL(2, \mathbb{C})$ E
APLICAÇÕES EM RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR**

**PONTA GROSSA
2018**

DANILO CIUS

**SISTEMAS QUÂNTICOS DISCRETOS INCLUINDO SIMETRIA $SL(2, \mathbb{C})$ E
APLICAÇÕES EM RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências, área de concentração em Física, da Universidade Estadual de Ponta Grossa, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências-Física.

Orientador: Prof. Dr. Ruben Auccaise Estrada

**PONTA GROSSA
2018**

Ficha Catalográfica
Elaborada pelo Setor de Tratamento da Informação BICEN/UEPG

Cius, Danilo
C581 Sistemas quânticos discretos incluindo
 simetria $SL(2;C)$ e aplicações em
 ressonância magnética nuclear/ Danilo
 Cius. Ponta Grossa, 2018.
 95f.

 Dissertação (Mestrado em Ciências -
 Área de Concentração: Física),
 Universidade Estadual de Ponta Grossa.
 Orientador: Prof. Dr. Ruben Auccaise
 Estrada.

 1.Simetria dinâmica. 2.Spin.
 3.Não-hermiticidade. 4.RMN. I.Estrada,
 Ruben Auccaise. II. Universidade Estadual
 de Ponta Grossa. Mestrado em Ciências.
 III. T.

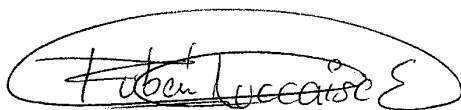
CDD: 530

TERMO DE APROVAÇÃO

DANILO CIUS

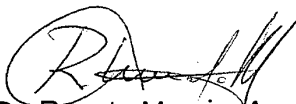
"SISTEMAS QUÂNTICOS DISCRETOS INCLUINDO SIMETRIA $SL(2, \mathbb{C})$ E APLICAÇÕES EM RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR"

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre no Programa de Pós-Graduação em Ciências - Física da Universidade Estadual de Ponta Grossa, pela seguinte banca examinadora.



Orientador:

Prof. Dr. Ruben Aucchaia Estrada
Departamento de Física, UEPG/PR



Prof. Dr. Renato Moreira Angelo
Departamento de Física, UFPR



Prof. Dr. Fabiano Manoel de Andrade
Departamento de Matemática UEPG/PR

Ponta Grossa, 27 de fevereiro de 2018.

Dedicado à minha Família e Amigos

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Dr. Ruben Auccaise Estrada pela orientação e dedicação no presente trabalho, ao conhecimento compartilhado durante as discussões e também pela amizade construída ao longo deste período.

Em especial, agradeço ao Prof. Dr. Antonio Sérgio Magalhães de Castro pela inspiração, pela disposição em discutir ideias, por toda a dedicação e ajuda durante o tempo em que temos trabalhado juntos, bem como pela grande amizade prestada.

Gostaria de agradecer aos colegas e amigos do departamento, pelas conversas de bar e discussões sobre Física.

Meu maior agradecimento fica aos meus familiares por todo o apoio dado durante a minha formação.

Também agradeço a CAPES pelo fomento.

*"Nobody ever figures out what life is all about,
and it doesn't matter. Explore the world.
Nearly everything is really interesting if
you go into it deeply enough."
(Richard Feynman)*

RESUMO

CIUS, Danilo. Sistemas Quânticos Discretos Incluindo Simetria $SL(2, \mathbb{C})$ e Aplicações em Ressonância Magnética Nuclear. 2018. 95f. Dissertação (Mestrado em Ciências-Física) - Universidade Estadual de Ponta Grossa. Ponta Grossa, 2018.

Este trabalho tem como principal objetivo investigar a dinâmica de $spin-1/2$ no contexto de sistemas quânticos não-hermitianos. Propõe-se um modelo fenomenológico heurístico que inclui simetria dinâmica $SL(2, \mathbb{C})$, cujo operador Hamiltoniano não-hermitiano efetivo de uma única partícula de dois níveis é empregado para simular a dinâmica coletiva de um *ensemble* de $spin-1/2$. O modelo teórico é elaborado a partir da análise do decaimento da magnetização líquida em um experimento constituído de um *ensemble* de núcleos de ^{31}P (com $spin$ nuclear $I = 1/2$) de uma amostra de H_3PO_4 , via técnica de Ressonância Magnética Nuclear. Verifica-se que as magnetizações experimentais evidenciam a validade do modelo teórico.

Palavras-chave: Simetria Dinâmica. *Spin*. Não-Hermiticidade. RMN.

ABSTRACT

CIUS, Danilo. Discrete Quantum Systems embedding $SL(2, \mathbb{C})$ Dynamical Symmetry and Applications on Nuclear Magnetic Resonance. 2018. 95p. Dissertação (Mestrado em Ciências-Física) - Universidade Estadual de Ponta Grossa. Ponta Grossa, 2018.

This work aims to investigating the dynamics of spin-1/2 in the context of non-Hermitian quantum systems. It is proposed a heuristic phenomenological model embedding $SL(2, \mathbb{C})$ dynamical symmetry, whose the effective non-Hermitian Hamiltonian operator of a single particle is employed to mimic the damped dynamics of an ensemble of spin-1/2. The theoretical model is built by the decay on net magnetization analysis in an experiment made up of an ensemble of ^{31}P nuclei (spin $I = 1/2$) of H_3PO_4 sample by applying Nuclear Magnetic Resonance technique. It is verified that the experimental magnetizations emphasize the validity of the theoretical model.

Keywords: Dynamical Symmetry. Spin. Non-Hermiticity. NMR.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	– Desenho das linhas de reflexão do triângulo equilátero.	21
Figura 2	– Esquema do homomorfismo entre os grupos $SU(2)$ e $SO(3)$	29
Figura 3	– Hierarquia Não-Hermitiana.	52
Figura 4	– Representação do vetor de Bloch associado ao estado do sistema $ \Psi(t)\rangle$ (Equação 5.5) para $\theta_0 = \phi_0 = \pi/4$. A trajetória percorrida pelo vetor representa a precessão do momento magnético intrínseco em torno do campo magnético aplicado ao longo da direção positiva do eixo- z	66
Figura 5	– Resultado da aplicação do pulso de rádio-frequência visto do referencial girante, para o caso fora da ressonância $\omega_{rf} \neq \omega_L$. (a) Esquema indicando a frequência efetiva $\kappa = \sqrt{\omega_1^2 + \Delta\omega^2}$ produzida pela aplicação do pulso de rádio-frequência. O ângulo α indica a direção do campo magnético efetivo em torno do qual o <i>spin</i> precessiona. (b) Vetor de Bloch associado ao estado $ \Psi(t)\rangle$ (Equação 5.19) representando a precessão do <i>spin</i> em torno do campo efetivo com frequência angular κ , para os parâmetros $\omega_L = 1$ Hz, $\omega_{rf} = 0.8$ Hz e $\omega_1 = 0.1$ Hz. O vetor cinza claro indica o estado inicial, enquanto os vetores cinza escuro e preto indicam as posições em tempos posteriores.	68
Figura 6	– Nutação do <i>spin</i> sujeito a um campo de rádio-frequência com intensidade proporcional à frequência de nutação $\omega_1 = \gamma B_1 = 0.1$ Hz, considerando um pulso de rádio-frequência na direção x ($\phi = 0$) com frequência ω_{rf} igual a frequência de precessão de Larmor ω_L do núcleo, $\omega_{rf} = \omega_L = 1$ Hz. O vetor cinza claro indica o estado inicial, enquanto os vetores cinza escuro e preto indicam o estado em tempos posteriores, vistos (a) do referencial de laboratório e (b) do referencial girante.	68
Figura 7	– (a) Figura representativa de uma molécula de H_3PO_4 . (b) Sequência de pulsos para implementar e monitorar a dinâmica da matriz densidade. O tempo de espera d_1 permite alcançar o estado de equilíbrio do núcleo na amostra. A rotação $R_x(t_r)$ é utilizada para controlar a dinâmica dos núcleos. O retângulo tracejado representa o pulso de tomografia de estado quântico. Finalmente, é feita a leitura do FID (<i>Free Induction Decay</i>). O pulso de tomografia de um experimento semelhante é discutido em (93).	70
Figura 8	– Partes real e imaginária da matriz densidade de desvio $\Delta\rho(t_{r,k})$ obtidas experimentalmente para os diferentes valores de tempo indexados por $k = 1, 51, 101, 201, 301, 401$ e 501 . O estado inicial representa o alinhamento dos <i>spins</i> no sentido do campo B_0 e o estado final representa uma mistura de estados.	72

Figura 9 – Gráfico com os dados experimentais para as componentes M_x (vermelho), M_y (verde) e M_z (azul) da magnetização líquida normalizada. As setas numeradas apontam os símbolos preenchidos que denotam os instantes correspondentes aqueles da Figura 8.	73
Figura 10 – A partir da transformada de Fourier dos dados experimentais da Figura 9 obtêm-se os espectros de absorção (azul) e dispersão (laranja), tal que o valor máximo da frequência ν_1 acontece em 21956 ± 1996 Hz. O erro no valor da frequência corresponde ao tamanho mínimo do passo representado pelo retângulo. A linha tracejada indica o valor $\nu'_1 = 23566$ Hz que é a melhor frequência para o ajuste dos resultados teóricos aos dados experimentais (Figura 9) como é visto na seção 5.4.	74
Figura 11 – Gráfico mostrando a conservação do traço da matriz densidade total ρ (curva vermelha) no decorrer do tempo à medida que o traço da matriz densidade ρ_{ss} decai no tempo (curva azul) e o traço da matriz densidade ρ_{ff} aumenta (curva verde).	79
Figura 12 – Dados experimentais (símbolos) e previsões teóricas (curva sólida) para as componentes M_y e M_z da magnetização líquida concordam quando os parâmetros adimensionais valem $\lambda = 41.77 \times 10^{-3}$ e $\mu = -34.43 \times 10^{-3}$	80
Figura 13 – Esquema pictórico de dois tipos de <i>ensemble</i> de partículas de dois níveis. As esferas coloridas azuis (magenta) representam a dinâmica em fase (fora de fase) de um sistema de <i>spins</i> ideal (real) e as curvas sólidas representam a componente z da magnetização líquida.	81
Figura 14 – O gráfico apresenta a evolução do parâmetro de Fidelidade de acordo com a definição apresentada por Fortunato et al. (102), o qual mostra que o parâmetro de Fidelidade (pontos pretos) evolui acima dos 75% (linha tracejada vermelha).	82

LISTA DE SÍMBOLOS

$\mathbb{R}$	Conjunto dos números reais
$\mathbb{C}$	Conjunto dos números complexos
$\mathbb{K}$	Corpo
$\mathbb{A}$	Álgebra
$\mathbb{V}, \mathbb{L}$	Espaço vetorial
$\mathcal{L}^G$	Álgebra de Lie de um grupo G
$\mathbf{R}$	Matriz de rotação
$\mathbf{0}$	Matriz nula
$\mathbf{1}, \mathbf{I}_0$	Matriz identidade, Matriz identidade dividida por dois
$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	Matrizes de Pauli ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$)
$\mathbf{L}_j$	Geradores de $SO(3)$
$\mathbf{I}_j, \tilde{\mathbf{I}}_j$	Geradores de $SL(2, \mathbb{C})$
$\overleftarrow{\mathbf{T}}$	Operador de ordenamento temporal
$\mathbf{U}$	Operador unitário
$\mathbf{V}$	Operador não-unitário
ρ	Matriz densidade
Θ	Operador métrico
ϱ	Matriz densidade ampliada
ω_0	Frequência de Larmor
ω_1	Frequência de nutação
ω_{rf}	Frequência de rádio-frequência

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	CONCEITOS DA TEORIA DE GRUPOS	16
2.1	Grupo e Álgebra	16
2.2	Tipos de Grupos	19
2.2.1	Grupos finitos	19
2.2.2	Grupos contínuos	21
2.2.2.1	Estruturas dos Grupos $SO(3)$ e $SU(2)$	23
2.2.2.2	Estrutura do Grupo $SL(2, \mathbb{C})$	30
3	SISTEMAS QUÂNTICOS DISCRETOS	32
3.1	Estrutura do Espaço de Hilbert (Espaços Finitos)	32
3.2	Conceitos Fundamentais da Mecânica Quântica	36
3.2.1	Evolução Temporal	37
3.3	Sistema Quântico com Simetria Dinâmica $SU(2)$	40
3.3.1	Sistema com Simetria Dinâmica $SU(2)$ Independente do Tempo	40
3.3.2	Sistema com Simetria Dinâmica $SU(2)$ Dependente do Tempo	42
4	MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-HERMITIANA	48
4.1	Contextualização sobre a Formulação Não-Hermitiana	48
4.2	Representação biortogonal	52
4.3	Evolução temporal de um sistema não-hermitiano	56
4.4	Dinâmica Quântica com Simetria $SL(2, \mathbb{C})$	57
4.5	Evolução de um sistema não-hermitiano via equação mestra	60
5	MODELO FENOMENOLÓGICO COM SIMETRIA $SL(2, \mathbb{C})$	64
5.1	Ressonância Magnética Nuclear	64
5.1.1	O Sistema de RMN	65
5.2	Uma Proposta Experimental	69
5.2.1	Metodologia	69
5.2.2	O Estado Inicial Pseudo-Puro	70
5.2.3	Resultados Experimentais	71
5.3	O Modelo Teórico	73
5.4	Comparação entre os Resultados Teóricos e Experimentais	80
6	CONCLUSÃO	83

7	PERSPECTIVAS FUTURAS	85
	REFERÊNCIAS	86
	APÊNDICE A – OPERADOR DENSIDADE E ESFERA DE BLOCH	92

1 INTRODUÇÃO

Em virtude do sucesso alcançado pela Física e dos desenvolvimentos tecnológicos oriundos dela no século XIX, criou-se um grande otimismo por parte da sociedade da época. A Física estava dividida em cinco grandes áreas: Mecânica, Óptica, Ondulatória, Termodinâmica e Eletromagnetismo. Cada área explicava uma grande quantidade de fenômenos com muita precisão e isto era tão impressionante que a comunidade científica acreditava que os modelos da Física até ali explicariam todos os fenômenos físicos. Esses modelos geraram tanta confiança que um dos renomados físicos desse período, sir William Thomson, conhecido como Lord Kelvin, afirmou que a Física Clássica tinha apenas "duas nuvens" a serem removidas do límpido céu por ela construído (1). Uma delas era o resultado inesperado de um experimento que ficou conhecido pelo nome dos físicos que o propuseram, Michelson e Morley, que tinha como objetivo detectar o Éter (meio hipotético pelo qual a luz se propagaria) (2). A outra, tratava-se do problema da radiação de um corpo negro no qual os modelos clássicos discordavam dos resultados experimentais e levavam a absurdos como a catástrofe do ultra-violeta (3). Assim, as "duas nuvens" se tornaram carregadas de tal forma, que essas questões deram origem a duas novas teorias: a Relatividade, que descreve o mundo das velocidades próximas à da luz e a Física Quântica que descreve o mundo na escala atômica.

A Mecânica Quântica é, assim como a Relatividade Geral, embora independente desta, um dos pilares fundamentais da Física atual. Os alicerces da Mecânica Quântica foram estabelecidos durante a primeira metade do século XX por Albert Einstein, Werner Heisenberg, Max Planck, Louis de Broglie, Niels Bohr, Erwin Schrödinger, Max Born, John von Neumann, Paul Dirac, Wolfgang Pauli, Richard Feynman entre outros que contribuíram para sua consolidação. A elaboração desta nova área da Física surgiu na tentativa de explicar o mundo atômico, o que constituiu a mudança mais profunda nas ideias fundamentais da Física, superando até mesmo a Relatividade, devido ao seu caráter não determinístico e sua descrição estatística da natureza (4).

Ainda que o caráter da Mecânica Quântica seja estranho à percepção intuitiva do mundo macroscópico, sua compreensão é dada através da decodificação da linguagem matemática que a estrutura no Espaço de Hilbert, o qual é um espaço vetorial complexo munido de um produto interno (5). Neste sentido, a compreensão da Mecânica Quântica do ponto de vista algébrico torna-se essencial para que se possa operar e controlar os sistemas físicos da natureza em escalas nas quais o senso comum não permite dar uma descrição direta dos fenômenos. As respostas sobre o comportamento da natureza do mundo quântico estão incorporadas na estrutura algébrica deste espaço. Isto motiva a exploração das propriedades de simetria associadas aos operadores que atuam neste espaço no contexto da Teoria de Grupos e Simetrias Dinâmicas.

A simetria é uma característica primária da Natureza que restringe as leis da dinâmica e, neste sentido, há o Teorema de Noether que afirma que à toda simetria está associada uma lei de conservação (6). Eugene Wigner e outros perceberam que a invariância associada à simetria

na Mecânica Quântica era o conceito fundamental para entender novos fenômenos quânticos e desenvolver teorias adequadas para descrevê-los (7). Em uma publicação de Wigner intitulada "Teoria de Grupos e sua Aplicação à Mecânica Quântica do Espectro Atômico"(1932) foi mostrado que as regras da espectroscopia atômica podem ser bem entendidas fazendo um estudo das simetrias observadas nos resultados espectroscópicos. Outra publicação intitulada "Teoria de Grupos e Mecânica Quântica"(1928) de Hermann Weyl, associava os números quânticos às representações de grupos, indicando que a linguagem matemática da Teoria de Grupos era adequada para tratar simetrias (8). Uma aplicação pioneira da Teoria de Grupos, envolvia o problema da interação entre um *spin* arbitrário e um campo magnético variável, o qual foi resolvido por Majorana (9), em 1932, utilizando teoria de representações do grupo $SU(2)$. Esse trabalho foi central no desenvolvimento da técnica de ressonância magnética (10, 11, 12).

No formalismo quântico padrão¹, as simetrias são incorporadas no operador Hamiltoniano, que representa um observável associado à energia total do sistema. Os postulados da Mecânica Quântica afirmam que os observáveis físicos devem ser representados por operadores hermitianos, uma vez que as medidas de um observável resultam em um dos seus autovalores reais (13). Entretanto, em 1998, foi proposto por Bender e Boettcher que a condição de hermiticidade poderia ser substituída por uma condição menos matemática e mais física, associada à invariância do Hamiltoniano (agora não-hermitiano) sob uma reflexão espaço-temporal –simetria $\mathcal{PT}$ – (14, 15, 16), sem que as características da Mecânica Quântica convencional fossem mudadas, pois *a priori* esta condição garantiria a realidade do espectro² e a unitariedade da evolução temporal (17). Esta formulação é conhecida como Mecânica Quântica $\mathcal{PT}$ -simétrica. Outras formulações ainda mais gerais vêm sendo propostas em relação a operadores com autovalores reais e evoluções unitárias via Hamiltonianos não-hermitianos, como a Mecânica Quântica Pseudo/Quase-hermitiana estudada intensamente por Mostafazadeh (18) e outros (19, 20).

Hamiltonianos com espectro complexo são utilizados em diversas aplicações na Física Moderna (21). Espalhamento quântico e transporte em potenciais complexos (22, 23, 24, 25), estados de decaimento (26), ionização multi-fótons (27, 28) e guias de onda ópticos (29) são exemplos de aplicações da Mecânica Quântica não-hermitiana. Dentro deste formalismo, a dinâmica de um sistema não-hermitiano é abordada de formas distintas, como é o caso do formalismo proposto por Dattoli, Torre e Mignani (30), no qual o Hamiltoniano e seu adjunto representam os geradores dos semi-grupos de translação temporal para tempos positivos e negativos, respectivamente, utilizados na descrição da dinâmica dos estados de decaimento (30), cuja estrutura formal é abordada na referência (31). Pelo fato do Hamiltoniano não ser hermitiano, seus autoestados não são necessariamente ortogonais e, neste sentido, a condição de ortogonalidade pode ser substituída pela noção de biortogonalidade, fornecendo a conexão entre os vetores do espaço de Hilbert e seu dual, como discutido por Brody (32). Um problema associado aos sistemas não-hermitianos é a não conservação da probabilidade, uma vez que a

¹ O termo "padrão" refere-se à formulação hermitiana da Mecânica Quântica encontrada em livros-texto padrões.

² O termo "realidade do espectro" refere-se ao fato do conjunto de autovalores (espectro) de um operador ser constituído de valores reais.

dinâmica envolve evoluções não-unitárias, de modo que tais sistemas são tratados em sua maioria de forma heurística (33). No entanto, formalismos híbridos que combinam equações mestras e Hamiltonianos não-hermitianos podem ser considerados para contornar este problema. A ideia desses formalismos é compor um espaço de Hilbert ampliado que contém os estados instáveis do sistema e os estados produtos do decaimento, de modo que nesse novo espaço a probabilidade é conservada, como é proposto por Bertlmann, Grimus e Hiesmayr (34) e generalizado por Sclarici e Solombrino (35).

Embasado no contexto precedente, o problema que esta dissertação propõe resolver teve como ideia inicial a geração de Hamiltonianos dependentes do tempo para sistemas de um *spin* arbitrário com simetria dinâmica $SU(2)$ (36), cujas evoluções unitárias obtidas de forma exata pelo método proposto por Messina e Nakazato (37) fossem reproduzíveis no laboratório via técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Entretanto, os dados experimentais obtidos na análise de uma amostra contendo núcleos de ^{31}P (*spin*-1/2) mostraram um decréscimo exponencial na magnetização líquida do sistema, característica de uma evolução não-unitária, a qual o método proposto de início seria incapaz de descrever. Neste sentido, o objetivo principal deste trabalho consiste na construção de um modelo fenomenológico que permita descrever a dinâmica de um *ensemble* de *spin*-1/2, ainda que de forma heurística, cujas previsões teóricas estejam em concordância com os dados experimentais obtidos para os núcleos de ^{31}P de uma amostra de H_3PO_4 . O modelo baseia-se na introdução de um Hamiltoniano efetivo não-hermitiano que contém simetria $SL(2, \mathbb{C})$, ao invés de $SU(2)$, similar ao modelo proposto por Ellinas (38). A evolução temporal associada ao Hamiltoniano do modelo será explorada utilizando o formalismo de Bertlmann, Grimus e Hiesmayr (34).

No Capítulo 2 será feita uma revisão sobre os elementos básicos da Teoria de Grupos, explorando axiomas e alguns exemplos dos conceitos abstratos associados à teoria. Serão abordados de maneira informal tanto grupos discretos quanto grupos contínuos, destacando os grupos contínuos de Lie: $SU(2)$, $SO(3)$ e $SL(2, \mathbb{C})$. Esta é a base necessária para os capítulos seguintes, nos quais será observado que a estrutura algébrica associada a esses grupos possui papel fundamental na descrição da dinâmica de sistemas quânticos discretos.

Os sistemas quânticos discretos serão descritos no Capítulo 3, no qual será discutido primeiramente a estrutura do Espaço de Hilbert finito, verificando as representações dos vetores que o compõem bem como dos operadores lineares que atuam nele. Com base na estrutura algébrica deste espaço, os conceitos fundamentais associados aos postulados da Mecânica Quântica serão brevemente comentados, destacando os aspectos da dinâmica de um sistema quântico discreto nos casos em que o operador Hamiltoniano do sistema depende ou não do tempo. Neste ponto, serão introduzidos os conceitos de simetria, onde o Hamiltoniano de um sistema de dois níveis é escrito em termos dos elementos da álgebra do grupo $SU(2)$, denotada por $\mathfrak{su}(2)$, de tal forma que o operador de evolução temporal deste sistema é definido em termos da representação fundamental deste grupo, sendo dito que este sistema possui simetria dinâmica $SU(2)$ (36). Para o caso em que o operador Hamiltoniano depende do tempo, será apresentado

o método proposto por Messina e Nakazato (37) no intuito de gerar soluções exatas para a dinâmica de sistemas com esta simetria (37). O formalismo discutido nesta seção sobre tais sistemas, é válido também para sistemas de N -níveis com simetria $SU(2)$, no entanto, o estudo feito aqui será restringido a sistemas quânticos de dois níveis.

No Capítulo 4 será feita uma breve revisão sobre a Mecânica Quântica não-hermitiana, discutindo alguns conceitos associados, como pseudo-hermiticidade, que mostra-se como uma condição necessária para a realidade do espectro de operadores, uma vez que a hermiticidade é uma condição suficiente, porém, não necessária para realidade do espectro (39). Além disso, será discutido o formalismo não-hermitiano na representação biortogonal (32), de modo que no caso particular em que o Hamiltoniano não-hermitiano possui apenas autovalores reais, é possível associar uma evolução unitária a ele. Porém, o foco do trabalho está no estudo de sistemas não-hermitianos que permitem simular ou imitar sistemas abertos (40). Neste sentido, primeiramente será discutido o formalismo não-hermitiano de Dattoli, Torre e Mignani (30), que permite descrever sistemas com decaimento. Esse formalismo, apesar de elegante, não é intuitivamente conveniente, uma vez que a evolução temporal do sistema acontece tanto para tempos positivos quanto para tempos negativos; a evolução temporal para tempos positivos descreve heurísticamente a dinâmica do sistema, pois a probabilidade não é conservada. Além disso, para contornar o problema da não conservação da probabilidade, será apresentado o formalismo híbrido de Bertlmann, Grimus e Hiesmayr (34), que consiste em ampliar o espaço de Hilbert e combinar um Hamiltoniano não-hermitiano com a equação de Lindblad-Kossakowski (41), levando em conta os produtos do decaimento, de modo a garantir a conservação da probabilidade nesse espaço de Hilbert ampliado. Utilizando essas abordagens, será analisado um sistema não-hermitiano de dois níveis independente do tempo contendo simetria $SL(2, \mathbb{C})$ (38). Este sistema será útil na elaboração do modelo proposto no Capítulo 5.

O Capítulo 5 abordará uma breve revisão sobre Ressonância Magnética Nuclear (RMN), destacando as ideias centrais relacionadas à técnica. Com base nesta técnica espectroscópica e aos conceitos dos capítulos precedentes, um modelo fenomenológico não-hermitiano que inclui simetria do grupo $SL(2, \mathbb{C})$ será proposto junto aos resultados de um experimento constituído de um *ensemble* de núcleos de ^{31}P de uma amostra de H_3PO_4 . O modelo possui um Hamiltoniano efetivo não-hermitiano, cuja dinâmica associada a ele, simula o decaimento da magnetização da amostra de ^{31}P medida no laboratório via RMN.

As conclusões a respeito do trabalho e dos resultados apresentados são dadas no Capítulo 6. Também são apresentadas no Capítulo 7 algumas perspectivas futuras que este trabalho proporciona.

2 CONCEITOS DA TEORIA DE GRUPOS

Neste capítulo, serão abordados tópicos específicos da estrutura matemática que formaliza o conceito de simetria – a Teoria de Grupos –, introduzindo os conceitos de grupo e álgebra de forma a gerar condições para o estudo de simetrias dinâmicas. De início, definem-se os conceitos de grupo e álgebra e, em seguida, faz-se uma análise dos grupos de naturezas finita e infinita. Os grupos de natureza finita serão úteis no entendimento da definição de grupo transformações contínuas; os grupos contínuos de interesse neste trabalho são os chamados grupos de Lie (42), que serão utilizados na descrição da dinâmica de *spin* (43). Neste sentido, destacam-se o grupo $SL(2, \mathbb{C})$ e seu subgrupo $SU(2)$ que serão abordados de maneira informal, enfatizando suas principais propriedades.

2.1 GRUPO E ÁLGEBRA

A definição de grupo surge da abstração do conceito de grupo de transformações (44). Um grupo de transformações é entendido como um agregado de transformações de um conjunto de pontos que satisfaz as seguintes propriedades:

- i. contém uma transformação identidade;
- ii. para toda transformação M , também existe a inversa M^{-1} ;
- iii. se nele inclui M e M' , também inclui a composição MM' .

Por exemplo, as transformações de rotação através dos ângulos de Euler, utilizadas na descrição do movimento de um corpo rígido no espaço tridimensional, formam um grupo de transformações uma vez que o conjunto de matrizes que representam rotações junto à operação de multiplicação matricial satisfazem as propriedades descritas acima. A partir da noção de grupo de transformações, é possível estender esta ideia para o conceito de grupo abstrato (44).

Um grupo abstrato G é um conjunto de elementos a, b, c , etc., para os quais uma lei de composição ou multiplicação ¹ "*" é dada, de modo que o produto $a * b$ é bem definido, o que possibilita estabelecer formalmente algumas propriedades conforme segue a definição abaixo.

Definição 1. Grupo é uma estrutura algébrica composta por um conjunto de elementos G e uma operação "*", sob a qual estes elementos devem satisfazer as seguintes propriedades:

- i. *Fechamento:* se a e b são dois elementos quaisquer de G , então o produto $a * b$ também é um elemento de G ;
- ii. *Associatividade:* se a, b e c pertencem a G , então

$$(a * b) * c = a * (b * c) = a * b * c; \quad (2.1)$$

¹ A expressão multiplicação não deve ser confundida com a multiplicação usual, pois além dessa, pode compreender outras operações, como por exemplo, a adição usual, a multiplicação matricial, entre outras.

iii. *Elemento neutro*: existe um elemento e tal que, para todo $a \in G$

$$e * a = a * e = a; \quad (2.2)$$

iv. *Elemento inverso*: para todo $a \in G$ existe um elemento inverso $a^{-1} \in G$ tal que

$$a * a^{-1} = a^{-1} * a = e. \quad (2.3)$$

De forma concisa, um grupo é um semi-grupo com elemento neutro em que cada elemento possui um inverso (45). Ainda, se a propriedade adicional

$$a * b = b * a, \quad (2.4)$$

é satisfeita, então diz-se que o grupo G é comutativo ou abeliano. Além disso, tem-se que tanto o elemento neutro como o elemento inverso são únicos. Se e é uma identidade à direita e e' é uma identidade à esquerda, então $e' = e' * e = e$, sendo a identidade única. Se a^{-1} é uma inversa à direita e a'^{-1} é uma inversa à esquerda de um elemento a , então $a'^{-1} = a'^{-1} * (a'^{-1} * a) = a'^{-1} * (a * a^{-1}) = (a'^{-1} * a) * a^{-1} = a^{-1}$, sendo o elemento inverso único. Ainda, se um subconjunto H de G ($H \subset G$) forma um grupo sob a mesma lei de combinação que G , então H é um subgrupo de G . Alguns exemplos são dados no parágrafo que segue.

O conjunto dos números reais $\mathbb{R}$ junto à operação de adição usual $+$ definem a estrutura $G = \{\mathbb{R}, +\}$, a qual representa um grupo abeliano, enquanto o conjunto dos números inteiros $\mathbb{Z}$ sob a mesma operação compõem a estrutura $H = \{\mathbb{Z}, +\}$, a qual é um subgrupo abeliano de G . Além dos conjuntos numéricos, o conjunto de matrizes $M_{2 \times 2}(\mathbb{C})$, com determinante não nulo, junto à operação de multiplicação matricial forma um grupo não-abeliano.

Através da definição geral e de alguns exemplos, analisou-se o que é um grupo sem levar em conta sua natureza: discreta ou contínua. Para o estudo dos grupos contínuos de interesse neste trabalho, grupos de Lie, é necessário definir o conceito de Álgebra de Lie. No entanto, neste primeiro momento, sem preocupar-se com tais grupos, define-se o que é uma álgebra verificando suas propriedades e citando alguns exemplos.

Definição 2. Uma álgebra é um espaço vetorial $\mathbb{A}$ sobre um corpo $\mathbb{K}$ munido de uma operação bilinear $\mathbb{A} \times \mathbb{A} \rightarrow \mathbb{A}$ tal que as seguintes propriedades são satisfeitas:

i. O produto $*$ é distributivo em relação a adição $+$ para todo $A_i \in \mathbb{A}$ e $\alpha_i \in \mathbb{K}$

$$\left(\sum_{i=1}^N \alpha_i A_i \right) * A_j = \alpha_1 (A_1 * A_j) + \cdots + \alpha_N (A_N * A_j), \quad (2.5)$$

$$A_k * \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i A_i \right) = \alpha_1 (A_k * A_1) + \cdots + \alpha_N (A_k * A_N). \quad (2.6)$$

ii. Para todo $A_i \in \mathbb{A}$ e $\alpha_i \in \mathbb{K}$, vale

$$(\alpha_i A_i) * (\alpha_j A_j) = (\alpha_i \alpha_j) (A_i * A_j), \quad (2.7)$$

com $i, j = 1, 2, \dots, N$.

Sendo assim, um espaço vetorial fechado sob uma lei de multiplicação é chamado de álgebra. Dessa forma, tem-se uma álgebra associativa quando for possível escrever o produto triplo da forma $A_i * A_j * A_k$ sem ambiguidade, pois $A_i * (A_j * A_k) = (A_i * A_j) * A_k$. Caso contrário, tem-se uma álgebra não-associativa. Além disso, tem-se uma álgebra comutativa ou abeliana se $A_i * A_j = A_j * A_i$. Alguns exemplos de álgebras são dados nos parágrafos seguintes.

Um corpo $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ junto do produto usual " $\cdot$ " podem definir a estrutura algébrica $\{\mathbb{R}, \cdot\}$, a qual é uma álgebra associativa, uma vez que um corpo $\mathbb{K}$ pode ser definido como um espaço vetorial sobre ele mesmo.

O espaço vetorial $\mathbb{V} = \mathbb{R}^3$ sobre o corpo $\mathbb{R}$ dotado de um produto vetorial $\times$ formam a estrutura $\{\mathbb{V}, \times\}$ que é uma álgebra, pois verifica-se que o produto vetorial atende as propriedades (i) e (ii) da *Definição 2* e, além disso, trata-se de uma álgebra não associativa, $\vec{a}_1 \times (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \neq (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \times \vec{a}_3$ para $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \in \mathbb{V}$.

Definição 3. Uma Álgebra de Lie é um espaço vetorial $\mathbb{L}$ sobre um corpo $\mathbb{K}$, munido da operação binária $[\cdot, \cdot] : \mathbb{L} \times \mathbb{L} \rightarrow \mathbb{L}$, chamado de parênteses de Lie, o qual tem as seguintes propriedades:

i. *Bilinearidade:*

$$\left[\sum_{i=1}^N \alpha_i L_i, L_j \right] = \sum_{i=1}^N \alpha_i [L_i, L_j], \quad (2.8)$$

$$\left[L_k, \sum_{i=1}^N \alpha_i L_i \right] = \sum_{i=1}^N \alpha_i [L_k, L_i], \quad (2.9)$$

$$\forall \alpha_i \in \mathbb{K} \text{ e } L_i \in \mathbb{L}.$$

ii. *Identidade de Jacobi:*

$$[L_i, [L_j, L_k]] + [L_j, [L_k, L_i]] + [L_k, [L_i, L_j]] = 0, \quad (2.10)$$

$$\forall L_{i,j,k} \in \mathbb{L}.$$

iii. *Anti-simetria:*

$$[L_i, L_j] = -[L_j, L_i], \quad (2.11)$$

$$\forall L_i, L_j \in \mathbb{L} \text{ com } i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Portanto, esta é a definição de Álgebra de Lie em que os parênteses de Lie, ou comutador, pode ser definido como $[A, B] \equiv AB - BA$ para as aplicações do trabalho. Entretanto, no contexto geral de Álgebra de Lie, os parênteses de Lie representa uma operação genérica. Isto pode ser notado no segundo exemplo de álgebra dado acima, pois um espaço vetorial real tridimensional munido do produto vetorial é uma álgebra de Lie². Como já mencionado de forma breve, o conceito de álgebra de Lie é importante no contexto dos grupos contínuos (grupos de Lie), os quais são abordados na próxima seção.

² Ver página 23 da referência (42).

2.2 TIPOS DE GRUPOS

Embora as propriedades de um grupo dependam diretamente de sua natureza, finita ou infinita, a definição de grupo apresentada na seção anterior aplica-se a ambos. Assim, analisa-se de maneira breve a estrutura dos grupos finitos, estabelecendo uma base conceitual para abordar os grupos infinitos (contínuos) na sequência. Nesta seção, será desenvolvido um tratamento informal sobre esses grupos, uma vez que, posteriormente, deseja-se explorar a estrutura dos grupos de Lie no contexto físico.

2.2.1 GRUPOS FINITOS

Uma propriedade fundamental de um grupo G é o número de elementos que ele contém. O número de elementos de um grupo determina sua ordem $|G|$, a qual pode ser finita ou infinita (46). Assim, se g é um elemento de G , o resultado de n multiplicações deste elemento por ele mesmo, $g * g * \dots * g$, fica denotado por g^n . O fato do produto $g * g^{-1}$ resultar no elemento identidade e permite denotar este elemento como a potência g^0 , uma vez que $g * g^{-1} = e = g^{1-1} = g^0$. Da mesma forma que o elemento inverso de g^n , $(g^n)^{-1}$, fica denotado por g^{-n} , uma vez que $g^n * (g^n)^{-1} = e$. Além disso, um elemento g pode ter ordem finita ou infinita, sendo a ordem deste elemento o menor valor inteiro positivo k tal que $g^k = e$. Portanto, se este valor existe, o elemento é dito de ordem finita, caso contrário, é de ordem infinita.

As operações entre os elementos de um grupo discreto, de ordem finita, podem ser melhor visualizadas por meio de uma tabela de multiplicação, as quais são construídas na forma:

$$\begin{array}{c|ccccc}
 * & e & g_1 & g_2 & \dots & g_n \\
 \hline
 e & e & g_1 & g_2 & \dots & g_n \\
 g_1 & g_1 & g_1^2 & g_1 * g_2 & \dots & g_1 * g_n \\
 g_2 & g_2 & g_2 * g_1 & g_2^2 & \dots & g_2 * g_n \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 g_n & g_n & g_n * g_1 & g_n * g_2 & \dots & g_n^2
 \end{array} \quad (2.12)$$

A primeira linha e a primeira coluna contêm os elementos do grupo e , as interseções, os produtos das operações entre esses elementos. Para um grupo finito de ordem dois, tem-se dois elementos, um elemento a e um elemento neutro e . Pela definição de grupo e unicidade dos elementos neutro e inverso, exige-se que $a^{-1} = a$, uma vez que $a^2 = a * a$ deve ser igual ao elemento neutro e , de modo que os produtos entre os elementos deste grupo são mostrados na tabela de multiplicação

$$\begin{array}{c|cc}
 * & e & a \\
 \hline
 e & e & a \\
 a & a & e
 \end{array} \quad (2.13)$$

Para um grupo de ordem três composto pelos elementos a , b e e , tem-se que se $a * b = e = b * a$, então $a = b^{-1}$ e $b = a^{-1}$, sendo possível denotar os elementos do grupo em termos de potências

de a : $a^0 = e$, $a^1 = a$, $a^2 = b$. A tabela de multiplicação para o grupo de ordem três fica

$*$	e	a	b
e	e	a	b
a	a	b	e
b	b	e	a

(2.14)

Nota-se que há uma relação cíclica entre os elementos destes grupos. Por exemplo, no caso do grupo de ordem dois, potências sucessivas (0, 1) do elemento a sempre retornam à sequência e e a . O mesmo acontece para o grupo de ordem três, no qual as potências sucessivas (0, 1, 2) de a geram a sequência e , a e b . Portanto, grupos com esta característica são chamados de grupos cíclicos. Entretanto, grupos de ordem maior que três não são necessariamente cíclicos, podendo apresentar formas distintas, como é discutido na referência (44) para grupos de ordem quatro e superior.

Um exemplo da realização do grupo abstrato finito de ordem dois é ilustrado para o conjunto dos inteiros 0 e 1 com a operação de soma módulo 2, denotada por $\oplus$, que juntos formam o grupo discreto $G = \{\{0, 1\}, \oplus\}$. A tabela de multiplicação para esse grupo é

$\oplus$	0	1
0	0	1
1	1	0

(2.15)

uma vez que a operação entre os elementos é feita como segue

$$0 \oplus 0 = 0, \quad 0 \oplus 1 = 1, \quad 1 \oplus 0 = 1, \quad 1 \oplus 1 = 0, \quad (2.16)$$

além disso, verifica-se que este é um grupo cíclico.

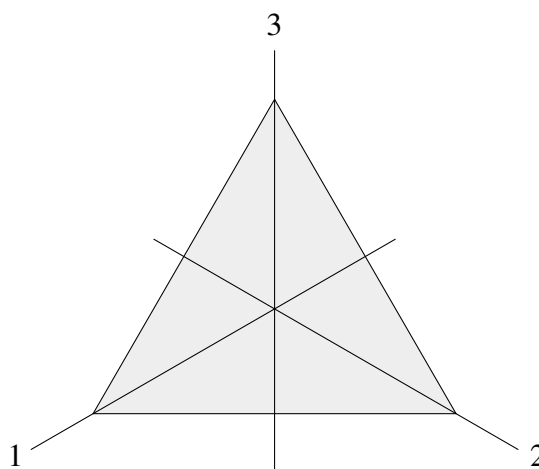
Combinações de transformações de rotação finita e reflexão podem ser utilizadas para formar grupos discretos (47). Por exemplo, um triângulo equilátero, ilustrado na Figura 1, possui seis operações de simetria: uma identidade (I), duas rotações em torno do centro geométrico, uma de 120° (R_{120}) e outra de 240° (R_{240}) e uma reflexão em torno da linha 1 (F_1), linha 2 (F_2) e linha 3 (F_3). A tabela de multiplicação para este caso fica dada por

$*$	I	R_{120}	R_{240}	F_1	F_2	F_3
I	I	R_{120}	R_{240}	F_1	F_2	F_3
R_{120}	R_{120}	R_{240}	I	F_3	F_1	F_2
R_{240}	R_{240}	I	R_{120}	F_2	F_3	F_1
F_1	F_1	F_2	F_3	I	R_{120}	R_{240}
F_2	F_2	F_3	F_1	R_{240}	I	R_{120}
F_3	F_3	F_1	F_2	R_{120}	R_{240}	I

(2.17)

na qual fica claro que este conjunto de transformações associado à invariância do triângulo equilátero forma um grupo (48). Grupos desta forma são de interesse prático nos estudos de moléculas (49) e cristais (50), em Física da Matéria Condensada (51), entre outros exemplos.

Figura 1 – Desenho das linhas de reflexão do triângulo equilátero.



Fonte: O autor (2018).

Há situações em que torna-se necessário a análise de rotações através de ângulos contínuos ao invés de discretos, como por exemplo, o movimento de um pêndulo esférico (52) e a precessão do *spin* em torno de um campo magnético aplicado (43). Neste caso, o conjunto de rotações para levar o sistema de um ângulo inicial até um ângulo final varrendo todo o intervalo forma um grupo constituído de infinitos elementos (não enumerável), o que caracteriza-o como um grupo contínuo cujas propriedades serão exploradas no próximo item.

2.2.2 GRUPOS CONTÍNUOS

Os grupos que contêm um número infinito de elementos são chamados de grupos infinitos, podendo ser discretos ou contínuos (46). Como exemplos, pode-se citar o conjunto dos números inteiros e o conjunto dos números reais, os quais formam dois grupos infinitos sob adição. No primeiro exemplo, o número infinito de elementos é contável e, portanto, é um grupo discreto. No segundo exemplo, o número de elementos não é enumerável e, então, é um grupo contínuo. Este exemplo particular de grupo contínuo é parametrizado por apenas um parâmetro real variando continuamente; sendo que todos os elementos do grupo são obtidos pela variação contínua deste parâmetro. Entretanto, um grupo contínuo, em geral, pode ser caracterizado por um ou mais parâmetros contínuos que podem ser reais ou complexos, de modo que o número de parâmetros define a ordem do grupo (53).

Outras características podem ser atribuídas aos grupos contínuos dependendo das formas dos intervalos nos quais seus parâmetros estão definidos, de modo que os grupos contínuos ficam classificados como compactos ou não-compactos. Um grupo é compacto se seus parâmetros estão definidos em intervalos limitados e fechados, caso contrário é não-compacto (54). Um intervalo é limitado quando o valor absoluto de qualquer elemento nele contido é sempre menor

ou igual a um dado valor positivo, em outras palavras, quando o intervalo não é infinito. Um intervalo é fechado se o limite de toda sequência convergente do conjunto também pertencem ao conjunto, ou seja, quando o intervalo é finito e os valores dos extremos são incluídos no conjunto. Por exemplo, o conjunto dos números reais definidos no intervalo entre 0 e 1 são limitados, pois nenhum elemento do conjunto pode ser maior que 1. Este conjunto também pode ser fechado se ambos os extremos, 0 e 1, forem incluídos no conjunto.

Os grupos contínuos estão relacionados aos conceitos de grupo e analiticidade, pois o fato dos seus elementos dependerem de parâmetros contínuos, faz com que tenham tanto caráter de grupo quanto de variedade, enquadrando-os na classificação de grupos topológicos (55). De forma simples, pode-se dizer que uma variedade é uma abstração do conceito de superfície (coleção contínua de pontos), que segundo Barata (56), é uma coleção contínua de objetos (pontos, vetores, matrizes) que podem ser rotulados por sistemas de coordenadas de modo que seja possível manipulá-los de maneira infinitamente diferenciável, por exemplo, a superfície da esfera em $\mathbb{R}^3$ (56). De maneira informal, um grupo topológico é um grupo e também um espaço topológico (45) no qual as operações de grupo são analíticas (42) e um grupo topológico que é também uma variedade analítica é dito ser um grupo de Lie (56).

A definição de grupo apresentada no início deste capítulo deve ser válida também para os grupos de Lie, no entanto, o produto de dois elementos dependerá de uma função dos parâmetros dos fatores. Por exemplo, se $g(t)$ é um elemento de um grupo de Lie G parametrizado em termos de uma variável contínua t , o produto $g(t_1)g(t_2) = g(t_3)$, em que $t_3 = f(t_1, t_2)$. Assim, considerando uma matriz 2×2 ortogonal (matriz inversa igual à transposta), $\mathbf{R}(\theta)$, com determinante igual a +1 representada na forma

$$\mathbf{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \theta \in [0, 2\pi], \quad (2.18)$$

tem-se o produto $\mathbf{R}(\theta_1)\mathbf{R}(\theta_2)$ dado por

$$\mathbf{R}(\theta_1)\mathbf{R}(\theta_2) = \begin{pmatrix} \cos(\theta_1 + \theta_2) & -\sin(\theta_1 + \theta_2) \\ \sin(\theta_1 + \theta_2) & \cos(\theta_1 + \theta_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_3 & -\sin \theta_3 \\ \sin \theta_3 & \cos \theta_3 \end{pmatrix} = \mathbf{R}(\theta_3), \quad (2.19)$$

onde $\theta_3 = f(\theta_1, \theta_2) = \theta_1 + \theta_2$; esta relação representa a condição de fechamento de grupo, já que o produto de matrizes da forma da Equação 2.18 tem a mesma forma dos fatores. Verifica-se ainda que a associatividade do produto é garantida de forma direta, uma vez que o produto matricial é associativo por definição. Além disso, o elemento identidade e o elemento inverso são $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(2\pi) = \mathbf{1}$ e $\mathbf{R}(-\theta) = \mathbf{R}^{-1}(\theta)$, respectivamente. Nota-se ainda que o produto é comutativo e, portanto, a matriz $\mathbf{R}(\theta)$ forma um grupo abeliano sob multiplicação matricial. Na verdade, este grupo de rotação de ordem 1 é um grupo de Lie denominado $SO(2)$ (*Special Orthogonal*³) (48).

Foi mencionado no início do capítulo que ao grupo de Lie está associado uma álgebra de Lie definida como um espaço vetorial munido de um comutador (parênteses de Lie). Uma

³ O termo *special* refere-se ao fato do determinante ser +1, uma vez que para matrizes ortogonais o determinante é dado em geral por ± 1 .

álgebra de Lie $\mathcal{L}^G$ de um grupo de Lie G é um espaço vetorial tangente ao elemento identidade $1 \in G$ com a mesma dimensão de G , o qual é estudado por meio da diferenciação das curvas (elementos) em G .

Uma maneira de visualizar a estrutura do espaço vetorial $\mathcal{L}^G$ tangente ao elemento identidade de um grupo de Lie G , consiste em analisar o elemento $\mathbf{R}(\theta)$ de $SO(2)$ dado por (2.18), o qual passa pelo elemento identidade em $\theta = 0$. Diferenciando este elemento em torno de $\theta = 0$, tem-se

$$\left. \frac{d\mathbf{R}(\theta)}{d\theta} \right|_{\theta=0} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad -i\sigma_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

em que σ_2 é a matriz de Pauli associada a direção x_2 (7). O elemento σ_2 é o elemento da álgebra Lie de $SO(2)$ ⁴, $\mathcal{L}^{SO(2)}$, o qual é um espaço vetorial unidimensional tangente à identidade. Então, um elemento qualquer χ deste espaço pode ser escrito como $\chi = \gamma\sigma_2$, em que $\gamma \in \mathbb{R}$. Nota-se ainda, que a estrutura do parênteses de Lie é satisfeita, $[\alpha\sigma_2, \beta\sigma_2] = 0$ para qualquer $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$.

Dada a noção a respeito dos grupos de Lie, introduz-se os grupos $SO(3)$ e $SU(2)$, os quais serão importantes no estudo de sistemas quânticos discretos na teoria quântica hermitiana (36) e, na sequência, discute-se o grupo $SL(2, \mathbb{C})$ dado pela complexificação da estrutura $SU(2)$, o qual será importante na descrição de sistemas quânticos não-hermitianos (38).

2.2.2.1 ESTRUTURAS DOS GRUPOS $SO(3)$ E $SU(2)$

O grupo $SO(3)$ é um grupo de Lie compacto composto por matrizes reais ortogonais 3×3 com determinante $+1$ que, portanto, satisfazem a relação $\mathbf{O}^T \mathbf{O} = \mathbf{1}$, implicando em $\mathbf{O}^{-1} = \mathbf{O}^T$. Este grupo é composto pelas matrizes de rotação no $\mathbb{R}^3$, as quais têm a propriedade de manter a norma de um vetor invariante sob estas transformações (7). Essas matrizes possuem nove parâmetros reais de entrada. Entretanto, devido às propriedades específicas que estas matrizes devem atender, apenas três parâmetros são independentes. As matrizes de rotações próprias no espaço tridimensional representam os elementos de $SO(3)$ (43). Portanto, a matriz $\mathbf{R}_j(\varphi_j)$ representa uma rotação em torno do eixo x_j através do um ângulo φ_j , com $j = 1, 2, 3$, cuja representação matricial em cada direção é dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_1(\varphi_1) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_1 & -\sin \varphi_1 \\ 0 & \sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_2(\varphi_2) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_2 & 0 & \sin \varphi_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & 0 & \cos \varphi_2 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{R}_3(\varphi_3) &= \begin{pmatrix} \cos \varphi_3 & -\sin \varphi_3 & 0 \\ \sin \varphi_3 & \cos \varphi_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

No caso de rotações infinitesimais (7), assume-se φ_j muito pequeno, de modo que o elemento $\mathbf{R}_j(\varphi_j)$ pode ser expandindo em série de Taylor na vizinhança do elemento identidade,

⁴ Na literatura, denota-se uma álgebra associada a um grupo utilizando letras minúsculas góticas. Por exemplo, ao grupo $SO(2)$ está associada à álgebra $\mathfrak{so}(2)$

$\mathbf{R}_j(0) = \mathbf{1}$. De modo que a expansão até o termo de primeira ordem fica sendo

$$\mathbf{R}_j(\varphi_j) = \mathbf{1} + \left. \frac{d\mathbf{R}_j(\varphi_j)}{d\varphi_j} \right|_{\varphi_j=0} \varphi_j = \mathbf{1} - i\mathbf{L}_j\varphi_j, \quad (2.22)$$

em que define-se a quantidade

$$\mathbf{L}_j \equiv i \left. \frac{d\mathbf{R}_j(\varphi_j)}{d\varphi_j} \right|_{\varphi_j=0}, \quad (2.23)$$

sendo $\mathbf{L}_j$ o elemento da álgebra de Lie de $SO(3)$, representado matricialmente por

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L}_3 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Fazendo N rotações infinitesimais sucessivas em torno do eixo x_j através de um ângulo $\delta\varphi_j = \frac{\varphi_j}{N}$, tem-se

$$\mathbf{R}_j(\delta\varphi_j) \dots \mathbf{R}_j(\delta\varphi_j) = (\mathbf{1} - i\mathbf{L}_j\delta\varphi_j) \dots (\mathbf{1} - i\mathbf{L}_j\delta\varphi_j) = (\mathbf{1} - i\mathbf{L}_j\delta\varphi_j)^N, \quad (2.25)$$

e como $\mathbf{R}_k(\varphi_k)\mathbf{R}_k(\varphi_i) = \mathbf{R}_k(\varphi_k + \varphi_i)$, esta igualdade fica

$$\mathbf{R}_j(\varphi_j) = \left(\mathbf{1} - i\mathbf{L}_j \frac{\varphi_j}{N} \right)^N. \quad (2.26)$$

Assim, no caso de infinitas rotações infinitesimais, $N \rightarrow \infty$, obtém-se a seguinte forma para $\mathbf{R}_j(\varphi_j)$

$$\mathbf{R}_j(\varphi_j) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbf{1} - i\mathbf{L}_j \frac{\varphi_j}{N} \right)^N = \exp[-i\mathbf{L}_j\varphi_j], \quad (2.27)$$

na qual verifica-se como os elementos da álgebra estão relacionados aos elementos do grupo que, por este motivo, os elementos da álgebra são também chamados de geradores do grupo. Além disso, os elementos da álgebra de Lie (geradores de grupo) formam um espaço tangente ao elemento identidade e satisfazem a relação de comutação

$$[\mathbf{L}_i, \mathbf{L}_j] = i \sum_k \varepsilon_{ijk} \mathbf{L}_k, \quad (2.28)$$

em que foi introduzido o símbolo de Levi-Civita ε_{ijk} , definido por

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{permutações cíclicas } (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2), \\ 0, & \text{índices repetidos,} \\ -1, & \text{permutações não-cíclicas } (1, 3, 2), (2, 1, 3), (3, 2, 1). \end{cases} \quad (2.29)$$

O fato do determinante dos elementos deste grupo ser igual a $+1$, leva a uma consequência direta a respeito do traço dos geradores, pois

$$\det \mathbf{R}_j(\varphi_j) = \exp[-i\varphi_j \text{Tr}(\mathbf{L}_j)] = 1, \quad (2.30)$$

implica em $\text{Tr}(\mathbf{L}_j) = 0$. Tal relação entre o determinante e a exponencial do traço é devida ao fato de ambos serem invariantes sob uma transformação de similaridade (57).

Analisando de forma similar, o grupo $SU(2)$ é um grupo de Lie compacto formado por matrizes complexas unitárias 2×2 com determinante $+1$ que satisfazem a relação $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{1}$, implicando em $\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}$. Estas matrizes representam "rotações" no espaço bidimensional complexo $\mathbb{C}^2$, mantendo a norma de um vetor complexo invariante após uma transformação, de forma similar ao que acontece com os elementos de $SO(3)$ no espaço real tridimensional (48). Constrói-se uma forma geral para uma matriz de $SU(2)$, considerando-se $\mathbf{U}$ uma matriz arbitrária 2×2 de elementos $u_{ij} \in \mathbb{C}$, satisfazendo as restrições $\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}$ e $\det \mathbf{U} = 1$, de modo que a relação

$$\begin{pmatrix} u_{11}^* & u_{21}^* \\ u_{12}^* & u_{22}^* \end{pmatrix} = \frac{1}{\det \mathbf{U}} \begin{pmatrix} u_{22} & -u_{12} \\ -u_{21} & u_{11} \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

leva às seguintes relações para os elementos da matriz $\mathbf{U}$

$$u_{11} = u_{22}^* \equiv a, \quad u_{12} = -u_{21}^* \equiv b, \quad (2.32)$$

e, portanto, a forma geral de uma matriz de $SU(2)$ é

$$\mathbf{U}(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Além disso, tem-se a restrição $\det \mathbf{U} = aa^* + bb^* = 1$, a qual leva à seguinte escolha para os elementos:

$$a = e^{i\xi} \cos \eta, \quad b = e^{i\zeta} \sin \eta, \quad (2.34)$$

sendo estes os mais gerais possíveis e, portanto,

$$\mathbf{U}(\xi, \eta, \zeta) = \begin{pmatrix} e^{i\xi} \cos \eta & e^{i\zeta} \sin \eta \\ -e^{-i\zeta} \sin \eta & e^{-i\xi} \cos \eta \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

com $0 \leq \eta \leq \pi$, $0 \leq \zeta \leq 2\pi$ e $0 \leq \xi \leq 2\pi$.

Os geradores infinitesimais do grupo $SU(2)$ podem ser encontrados de forma semelhante ao caso dos geradores de $SO(3)$ por meio da diferenciação em torno do elemento identidade $\mathbf{U}(0, 0, \zeta) = \mathbf{1}$. Entretanto, esta parametrização não é a mais adequada para encontrar os geradores de rotações associados a cada direção x_j , sendo mais conveniente partir da representação geral de $SU(2)$, fazendo-se $a = x_0 + ix_3$ e $b = x_2 - ix_1$, com $x_j \in \mathbb{R}$ satisfazendo a restrição $|x_0|^2 + |x_1|^2 + |x_2|^2 + |x_3|^2 = 1$. Assim, a matriz $\mathbf{U}(a, b)$ pode ser reescrita como

$$\mathbf{U} = x_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + i \left[x_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + x_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right], \quad (2.36)$$

da qual, diferenciando em relação a x_j e avaliando na identidade, $x_0 = 1$ e $x_{1,2,3} = 0$, obtém-se

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_2} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Aqui definem-se as quantidades

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

sendo $\mathbf{1}$ a matriz identidade e $\boldsymbol{\sigma}_i$ ($i = 1, 2, 3$) as matrizes de Pauli (42). As matrizes de Pauli são os geradores do grupo $SU(2)$ e, portanto, pertencem à álgebra de Lie deste grupo, satisfazendo a seguinte regra de comutação

$$[\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j] = 2i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \boldsymbol{\sigma}_k. \quad (2.39)$$

Para ficar com a mesma estrutura da álgebra de $SO(3)$, define-se

$$\mathbf{I}_j = \frac{\boldsymbol{\sigma}_j}{2}, \quad (2.40)$$

obtendo assim, a regra de comutação na forma

$$[\mathbf{I}_i, \mathbf{I}_j] = i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \mathbf{I}_k, \quad (2.41)$$

em que $\mathbf{I}_j$ continua sendo um elemento da álgebra $\mathfrak{su}(2)$.

De maneira análoga ao que acontece com os elementos de $SO(3)$, os elementos do grupo $SU(2)$ também tomam a forma exponencial partindo de rotações infinitesimais e, portanto, os elementos podem ser escritos na forma

$$\mathbf{U}_j(\varphi_j) = \exp[-i\varphi_j \mathbf{I}_j] = \exp\left[-i\frac{\varphi_j}{2} \boldsymbol{\sigma}_j\right], \quad \varphi_j \in [0, 2\pi], \quad (2.42)$$

que ao ser expandido em uma série de Taylor em torno de $\varphi_j = 0$, pode ser reescrito conforme

$$\mathbf{U}_j(\varphi_j) = \mathbf{1} \cos \frac{\varphi_j}{2} - i \boldsymbol{\sigma}_j \sin \frac{\varphi_j}{2}. \quad (2.43)$$

Além disso, é possível construir um operador de rotação geral em torno da direção de um vetor arbitrário $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ através de um ângulo θ da seguinte forma

$$\mathbf{U}_{\vec{n}}(\theta) = \exp\left[-i\theta \vec{n} \cdot \vec{\mathbf{I}}\right], \quad \theta \in [0, 2\pi], \quad (2.44)$$

em que $\vec{\mathbf{I}} = (\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2, \mathbf{I}_3)$. Em termos das matrizes de Pauli, tem-se que $\vec{\mathbf{I}} = \frac{\vec{\sigma}}{2}$, de modo que a Equação 2.44 torna-se

$$\mathbf{U}_{\vec{n}}(\theta) = \exp\left[-i\frac{\theta}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}\right], \quad (2.45)$$

em que $\vec{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3)$. Expandindo a Equação 2.45 em série de Taylor, o operador $\mathbf{U}_{\vec{n}}(\theta)$ é reescrito como

$$\mathbf{U}_{\vec{n}}(\theta) = \mathbf{1} \cos \frac{|\vec{n}| \theta}{2} - i \frac{\vec{n} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{n}|} \sin \frac{|\vec{n}| \theta}{2}. \quad (2.46)$$

Outros operadores associados à estrutura algébrica do grupo $SU(2)$, são os elementos $\mathbf{I}^2$ e $\mathbf{I}_\pm$ definidos como segue:

$$\mathbf{I}^2 = \vec{\mathbf{I}} \cdot \vec{\mathbf{I}} = \sum_{k=1}^3 \mathbf{I}_k^2 = \frac{3}{4} \mathbf{1}, \quad (2.47)$$

$$\mathbf{I}_\pm = \mathbf{I}_1 \pm i\mathbf{I}_2. \quad (2.48)$$

De acordo com Bassalo e Cattani (8), se um conjunto de operadores $\{\mathbf{A}_i\}$ comuta com todos os geradores do grupo, $[\mathbf{I}_k, \mathbf{A}_i] = 0$, implica que estes operadores são múltiplos do elemento identidade $\mathbf{1}$, $\mathbf{A}_i = a_i \mathbf{1}$, sendo estes operadores conhecidos como operadores Casimir. Assim, $\mathbf{I}^2$ é o operador Casimir da álgebra $\mathfrak{su}(2)$. Enquanto, os operadores $\mathbf{I}_+$ e $\mathbf{I}_-$ são, respectivamente, os operadores de levantamento e abaixamento, os quais satisfazem as seguintes relações de comutação

$$[\mathbf{I}_\pm, \mathbf{I}_\mp] = \pm 2\mathbf{I}_3, \quad (2.49)$$

$$[\mathbf{I}_3, \mathbf{I}_\pm] = \pm \mathbf{I}_\pm, \quad (2.50)$$

$$[\mathbf{I}^2, \mathbf{I}_\pm] = 0. \quad (2.51)$$

As relações de comutação (2.49-2.51) associadas à álgebra $\mathfrak{su}(2)$ permitem construir também representações em dimensões maiores que a bidimensional (representação fundamental) discutida anteriormente. Neste sentido, a partir das Equações (2.49 - 2.51) é possível construir uma base de vetores que diagonaliza os operadores $\mathbf{I}^2$ e $\mathbf{I}_3$ simultaneamente, uma vez que eles comutam. Assim, são obtidas as equações de autovalores e autovetores associadas aos elementos da álgebra dadas por

$$\mathbf{I}^2 |I, m_I\rangle = I(I+1) |I, m_I\rangle, \quad (2.52)$$

$$\mathbf{I}_3 |I, m_I\rangle = m_I |I, m_I\rangle, \quad (2.53)$$

e a ação dos operadores $\mathbf{I}_\pm$ sobre os elementos $|I, m_I\rangle$ é mostrada a seguir

$$\mathbf{I}_\pm |I, m_I\rangle = \sqrt{(I \mp 1)(I \pm m_I + 1)} |I, m_I \pm 1\rangle, \quad (2.54)$$

em que $m_I = -I, -I+1, \dots, I-1, I$ e a dimensão da representação é $N = 2I+1$, de modo que para $N = 2$ tem-se $I = 1/2$ e as representações matriciais ficam dadas por (2.38). Nota-se ainda, que o produto da álgebra de Lie $\mathfrak{su}(2)$ expressa em (2.41), continua sendo válida para qualquer dimensão.

É possível mostrar que as representações de dimensão $N = 2I+1$ do grupo $SU(2)$ são parametrizadas em termos dos dois parâmetros independentes, a e b , da representação fundamental expressa na Equação 2.33. Para verificar isso, basta utilizar as representações de dimensão $2I+1$ das componentes $\mathbf{I}_j$ do operador $\vec{\mathbf{I}}$ na Equação 2.44. A demonstração matemática detalhada é apresentada na referência (36), em que uma representação geral do grupo $SU(2)$ é obtida para sistemas quânticos discretos com simetria dinâmica $SU(2)$.

Segundo Arfken e Weber (7), as interpretações relativas às rotações como a invariância da norma de um dado vetor, o número de geradores e parâmetros reais independentes dos grupos $SO(3)$ e $SU(2)$, sugerem algum tipo de correspondência entre eles. A relação entre eles pode ser explicitada escrevendo-se duas matrizes, $\mathbf{M}$ e $\mathbf{M}'$, como combinações lineares das matrizes de Pauli conforme

$$\mathbf{M} = x_1 \boldsymbol{\sigma}_1 + x_2 \boldsymbol{\sigma}_2 + x_3 \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

$$\mathbf{M}' = x'_1 \boldsymbol{\sigma}_1 + x'_2 \boldsymbol{\sigma}_2 + x'_3 \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} x'_3 & x'_1 - ix'_2 \\ x'_1 + ix'_2 & -x'_3 \end{pmatrix}. \quad (2.56)$$

Considerando uma transformação unitária da forma $\mathbf{M}' = \mathbf{U}_3 \mathbf{M} \mathbf{U}_3^\dagger$ com

$$\mathbf{U}_3 = \exp \left[-i \frac{\varphi_3}{2} \boldsymbol{\sigma}_3 \right] = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_3/2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_3/2} \end{pmatrix}, \quad (2.57)$$

a qual representa uma rotação em torno do eixo x_3 , a matriz $\mathbf{M}'$ fica sendo dada por

$$\mathbf{M}' = x_1 \mathbf{U}_3 \boldsymbol{\sigma}_1 \mathbf{U}_3^\dagger + x_2 \mathbf{U}_3 \boldsymbol{\sigma}_2 \mathbf{U}_3^\dagger + x_3 \mathbf{U}_3 \boldsymbol{\sigma}_3 \mathbf{U}_3^\dagger. \quad (2.58)$$

Efetutando as transformações sobre cada matriz $\boldsymbol{\sigma}_j$,

$$\mathbf{U}_3 \boldsymbol{\sigma}_1 \mathbf{U}_3^\dagger = \boldsymbol{\sigma}_1 \cos \varphi_3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \sin \varphi_3, \quad (2.59)$$

$$\mathbf{U}_3 \boldsymbol{\sigma}_2 \mathbf{U}_3^\dagger = -\boldsymbol{\sigma}_1 \sin \varphi_3 + \boldsymbol{\sigma}_2 \cos \varphi_3, \quad (2.60)$$

$$\mathbf{U}_3 \boldsymbol{\sigma}_3 \mathbf{U}_3^\dagger = \boldsymbol{\sigma}_3, \quad (2.61)$$

e substituindo estes resultados em (2.58), obtém-se a relação

$$x'_1 \boldsymbol{\sigma}_1 + x'_2 \boldsymbol{\sigma}_2 + x'_3 \boldsymbol{\sigma}_3 = (x_1 \cos \varphi_3 - x_2 \sin \varphi_3) \boldsymbol{\sigma}_1 + (x_1 \sin \varphi_3 + x_2 \cos \varphi_3) \boldsymbol{\sigma}_2 + x_3 \boldsymbol{\sigma}_3, \quad (2.62)$$

na qual identifica-se os elementos de $\mathbf{M}'$ como sendo

$$x'_1 = x_1 \cos \varphi_3 - x_2 \sin \varphi_3, \quad (2.63)$$

$$x'_2 = x_1 \sin \varphi_3 + x_2 \cos \varphi_3, \quad (2.64)$$

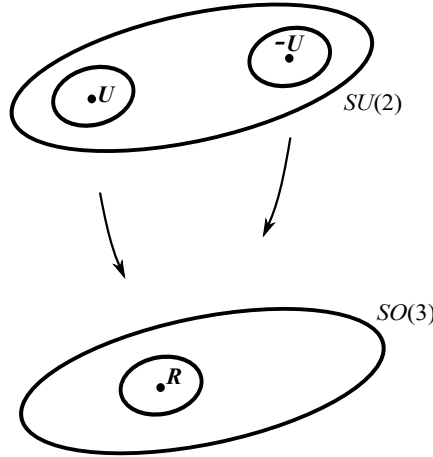
$$x'_3 = x_3, \quad (2.65)$$

podendo ainda expressar estas relações na forma matricial da seguinte maneira

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

Assim, a matriz de transformação é um elemento de $SO(3)$ representado em (2.21) que expressa uma rotação em torno do eixo x_3 através de um ângulo φ_3 . Além disso, as rotações em

Figura 2 – Esquema do homomorfismo entre os grupos $SU(2)$ e $SO(3)$.



Fonte: Figura adaptada de (42) (p.14).

torno do eixo x_1 e x_2 podem ser obtidas de forma análoga (7). Portanto, a correspondência entre os elementos de $SU(2)$ e $SO(3)$ é

$$\mathbf{U}_1(\varphi_1) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi_1}{2} & i \sin \frac{\varphi_1}{2} \\ i \sin \frac{\varphi_1}{2} & \cos \frac{\varphi_1}{2} \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_1 & -\sin \varphi_1 \\ 0 & \sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 \end{pmatrix} = \mathbf{R}_1(\varphi_1), \quad (2.67)$$

$$\mathbf{U}_2(\varphi_2) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi_2}{2} & -\sin \frac{\varphi_2}{2} \\ \sin \frac{\varphi_2}{2} & \cos \frac{\varphi_2}{2} \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} \cos \varphi_2 & 0 & \sin \varphi_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & 0 & \cos \varphi_2 \end{pmatrix} = \mathbf{R}_2(\varphi_2), \quad (2.68)$$

$$\mathbf{U}_3(\varphi_3) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi_3}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\varphi_3}{2}} \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} \cos \varphi_3 & -\sin \varphi_3 & 0 \\ \sin \varphi_3 & \cos \varphi_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{R}_3(\varphi_3). \quad (2.69)$$

Nota-se ainda, que a correspondência não é de um para um, pois o parâmetro φ_j em $\mathbf{R}_j$ varre todo o intervalo de 0 a 2π , enquanto o parâmetro $\frac{\varphi_j}{2}$ em $\mathbf{U}_j$ varre o intervalo de 0 a π . Portanto, há uma correspondência de dois para um, pois

$$\mathbf{R}_j(\varphi_j + 2\pi) = \mathbf{R}_j(\varphi_j), \quad \mathbf{U}_j(\varphi_j + 2\pi) = -\mathbf{U}_j(\varphi_j), \quad (2.70)$$

ou seja, ambos elementos de $SU(2)$, $\mathbf{U}_j(\varphi_j)$ e $\mathbf{U}_j(\varphi_j + 2\pi) = -\mathbf{U}_j(\varphi_j)$, correspondem ao mesmo elemento $\mathbf{R}_j(\varphi_j)$ de $SO(3)$ e, por isso, diz-se que existe um homomorfismo entre os grupos (42), como esquematizado na Figura 2. Além disso, segundo Sattinger e Weaver (42), esses grupos são ditos localmente isomórficos, uma vez que cada vizinhança de $\mathbf{U}_j$ e $-\mathbf{U}_j$ pode ser mapeada na vizinhança de $\mathbf{R}_j$ em uma correspondência de um para um e disto decorre o fato de ambos grupos obedecerem à mesma álgebra expressa nas Equações (2.28) e (2.41) .

2.2.2.2 ESTRUTURA DO GRUPO $SL(2, \mathbb{C})$

O grupo $SL(2, \mathbb{C})$ é um grupo de Lie não-compacto cuja representação fundamental é dada por matrizes 2×2 complexas com determinante $+1$ da forma que segue

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad ad - bc = 1, \quad a, b, c, d \in \mathbb{C}. \quad (2.71)$$

Nota-se que este grupo, em geral, não é unitário, embora a escolha dos parâmetros $c = -b^*$ e $d = a^*$ faz com que a matriz (2.71) torne-se uma matriz de $SU(2)$ expressa em (2.33) e, neste sentido, tem-se que grupo $SU(2)$ é um subgrupo compacto de $SL(2, \mathbb{C})$ (42), representando uma estrutura de grupo mais geral. Outro subgrupo do $SL(2, \mathbb{C})$, é o grupo não-compacto $SU(1, 1)$, cuja representação é obtida fazendo-se a escolha de $c = b^*$ e $d = a^*$ na Equação 2.71, como é visto na referência (56); este grupo não é estudado no trabalho, entretanto, é fundamental em estudos de Óptica Quântica (58), por exemplo.

Para encontrar os geradores do grupo $SL(2, \mathbb{C})$, utiliza-se o fato de que as matrizes $\mathbf{1}$, σ_1 , σ_2 e σ_3 dadas em (2.41), formam uma base de um espaço de matrizes complexas 2×2 , de modo que toda matriz $\mathbf{V} \in SL(2, \mathbb{C})$ pode ser escrita na forma (56)

$$\mathbf{V} = z_0 \mathbf{1} + z_1 \sigma_1 + z_2 \sigma_2 + z_3 \sigma_3 = \begin{pmatrix} z_0 + z_3 & z_1 - iz_2 \\ z_1 + iz_2 & z_0 - z_3 \end{pmatrix}, \quad (2.72)$$

com $\det \mathbf{V} = z_0^2 - z_1^2 - z_2^2 - z_3^2 = 1$ e $z_j \in \mathbb{C}$. Portanto, como os coeficientes z_j são complexos, surgem seis geradores que são representados por

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.73)$$

$$\vartheta_1 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \vartheta_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \vartheta_3 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, \quad (2.74)$$

onde observa-se que $\vartheta_j = i\sigma_j$. Os elementos da álgebra $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ satisfazem as seguintes relações de comutação:

$$[\mathbf{I}_i, \mathbf{I}_j] = i\epsilon_{ijk} \mathbf{I}_k, \quad [\mathbf{I}_i, \tilde{\mathbf{I}}_j] = i\epsilon_{ijk} \tilde{\mathbf{I}}_k, \quad [\tilde{\mathbf{I}}_i, \tilde{\mathbf{I}}_j] = -i\epsilon_{ijk} \mathbf{I}_k, \quad (2.75)$$

onde identificam-se as quantidades $\tilde{\mathbf{I}}_j$ e $\mathbf{I}_j$ como sendo

$$\tilde{\mathbf{I}}_j = i\mathbf{I}_j, \quad \mathbf{I}_j = \frac{\sigma_j}{2}. \quad (2.76)$$

De forma grosseira, pode-se dizer que a única mudança feita em relação ao grupo $SU(2)$ foi a troca dos coeficientes $x_j \in \mathbb{R}$ pelos $z_j \in \mathbb{C}$ e, assim, pode-se dizer que o grupo $SL(2, \mathbb{C})$ é a complexificação de $SU(2)$ (42).

Além disso, de maneira análoga ao que acontece em $\mathfrak{su}(2)$, na álgebra $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ também existem representações maiores que a fundamental, mas neste caso faz-se necessário a fatoração da álgebra em duas estruturas $\mathfrak{su}(2)$ como mostrado em (38). Nesse processo são encontradas

representações de ordem N para as matrizes do grupo $SL(2, \mathbb{C})$, obtidas no estudo da dinâmica de sistemas quânticos multi-níveis com simetria dinâmica $SL(2, \mathbb{C})$.

Os elementos do grupo $SL(2, \mathbb{C})$ podem ser colocados na forma exponencial de maneira análoga aos casos anteriores, considerando-se "rotações" infinitesimais através de ângulos complexos, conforme

$$\mathbf{V}_j(\varphi_j) = \exp[-i\varphi_j \mathbf{I}_j] = \exp\left[-i\frac{\varphi_j}{2} \boldsymbol{\sigma}_j\right], \quad (2.77)$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_j(\theta_j) = \exp[-i\theta_j \tilde{\mathbf{I}}_j] = \exp\left[-i\frac{(i\theta_j)}{2} \boldsymbol{\sigma}_j\right]. \quad (2.78)$$

Neste caso, também é possível construir um operador geral considerando um vetor $\vec{z} = (z_1, z_2, z_3) \in \mathbb{C}^3$ e um número complexo $\nu \in \mathbb{C}$ da seguinte forma

$$\mathbf{V}_{\vec{z}}(\nu) = \exp\left[-\nu \vec{z} \cdot \vec{\mathbf{I}}\right], \quad (2.79)$$

em que $\vec{\mathbf{I}} = (\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2, \mathbf{I}_3)$. Em termos das matrizes de Pauli, pode-se reescrever a Equação 2.79 como

$$\mathbf{V}_{\vec{z}}(\nu) = \exp\left[-\frac{\nu}{2} \vec{z} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}\right], \quad (2.80)$$

podendo ser expandida em série de Taylor em torno de $\nu = 0$, de modo que $\mathbf{V}_{\vec{z}}(\nu)$ fica dado por

$$\mathbf{V}_{\vec{z}}(\nu) = \mathbf{1} \cosh \frac{\sqrt{\vec{z} \cdot \vec{z}} \nu}{2} - \frac{\vec{z} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{\sqrt{\vec{z} \cdot \vec{z}}} \sinh \frac{\sqrt{\vec{z} \cdot \vec{z}} \nu}{2}, \quad (2.81)$$

onde $\vec{z} \cdot \vec{z} = z_1^2 + z_2^2 + z_3^2$ com $z_j \in \mathbb{C}$. Nota-se que para a escolha particular $\vec{z} \in \mathbb{R}^3$ e $\nu = i\theta$ ($\theta \in \mathbb{R}$) na Equação 2.81, recupera-se a expressão (2.46) para o grupo $SU(2)$ (56).

Neste capítulo foram revisados alguns elementos relevantes da Teoria de Grupos, sem aprofundar-se nos aspectos formais, de modo a destacar os pontos essenciais que servirão para a compreensão dos capítulos posteriores. Em uma abordagem similar, o capítulo seguinte tratará de alguns conceitos centrais da Mecânica Quântica, como o espaço de Hilbert finito e a dinâmica de sistemas quânticos discretos, dependentes e independentes do tempo. Com isso, será verificado como estes sistemas quânticos discretos estão associados ao grupo unitário $SU(2)$ no contexto da Mecânica Quântica.

3 SISTEMAS QUÂNTICOS DISCRETOS

A teoria quântica baseia-se em três frentes, segundo Piza (59): a primeira trata dos aspectos cinemáticos nos quais verifica-se as interpretações e consequências da estrutura algébrica adotada, enquanto as outras duas estão associadas aos aspectos da dinâmica e processos de medição. Neste sentido, um espaço vetorial conveniente para tratar sistemas quânticos é o espaço de Hilbert, o qual é um espaço vetorial complexo de dimensão finita ou infinita dotado de um produto interno (espaço normado). Como este trabalho foca em sistemas finitos, será tratado aqui apenas o espaço de Hilbert finito, analisando suas propriedades e verificando como os sistemas quânticos e suas dinâmicas são descritos no contexto formal da Mecânica Quântica e estão conectados com a Teoria de Grupos apresentada no Capítulo 2.

3.1 ESTRUTURA DO ESPAÇO DE HILBERT (ESPAÇOS FINITOS)

Um espaço vetorial é uma estrutura $\{\mathbb{V}, +, \cdot\}$ formada por um conjunto de elementos $\mathbb{V}$, uma operação "+" de adição de elementos de $\mathbb{V}$ e uma operação de multiplicação "." de elementos de $\mathbb{V}$ por escalares de um corpo $\mathbb{K}$, satisfazendo certas propriedades (57). Os elementos de $\mathbb{V}$ são chamados de vetores; para denotar estes objetos será utilizada a notação de Dirac (60), de modo que um vetor é representado pelo *ket* $|\rangle$. Portanto, na estrutura de um espaço vetorial complexo estão definidas operações de soma de vetores e de produto de um número complexo z por um vetor que satisfazem as seguintes propriedades:

I. A soma de dois vetores quaisquer $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle \in \mathbb{V}$ resulta em um terceiro vetor $|\Psi\rangle \in \mathbb{V}$, ou seja, $|\Psi\rangle = |\phi\rangle + |\psi\rangle$, que satisfaz as seguintes propriedades:

i. Associatividade:

$$|\phi\rangle + (|\psi\rangle + |\chi\rangle) = (|\phi\rangle + |\psi\rangle) + |\chi\rangle, \quad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathbb{V}. \quad (3.1)$$

ii. Comutatividade:

$$|\phi\rangle + |\psi\rangle = |\psi\rangle + |\phi\rangle, \quad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathbb{V}. \quad (3.2)$$

iii. Elemento neutro: existe um elemento $|\emptyset\rangle \in \mathbb{V}$, chamado de vetor nulo, tal que

$$|\psi\rangle + |\emptyset\rangle = |\psi\rangle, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathbb{V}. \quad (3.3)$$

iv. Elemento inverso: para todo elemento $|\psi\rangle \in \mathbb{V}$ existe um elemento $|- \psi\rangle \in \mathbb{V}$, chamado de elemento inverso, tal que

$$|\psi\rangle + |- \psi\rangle = |\emptyset\rangle. \quad (3.4)$$

II. O produto de um número complexo z por um vetor $|\varphi\rangle \in \mathbb{V}$ resulta em um novo vetor $|\Psi\rangle = z|\varphi\rangle \in \mathbb{V}$, com as seguintes propriedades:

i. Associatividade:

$$z(w|\varphi\rangle) = (zw)|\varphi\rangle, \quad \forall z, w \in \mathbb{C} \text{ e } |\varphi\rangle \in \mathbb{V}. \quad (3.5)$$

ii. Distributividade (soma de números):

$$(z + w)|\varphi\rangle = z|\varphi\rangle + w|\varphi\rangle, \quad \forall z, w \in \mathbb{C} \text{ e } |\varphi\rangle \in \mathbb{V}. \quad (3.6)$$

iii. Distributividade (soma de vetores):

$$z(|\phi\rangle + |\psi\rangle) = z|\phi\rangle + z|\psi\rangle, \quad \forall z \in \mathbb{C} \text{ e } |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathbb{V}. \quad (3.7)$$

iv. Elemento neutro:

$$1|\varphi\rangle = |\varphi\rangle, \quad (3.8)$$

em que o número complexo $z = 1$ não altera o vetor $|\varphi\rangle \in \mathbb{V}$.

Um espaço vetorial complexo munido de um produto interno definido, chama-se espaço de Hilbert $\mathbb{H}$ (45). Esta operação é tal que associa a cada par de vetores, $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$, um número complexo representado por $\langle\phi|\psi\rangle$ tal que possui as seguintes propriedades:

$$i. \langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$$

$$ii. \langle\phi|\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2\rangle = \alpha_1\langle\phi|\psi_1\rangle + \alpha_2\langle\phi|\psi_2\rangle$$

$$iii. \langle\alpha_1\phi_1 + \alpha_2\phi_2|\psi\rangle = \alpha_1^*\langle\phi_1|\psi\rangle + \alpha_2^*\langle\phi_2|\psi\rangle$$

$$iv. \langle\psi|\psi\rangle \geq 0$$

Para definir este produto, introduz-se o *bra*, denotado por $\langle |$, que é um elemento do espaço dual associado ao *ket*, $| \rangle$, pertencente ao espaço de partida. O espaço dual é constituído pelos funcionais lineares que permitem associar os vetores do espaço de partida a números complexos (61). Para fins práticos, deixa-se os detalhes, destacando a correspondência anti-linear entre *kets* e *bras*, conforme segue (43):

$$\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle \implies \alpha_1^*\langle\psi_1| + \alpha_2^*\langle\psi_2|.$$

De acordo com Sakurai e Napolitano (43), a correspondência entre *kets* e *bras* é unívoca¹.

O número real positivo $\|\psi\|$ é chamado de norma ou comprimento do vetor $|\psi\rangle$. A norma de um vetor $|\psi\rangle$ é definida como

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (3.9)$$

¹ Deve-se ter cuidado com essa afirmação em um contexto geral, pois em espaços contínuos isso pode não ser verdade, como é o caso das ondas planas que existem apenas no espaço dual. Esta questão é destacada na página 111 de (60). Assim, pode-se dizer que para todo *ket* existe um *bra*, mas para nem todo *bra* existe um *ket*; isso justifica o sentido da seta no esquema.

Além disso, para que um $|\psi\rangle$ pertença ao espaço de Hilbert, deve-se ter $\|\psi\| < \infty$ garantindo a existência de uma norma; no contexto da Mecânica Quântica essa é uma condição necessária para que o vetor $|\psi\rangle$ represente um estado físico aceitável (60). A existência de um produto interno permite definir uma norma e, com isso, diz-se que o produto interno implementa a ideia "geométrica" do espaço através de relações de ortogonalidade entre os vetores (59).

Um operador linear $\mathbf{A}$ atua no espaço de Hilbert transformando um vetor $|\varphi\rangle$ em um outro vetor deste espaço $|\psi\rangle$, ou seja, $\mathbf{A}|\varphi\rangle = |\psi\rangle$. Como $\mathbf{A}$ é um operador linear, satisfaz a condição

$$\mathbf{A}(\alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle) = \alpha_1 \mathbf{A}|\psi_1\rangle + \alpha_2 \mathbf{A}|\psi_2\rangle, \quad (3.10)$$

e, além disso, define-se o adjunto de $\mathbf{A}$, denotado por $\mathbf{A}^\dagger$, que atua nos vetores do espaço dual conforme

$$(\alpha_1^* \langle\psi_1| + \alpha_2^* \langle\psi_2|) \mathbf{A}^\dagger = \alpha_1^* \langle\psi_1| \mathbf{A}^\dagger + \alpha_2^* \langle\psi_2| \mathbf{A}^\dagger. \quad (3.11)$$

Para descrição de um sistema físico no espaço de Hilbert, deve-se escolher uma base adequada para representar os vetores e operadores (43). Considerando uma base ortonormal² $\{|\phi_n\rangle\}$,

$$\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm}, \quad (3.12)$$

escrevem-se os vetores do espaço em termos dos elementos desta base, permitindo representar operadores por meio de matrizes através da ação destes operadores sobre os elementos da base. Dois vetores $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ de $\mathbb{H}$ são escritos na base $\{|\phi_n\rangle\}$ conforme

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |\phi_n\rangle, \quad |\psi\rangle = \sum_{m=1}^N d_m |\phi_m\rangle, \quad (3.13)$$

em que os coeficientes $c_n, d_m \in \mathbb{C}$ são as projeções dos vetores $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ na base $\{|\phi_k\rangle\}$, respectivamente, sendo dados por

$$c_n = \langle\phi_n|\varphi\rangle, \quad d_m = \langle\phi_m|\psi\rangle. \quad (3.14)$$

Quanto à norma de $|\varphi\rangle$, tem-se

$$\|\varphi\|^2 = \langle\varphi|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^N |c_n|^2. \quad (3.15)$$

Se $|\varphi\rangle$ está normalizado, então $\sum_{n=1}^N |c_n|^2 = 1$. Analogamente para a norma de $|\psi\rangle$.

Considerando que $|\psi\rangle = \mathbf{A}|\varphi\rangle$, é possível encontrar uma relação apenas entre as componentes escalares dos vetores, reescrevendo esta igualdade em termos da base adotada conforme

$$\sum_{m=1}^N d_m |\phi_m\rangle = \sum_{n=1}^N c_n \mathbf{A}|\phi_n\rangle, \quad (3.16)$$

² Caso os vetores não sejam ortonormais, é possível utilizar um processo chamado de Ortonormalização de Gram-Schmidt para construir uma base ortonormal; este procedimento está discutido em (7) e (57).

projetando em $\langle \phi_m |$ e utilizando a condição de ortogonalidade (3.12), obtém-se

$$d_m = \sum_{n=1}^N \langle \phi_m | \mathbf{A} | \phi_n \rangle c_n. \quad (3.17)$$

Onde o termo $\langle \phi_m | \mathbf{A} | \phi_n \rangle$ do lado direito é o elemento A_{mn} da matriz que representa o operador $\mathbf{A}$ na base $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1}^N$. Assim, as componentes escalares de $|\psi\rangle$ são reescritas como

$$d_m = \sum_{n=1}^N A_{mn} c_n, \quad (3.18)$$

em que $A_{mn} = \langle \phi_m | \mathbf{A} | \phi_n \rangle$. Explicitamente, a representação matricial do operador³ $\mathbf{A}$ é dada por

$$\mathbf{A} \doteq \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \mathbf{A} | \phi_1 \rangle & \cdots & \langle \phi_1 | \mathbf{A} | \phi_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \phi_N | \mathbf{A} | \phi_1 \rangle & \cdots & \langle \phi_N | \mathbf{A} | \phi_N \rangle \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

enquanto $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ são representados pelas matrizes colunas

$$|\varphi\rangle \doteq \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}, \quad |\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_N \end{pmatrix}, \quad (3.20)$$

e os respectivos vetores duais pelas matrizes linhas complexo conjugadas

$$\langle \varphi | \doteq (c_1^* \quad \cdots \quad c_N^*), \quad \langle \psi | \doteq (d_1^* \quad \cdots \quad d_N^*). \quad (3.21)$$

Além da ortogonalidade dos vetores da base, outra propriedade útil associada a estes vetores, é verificada a partir da expansão do estado $|\varphi\rangle$ em termos da base ortonormal $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1}^N$ conforme

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^N |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \varphi \rangle, \quad (3.22)$$

o que implica na relação

$$\sum_{n=1}^N |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \mathbf{1}, \quad (3.23)$$

para que a igualdade seja satisfeita. Esta relação é chamada de relação de completeza e pode ser utilizada, por exemplo, para fazer uma mudança de base (61).

Uma vez que as propriedades básicas do espaço de Hilbert foram descritas, serão introduzidos alguns conceitos fundamentais da Mecânica Quântica, para que na sequência se possa discutir formalmente a evolução temporal de sistemas quânticos discretos. Esses conceitos estão vinculados aos Postulados da Mecânica Quântica (62), tratados aqui apenas de forma breve e interpretativa, que apresentam certa motivação para discussão sobre a extensão não-hermitiana da Mecânica Quântica apresentada no Capítulo 4.

³ Vale destacar que está sendo utilizada a mesma notação para operadores abstratos e suas representações matriciais, uma vez que apenas operadores matriciais são utilizados no trabalho. Além disso, a utilização do acento circunflexo " $\wedge$ " tornaria a notação muito carregada.

3.2 CONCEITOS FUNDAMENTAIS DA MECÂNICA QUÂNTICA

A Mecânica Quântica é uma teoria probabilística e, portanto, fala sobre testes e probabilidades de obtenção dos resultados. Neste sentido, as previsões feitas por ela são testadas através do preparo de um grande número de cópias de um dado sistema (*ensemble*) sobre as quais são feitas operações idênticas. De acordo com os Postulados da Mecânica Quântica, o estado quântico de um sistema físico é representado por um vetor unitário no espaço de Hilbert (*ket*). Assim, dependendo da escolha da base neste espaço, um *ket* descrevendo um estado do sistema será, de forma geral, uma combinação linear dos *kets* da base - Princípio da Superposição - (60). Por exemplo, considerando um sistema de *spin*-1/2 (63), a base do espaço de Hilbert conveniente para descrever este sistema deve ser composta pelo conjunto ortonormal $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, os quais representam o *spin up* e o *spin down* respectivamente. Assim, o estado geral deste sistema, denotado por $|\psi\rangle$, é dado na forma que segue

$$|\psi\rangle = c_1 |\uparrow\rangle + c_2 |\downarrow\rangle, \quad (3.24)$$

em que os coeficientes c_1 e c_2 representam, respectivamente, as amplitudes de probabilidade do sistema estar em um dos estados $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$, enquanto as probabilidades são descritas por $|c_1|^2$ e $|c_2|^2$. Portanto, o vetor de estado $|\psi\rangle$ deve estar normalizado $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, de modo que $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.

Os Postulados afirmam que uma grandeza física corresponde a um operador hermitiano. Um operador hermitiano é definido a partir do conceito de produto interno no espaço de Hilbert, que simbolicamente é representado por $A = A^\dagger$ em que $A^\dagger$ é o adjunto⁴ de A (19). A hermiticidade imposta pelos Postulados da Mecânica Quântica na correspondência entre os observáveis (grandezas físicas) e suas representações (operadores) é devida ao fato de que operadores hermitianos possuem apenas autovalores reais, valores os quais uma grandeza física pode assumir (60). Por exemplo, a componente z do momento angular intrínseco de uma partícula de *spin*-1/2, I_z , possui autovalores $\pm\hbar/2$ que representam os valores de momento angular que essa partícula pode assumir (63). Esta é a motivação para a discussão do Capítulo 4, uma vez que a hermiticidade é uma condição matemática suficiente, mas não necessária, para realidade do espectro (39).

Seja o estado $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |a_j\rangle$ de um sistema quântico, em que cada $|a_j\rangle$ é um autoestado de um operador hermitiano A relativo ao autovalor a_j . Supondo que uma medida sobre o observável A tenha sido efetuada e o resultado obtido tenha sido a_k , então o estado em que o sistema se encontra imediatamente após a medição é $|a_k\rangle$. Assim, diz-se que o ato de medir provocou um "colapso da função de onda" de $|\psi\rangle$ para $|a_k\rangle$. Portanto, este postulado diz respeito ao modo como o observador influencia o sistema observado (64).

Outro postulado fundamental refere-se à dinâmica de um sistema quântico, ou seja, como o estado de um sistema inicialmente preparado evolui com o passar do tempo (59). Neste

⁴ Transposto complexo conjugado.

contexto, a manifestação dos elementos da Teoria de Grupos na estrutura do espaço de Hilbert associado ao sistema fica evidenciada.

3.2.1 EVOLUÇÃO TEMPORAL

A descrição da dinâmica quântica na representação de Schrödinger⁵ é descrita pela equação de Schrödinger uniparamétrica

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \mathbf{H}(t) |\Psi(t)\rangle, \quad (3.25)$$

em que i é a unidade imaginária, $\hbar$ é a constante de Planck reduzida, $|\Psi(t)\rangle$ representa o estado de um sistema físico em um instante de tempo t e $\mathbf{H}(t)$ representa o operador Hamiltoniano do sistema (60). A forma deste operador dita as características do sistema, uma vez que ele possui a informação sobre a energia total do sistema. Além disso, de acordo com a Mecânica Quântica, pelo fato do Hamiltoniano ser um observável físico, ele deve ser representado por um operador hermitiano, $\mathbf{H}(t) = \mathbf{H}^\dagger(t)$.

A partir da solução da Equação 3.25, determina-se a evolução do estado $|\Psi(t)\rangle$ do sistema, em qualquer instante de tempo t , a partir de um estado inicial $|\Psi(t_0)\rangle$, preparado em um instante de tempo inicial t_0 . De forma esquemática,

$$|\Psi(t_0)\rangle \xrightarrow{\text{evolução temporal}} |\Psi(t)\rangle,$$

verificando, portanto, como um sistema muda em relação a um deslocamento temporal $t_0 \rightarrow t$. Desta forma, os dois *kets* do esquema acima relacionam-se via um operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t, t_0)$ conforme

$$|\Psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle, \quad (3.26)$$

levando o sistema de um estado $|\Psi(t_0)\rangle$ para um estado $|\Psi(t)\rangle$, sendo que em $t = t_0$ esta relação é satisfeita somente se $\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}$.

Esta formulação é aplicada no caso de estado puro que sob evolução unitária mantém-se puro no decorrer do tempo (43). Para o caso de estados mistos, a equação de Schrödinger do espaço de Hilbert manifesta-se na forma da equação de Liouville-von Neumann para o chamado operador densidade do sistema (65). Além disso, acrescenta-se que, segundo Nielsen e Chuang (64), todos os postulados podem ser reformulados no contexto do operador densidade. A descrição do operador densidade e a evolução temporal do mesmo são apresentadas no Apêndice A.

No caso de sistemas fechados, a norma de um vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ é a mesma em qualquer instante de tempo, o que pode ser verificado fazendo

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \left[\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \right] + \left[\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \right] |\Psi(t)\rangle. \quad (3.27)$$

⁵ Outras representações podem ser utilizadas para descrever a evolução temporal de um sistema quântico, como a representação de Heisenberg, na qual o operador evolui no tempo enquanto o estado fica fixo (59).

e, além disso, da Equação 3.25, têm-se

$$\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}(t) |\Psi(t)\rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \Psi(t)| = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t)| \mathbf{H}(t), \quad (3.28)$$

que ao serem substituídas na Equação 3.27, resulta em

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 0. \quad (3.29)$$

Isto mostra que a quantidade $\langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle$ é constante para qualquer valor de t e, portanto, de acordo com (3.26),

$$\langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle \Psi(t_0)| \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \mathbf{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle = \langle \Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle, \quad (3.30)$$

o que implica em $\mathbf{U}(t, t_0)$ ser unitário, pois

$$\mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{1}, \quad \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) = \mathbf{U}^{-1}(t, t_0). \quad (3.31)$$

Tomando o determinante desta relação,

$$\det \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \det \mathbf{U}(t, t_0) = |\det \mathbf{U}(t, t_0)|^2 = 1, \quad (3.32)$$

encontra-se que o número complexo com valor absoluto igual a 1 é uma exponencial complexa,

$$\det \mathbf{U}(t, t_0) = \exp [i\alpha(t, t_0)], \quad \alpha(t, t_0) \in \mathbb{R}, \quad (3.33)$$

que é o determinante de uma matriz unitária. Neste sentido, o operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t, t_0)$ representa um elemento do grupo $U(N)$ o qual é composto por matrizes unitárias $N \times N$ com determinante igual a $e^{i\delta}$ ($\delta \in \mathbb{R}$). Por este motivo, um grupo unitário pode sempre ser escrito da forma $U(N) = U(1)SU(N)$, como na referência (55), em que $U(1)$ representa o grupo de todos os números complexos da forma $z = e^{i\delta}$ (círculo unitário no plano complexo), enquanto $SU(N)$ representa o grupo das matrizes unitárias $N \times N$ com determinante $+1$.

O operador de evolução temporal possui a propriedade de composição a partir de t_0 até t conforme

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{U}(t, t_1) \mathbf{U}(t_1, t_0), \quad (3.34)$$

a qual caracteriza o conjunto de transformações definidas por $\mathbf{U}(t, t_0)$ como um grupo contínuo de transformações unitárias, dado que o tempo t é uma variável contínua (59).

Ao substituir a Equação 3.26 na Equação 3.25, verifica-se que o operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t, t_0)$ satisfaz a equação de Schrödinger conforme

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{H}(t) \mathbf{U}(t, t_0), \quad (3.35)$$

com a condição inicial $\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}$. A forma explícita de $\mathbf{U}(t, t_0)$ é obtida resolvendo (3.35), cuja solução depende da forma com a qual o operador Hamiltoniano muda com o tempo. Destacam-se três casos diferentes (43):

I. Operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$ independente do tempo.

A solução da equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal de um sistema cujo operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$ é independente do tempo é expressa na forma

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{H}}{\hbar} (t - t_0) \right]. \quad (3.36)$$

Um exemplo deste tipo aparece quando se considera o Hamiltoniano de interação entre o momento magnético de $spin-1/2$ e um campo magnético constante (43).

II. Operador Hamiltoniano $\mathbf{H}(t)$ dependente do tempo e comuta consigo mesmo em diferentes instantes de tempo.

Quando o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}(t)$ da Equação 3.35 depende do tempo e comuta consigo mesmo em diferentes instantes de tempo, ou seja, $[\mathbf{H}(t_i), \mathbf{H}(t_j)] = 0$ para $t_i \neq t_j$ e, portanto, a solução da Equação 3.25 fica dada por

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathbf{H}(\tau) d\tau \right]. \quad (3.37)$$

Observa-se que se o Hamiltoniano for independente do tempo, o resultado anterior é recuperado. Um exemplo em que este caso ocorre, é na interação do momento magnético de $spin-1/2$ com um campo magnético cuja intensidade varia com o tempo, porém, com direção fixa (63).

III. Operador Hamiltoniano $\mathbf{H}(t)$ dependente do tempo e não comuta consigo mesmo em diferentes instantes de tempo.

Neste caso, além do operador Hamiltoniano depender do tempo ele também não comuta consigo mesmo em diferentes instantes de tempo, ou seja, $[\mathbf{H}(t_i), \mathbf{H}(t_j)] \neq 0$, a solução da equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal torna-se não-trivial, sendo expressa pela série de Dyson (43)

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{H}(t_1) \mathbf{H}(t_2) \cdots \mathbf{H}(t_n), \quad (3.38)$$

em que $t_1 > t_2 > \dots > t_n$, podendo ser colocada em uma forma compacta utilizando o operador de ordenamento temporal $\overleftarrow{T}$, que rearranja os termos em ordem cronológica com o tempo crescendo da direita para a esquerda, de modo que o operador de evolução temporal de (3.38) fica (66)

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \overleftarrow{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathbf{H}(\tau) d\tau \right]. \quad (3.39)$$

Esta é uma expressão geral, de modo que se o Hamiltoniano comutar em tempos diferentes, o resultado anterior expresso em (3.37) é recuperado. Este caso, por exemplo, ocorre na interação de uma partícula de $spin-1/2$ cuja direção muda com o decorrer do tempo.

Devido à dificuldade em encontrar soluções exatas da equação de Schrödinger quando o Hamiltoniano depende do tempo, muitos sistemas são tratados de forma aproximada através de métodos perturbativos ou ainda técnicas que envolvem mudança de referenciais (67), por exemplo. Sendo assim, neste contexto surge a motivação para o uso de simetrias dinâmicas na obtenção de soluções exatas, como é o caso estudado em (37), trabalho no qual os autores propõem um *ansatz* que permite classificar sistemas físicos com simetria dinâmica $SU(2)$ exatamente solúveis. Outra proposta recente é feita em (68), no qual os autores utilizam um procedimento que permite encontrar soluções analíticas exatas para um sistema físico hermitiano dependente do tempo através do mapeamento deste sistema em outro sistema não-hermitiano independente do tempo que, em geral, é mais simples de ser resolvido.

Na próxima seção, a conexão entre grupos e os conceitos básicos de Mecânica Quântica apresentados fica explícita, uma vez que será analisada a dinâmica de um sistema com simetria $SU(2)$ para os casos independente e dependente do tempo, o qual será tratado utilizando o método proposto por Messina e Nakazato (37).

3.3 SISTEMA QUÂNTICO COM SIMETRIA DINÂMICA $SU(2)$

Um sistema é dito com simetria dinâmica $SU(2)$ quando o Hamiltoniano deste sistema é expresso como uma combinação linear dos elementos da álgebra $\mathfrak{su}(2)$, de modo que o Hamiltoniano também pertence à álgebra $\mathfrak{su}(2)$. Portanto, o operador de evolução temporal deve pertencer ao grupo $SU(2)$ (36); isto pode ser visto pela forma exponencial do operador de evolução (3.36) em comparação com (2.45). O anterior também é válido para outras simetrias, como apresentado nas referências (38, 69) para os respectivos grupos $SL(2, \mathbb{C})$ e $SU(3)$.

3.3.1 SISTEMA COM SIMETRIA DINÂMICA $SU(2)$ INDEPENDENTE DO TEMPO

Para o caso de um sistema quântico de dois níveis, representa-se o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$ deste sistema por meio de uma matriz escrita em termos da base $\{\mathbf{I}_0, \mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2, \mathbf{I}_3\}$, com $\mathbf{I}_0 = \frac{1}{2}$ e $\mathbf{I}_i = \frac{\sigma_i}{2}$,

$$\mathbf{H} = \hbar c_0 \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^3 \hbar c_j \frac{\sigma_j}{2}, \quad (3.40)$$

em que $c_k \in \mathbb{R}$ pelo fato de $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$ e os coeficientes c_j possuem unidade de frequência s^{-1} .

O operador de evolução temporal associado a este Hamiltoniano pode ser encontrado substituindo-se (3.40) em (3.36). Assumindo que $t_0 = 0$, tem-se

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\hbar c_0 \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^3 \hbar c_j \frac{\sigma_j}{2} \right) t \right]. \quad (3.41)$$

Como $[\sigma_j, 1] = 0$, esta expressão pode ser reescrita da seguinte forma

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-i \frac{c_0 1}{2} t \right] \exp \left[-i \sum_{j=1}^3 \frac{c_j \sigma_j}{2} t \right] \quad (3.42)$$

O primeiro termo da expressão (3.42) gera um termo de fase complexa

$$\exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0 \mathbf{1}}{2} t \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i \frac{\mathbf{c}_0}{2} t \right)^n}{n!} \mathbf{1}^n = \mathbf{1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i \frac{\mathbf{c}_0}{2} t \right)^n}{n!} = \mathbf{1} \exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0}{2} t \right], \quad (3.43)$$

enquanto o segundo termo pode ser reescrito em uma forma compacta, utilizando a notação $\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}} = \sum_{j=1}^3 \mathbf{c}_j \boldsymbol{\sigma}_j$, conforme

$$\exp \left[-i \sum_{j=1}^3 \frac{\mathbf{c}_j \boldsymbol{\sigma}_j}{2} t \right] = \exp \left[-i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{2} t \right], \quad (3.44)$$

de modo que a expressão (3.42) torna-se

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0}{2} t \right] \exp \left[-i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{2} t \right]. \quad (3.45)$$

Além disso, uma expansão em série de Taylor permite reescrever o segundo termo como

$$\exp \left[-i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{2} t \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{2} t \right)^n}{n!} = \mathbf{1} \cos \frac{\mathbf{c} t}{2} - i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{\mathbf{c}} \sin \frac{\mathbf{c} t}{2}, \quad (3.46)$$

uma vez que propriedades associadas às matrizes de Pauli fornecem $(\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \mathbf{c}^2 \mathbf{1}$, com $\mathbf{c}$ sendo o módulo do vetor $\vec{\mathbf{c}}$ dado por $\mathbf{c} = \sqrt{\mathbf{c}_1^2 + \mathbf{c}_2^2 + \mathbf{c}_3^2}$. Portanto, substituindo a expressão (3.46) em (3.45), obtém-se

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0}{2} t \right] \left(\mathbf{1} \cos \frac{\mathbf{c} t}{2} - i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{\mathbf{c}} \sin \frac{\mathbf{c} t}{2} \right). \quad (3.47)$$

O determinante de $\mathbf{U}(t)$ pode ser calculado pela expressão (3.45), resultando em

$$\det \mathbf{U}(t) = \exp [-i \mathbf{c}_0 t] \exp \left[\text{Tr} \left(-i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{2} t \right) \right] = \exp [-i \mathbf{c}_0 t], \quad (3.48)$$

pois $\text{Tr}(\boldsymbol{\sigma}_j) = 0$. Assim, o operador de evolução temporal pertence ao grupo $U(2)$, uma vez que é representado por uma matriz unitária 2×2 com determinante igual a $\exp [-i \mathbf{c}_0 t]$.

A escolha particular em que $\mathbf{c}_0 = 0$ faz com que o operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t)$ passe a ser um elemento do grupo $SU(2)$, uma vez que $\det \mathbf{U}(t) = 1$. Neste caso, o operador $\mathbf{U}(t)$ torna-se

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{2} t \right] = \mathbf{1} \cos \frac{\mathbf{c} t}{2} - i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{\mathbf{c}} \sin \frac{\mathbf{c} t}{2}, \quad (3.49)$$

cujas representação matricial é dada em termos da representação fundamental de $SU(2)$

$$\mathbf{U}(t) = \begin{pmatrix} a(t) & b(t) \\ -b^*(t) & a^*(t) \end{pmatrix}, \quad (3.50)$$

onde

$$a(t) = \cos \frac{\mathbf{c} t}{2} - i \frac{\mathbf{c}_3}{\mathbf{c}} \sin \frac{\mathbf{c} t}{2}, \quad (3.51)$$

$$b(t) = -i \frac{(\mathbf{c}_1 - i \mathbf{c}_2)}{\mathbf{c}} \sin \frac{\mathbf{c} t}{2}, \quad (3.52)$$

com $\mathbf{c} = \sqrt{\mathbf{c}_1^2 + \mathbf{c}_2^2 + \mathbf{c}_3^2}$.

Além disso, para $\mathbf{c}_0 = 0$ o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$, gerador da transformação (3.49), torna-se um elemento da álgebra de Lie $\mathfrak{su}(2)$ representado por

$$\mathbf{H} = \hbar \mathbf{c}_1 \mathbf{I}_1 + \hbar \mathbf{c}_2 \mathbf{I}_2 + \hbar \mathbf{c}_3 \mathbf{I}_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Omega & \omega \\ \omega^* & -\Omega \end{pmatrix}, \quad \text{Tr}(\mathbf{H}) = 0, \quad (3.53)$$

na qual as funções real Ω e complexa ω são definidas como

$$\Omega = \mathbf{c}_3, \quad \omega = \mathbf{c}_1 - i\mathbf{c}_2. \quad (3.54)$$

A partir da parametrização do Hamiltoniano, os parâmetros $a(t)$ e $b(t)$ da matriz do operador de evolução temporal, tornam-se

$$a(t) = \cos \frac{\kappa t}{2} - i \frac{\Omega}{\kappa} \sin \frac{\kappa t}{2}, \quad (3.55)$$

$$b(t) = -i \frac{\omega}{\kappa} \sin \frac{\kappa t}{2}, \quad (3.56)$$

sendo κ dado por

$$\kappa = \sqrt{\Omega^2 + |\omega|^2}. \quad (3.57)$$

Verifica-se que a condição $\det \mathbf{U}(t) = |a(t)|^2 + |b(t)|^2 = 1$ é satisfeita para todo t .

A seguir, será discutido a evolução temporal quando o Hamiltoniano depende do tempo.

3.3.2 SISTEMA COM SIMETRIA DINÂMICA $SU(2)$ DEPENDENTE DO TEMPO

Como já mencionado anteriormente, quando o operador Hamiltoniano depende do tempo é necessário atentar-se sobre a comutação deste operador consigo mesmo em tempos diferentes. O Hamiltoniano hermitiano geral é representado pela matriz

$$\mathbf{H}(t) = \hbar \mathbf{c}_0(t) \mathbf{I}_0 + \sum_{j=1}^3 \hbar \mathbf{c}_j(t) \mathbf{I}_j. \quad (3.58)$$

O comutador do Hamiltoniano em tempos distintos é

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}(t), \mathbf{H}(t')] &= \left[\hbar \mathbf{c}_0(t) \mathbf{I}_0 + \sum_{j=1}^3 \hbar \mathbf{c}_j(t) \mathbf{I}_j, \hbar \mathbf{c}_0(t') \mathbf{I}_0 + \sum_{j=1}^3 \hbar \mathbf{c}_j(t') \mathbf{I}_j \right] \\ &= \hbar^2 \mathbf{c}_0(t) \mathbf{c}_0(t') [\mathbf{I}_0, \mathbf{I}_0] + \sum_{j=1}^3 \hbar^2 \mathbf{c}_0(t) \mathbf{c}_j(t') [\mathbf{I}_0, \mathbf{I}_j] + \\ &\quad + \sum_{j=1}^3 \hbar^2 \mathbf{c}_j(t) \mathbf{c}_0(t') [\mathbf{I}_j, \mathbf{I}_0] + \sum_{j,k=1}^3 \hbar^2 \mathbf{c}_j(t) \mathbf{c}_k(t') [\mathbf{I}_j, \mathbf{I}_k], \end{aligned} \quad (3.59)$$

uma vez que o operador $\mathbf{I}_0$ é proporcional à identidade, ele comuta com qualquer operador e, assim, apenas o último termo permanece. Utilizando a relação de comutação (2.41) esta expressão fica escrita como

$$[\mathbf{H}(t), \mathbf{H}(t')] = i\hbar^2 \sum_{j,k,l=1}^3 \varepsilon_{jkl} \mathbf{c}_j(t) \mathbf{c}_k(t') \mathbf{I}_l. \quad (3.60)$$

ou ainda, utilizando-se notação vetorial,

$$[\mathbf{H}(t), \mathbf{H}(t')] = i\hbar^2 [\vec{c}(t) \times \vec{c}(t')] \cdot \vec{\mathbf{I}}. \quad (3.61)$$

Portanto, verifica-se que este comutador é zero somente para os casos em que

$$\mathbf{c}_\mu(t)\mathbf{c}_\nu(t') - \mathbf{c}_\nu(t)\mathbf{c}_\mu(t') = 0, \quad \mu \neq \nu. \quad (3.62)$$

Um sistema da forma (3.58) cujo operador Hamiltoniano apresenta dependência temporal e comuta consigo mesmo, é o caso em que os coeficientes $\mathbf{c}_j(t)$ da equação (3.58) dependem da mesma função do tempo, por exemplo, $\mathbf{c}_j(t) = \alpha_j f(t)$ para $j \neq 0$. Para $\mathbf{c}_0(t)$ deixa-se uma função arbitrária, uma vez que a identidade comuta com todos os operadores. Neste caso em particular, o operador Hamiltoniano pode ser escrito como

$$\mathbf{H}(t) = \hbar \mathbf{c}_0(t) \mathbf{I}_0 + f(t) \sum_{j=1}^3 \hbar \alpha_j \mathbf{I}_j, \quad (3.63)$$

em que identifica-se o operador que pertence à álgebra $\mathfrak{su}(2)$

$$\mathbf{H}_0 = \sum_{j=1}^3 \hbar \alpha_j \mathbf{I}_j = \hbar \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}}{2}, \quad (3.64)$$

com $\vec{\alpha} \cdot \vec{\mathbf{I}} = \sum_{j=1}^3 \alpha_j \sigma_j / 2$. O comutador (3.60) de fato se anula, pois

$$[\mathbf{H}(t), \mathbf{H}(t')] = [\hbar \mathbf{c}_0(t) \mathbf{I}_0 + f(t) \mathbf{H}_0, \hbar \mathbf{c}_0(t') \mathbf{I}_0 + \mathbf{H}_0 f(t')] = 0. \quad (3.65)$$

A forma matricial explícita do Hamiltoniano deste sistema fica dada por

$$\mathbf{H}(t) = \frac{\hbar \mathbf{c}_0(t)}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar f(t)}{2} \begin{pmatrix} \Omega_0 & \omega_0 \\ \omega_0^* & -\Omega_0 \end{pmatrix} \quad (3.66)$$

em que os elementos Ω_0 e ω_0 são definidos como

$$\Omega_0 = \alpha_3, \quad \omega_0 = \alpha_1 - i\alpha_2. \quad (3.67)$$

A equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t)$ deste sistema é

$$i\hbar \dot{\mathbf{U}}(t) = \mathbf{H}(t) \mathbf{U}(t) = \frac{\hbar \mathbf{c}_0(t)}{2} \mathbf{U}(t) + f(t) \mathbf{H}_0 \mathbf{U}(t), \quad (3.68)$$

cuja solução é dada por (3.37) conforme

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathbf{H}(\tau) d\tau \right] = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\hbar \mathbf{c}_0(\tau) \mathbf{I}_0 + f(\tau) \sum_{j=1}^3 \hbar \alpha_j \mathbf{I}_j \right) d\tau \right], \quad (3.69)$$

que pode ser reescrito como

$$\mathbf{U}(t) = \exp [-i\mathbf{I}_0 \mathbf{C}_0(t) - i\mathbf{H}_0 \mathbf{F}(t)], \quad (3.70)$$

em que identificam-se as quantidades

$$C_0(t) = \int_0^t c_0(\tau) d\tau, \quad F(t) = \int_0^t f(\tau) d\tau. \quad (3.71)$$

O primeiro termo do argumento de (3.70) comuta com o segundo, de modo que a exponencial pode ser separada em um produto de exponenciais e, além disso, utilizando-se a notação vetorial (3.64), o operador de evolução temporal pode ser reescrito na forma

$$U(t) = \exp \left[-i \frac{C_0(t)}{2} \right] \exp \left[-i \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}}{2} F(t) \right]. \quad (3.72)$$

O segundo termo pode ser reescrito de maneira semelhante ao da relação (3.47), pois H_0 é o elemento da álgebra do grupo $SU(2)$ e a função $F(t)$ é o parâmetro contínuo deste grupo e, assim, uma expansão em série de Taylor em torno da identidade permite reescrevê-lo como

$$\exp \left[-i \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}}{2} F(t) \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left[-i \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}}{2} F(t) \right]^n}{n!} = \mathbf{1} \cos \frac{\alpha F(t)}{2} - i \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}}{\alpha} \sin \frac{\alpha F(t)}{2}. \quad (3.73)$$

Portanto, o operador de evolução temporal fica

$$U(t) = \exp \left[-i \frac{C_0(t)}{2} \right] \left[\mathbf{1} \cos \frac{\alpha F(t)}{2} - i \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}}{\alpha} \sin \frac{\alpha F(t)}{2} \right], \quad (3.74)$$

que representa um elemento do grupo unitário $U(2)$ com determinante igual a $\exp[-iC_0(t)]$. Assim, para que o operador de evolução temporal seja um elemento de $SU(2)$, faz-se $C_0(t) = 0$, o que resulta em

$$U(t) = \mathbf{1} \cos \frac{\alpha F(t)}{2} - i \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}}{\alpha} \sin \frac{\alpha F(t)}{2}, \quad (3.75)$$

ou na forma matricial

$$U(t) = \begin{pmatrix} a(t) & b(t) \\ -b^*(t) & a^*(t) \end{pmatrix}, \quad (3.76)$$

em que os parâmetros independentes $a(t)$ e $b(t)$ são dados por

$$a(t) = \cos \frac{\alpha F(t)}{2} - i \frac{\alpha_3}{\alpha} \sin \frac{\alpha F(t)}{2}, \quad b(t) = -i \frac{(\alpha_1 - i\alpha_2)}{\alpha} \sin \frac{\alpha F(t)}{2}, \quad (3.77)$$

ou em termos dos parâmetros do Hamiltoniano definidos em (3.67)

$$a(t) = \cos \frac{\kappa_0 F(t)}{2} - i \frac{\Omega_0}{\kappa_0} \sin \frac{\kappa_0 F(t)}{2}, \quad (3.78)$$

$$b(t) = -i \frac{\omega_0}{\kappa_0} \sin \frac{\kappa_0 F(t)}{2}, \quad (3.79)$$

onde $\alpha = \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2} = \sqrt{\Omega_0^2 + |\omega_0|^2} = \kappa_0$.

Nota-se que no caso em que $f(t)$ é uma função constante diferente de zero, os elementos $a(t)$ e $b(t)$ são os mesmos encontrados para o caso particular em que os coeficientes do Hamiltoniano são constantes.

Nos casos mais gerais, o comutador (3.60) não se anula e o operador de evolução temporal fica expresso por (3.39), sendo bastante complicado obter a forma da solução da equação de Schrödinger. Desta forma, uma técnica que permite contornar o problema é proposta por Messina e Nakazato (37), a qual possibilita encontrar casos nos quais os parâmetros a e b do operador de evolução temporal de sistemas com simetria $SU(2)$ de forma exata e, portanto, faz-se uma análise deste método.

O método de Messina-Nakazato consiste em encontrar Hamiltonianos solúveis para sistemas de dois níveis, mas que pode ser estendido para N -níveis, uma vez que a representação N -dimensional do grupo $SU(2)$ depende apenas dos dois parâmetros da representação fundamental deste grupo (36). A ideia do método está em estabelecer uma relação entre o Hamiltoniano dependente do tempo e o operador de evolução temporal correspondente por meio de uma função arbitrária, de modo que esta técnica permite encontrar modelos de sistemas de dois níveis analiticamente solúveis.

De acordo com os princípios da dinâmica quântica, o operador Hamiltoniano está associado ao operador de evolução temporal via equação de Schrödinger (3.35), que pode ser invertida e reescrita na forma

$$\mathbf{H}(t) = i\hbar \left[\frac{d}{dt} \mathbf{U}(t) \right] \mathbf{U}^\dagger(t). \quad (3.80)$$

No caso de sistemas com simetria dinâmica $SU(2)$, o Hamiltoniano geral do sistema é escrito como

$$\mathbf{H}(t) = \sum_{j=1}^3 \hbar \mathbf{c}_j(t) \mathbf{I}_j, \quad \mathbf{c}_j \in \mathbb{R}, \quad (3.81)$$

e as formas matriciais do Hamiltoniano e do operador de evolução temporal ficam dadas conforme segue

$$\mathbf{H}(t) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Omega(t) & \omega(t) \\ \omega^*(t) & -\Omega(t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}(t) = \begin{pmatrix} a(t) & b(t) \\ -b^*(t) & a^*(t) \end{pmatrix}, \quad (3.82)$$

onde $\Omega(t) = \mathbf{c}_3(t)$, $\omega(t) = \mathbf{c}_1(t) - i\mathbf{c}_2(t)$, $a(t)$ e $b(t)$ são funções complexas. Assim, a Equação 3.80 assume a forma

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Omega(t) & \omega(t) \\ \omega^*(t) & -\Omega(t) \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \dot{a}(t) & \dot{b}(t) \\ -\dot{b}^*(t) & \dot{a}^*(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^*(t) & -b(t) \\ b^*(t) & a(t) \end{pmatrix}, \quad (3.83)$$

onde os pontos sobrescritos indicam as derivadas em relação ao tempo. Nesta forma, fica indicada a relação entre as funções $\Omega(t)$ real e $\omega(t)$ complexa do Hamiltoniano e as funções complexas $a(t)$ e $b(t)$ do operador de evolução temporal, resultando no conjunto de equações diferenciais

$$-i\frac{\Omega(t)}{2} = \dot{a}(t)a^*(t) + \dot{b}(t)b^*(t), \quad -i\frac{\omega(t)}{2} = \dot{b}(t)a(t) - \dot{a}(t)b(t), \quad (3.84)$$

$$i\frac{\omega^*(t)}{2} = \dot{b}^*(t)a^*(t) - \dot{a}^*(t)b^*(t), \quad i\frac{\Omega(t)}{2} = \dot{a}^*(t)a(t) + \dot{b}^*(t)b(t), \quad (3.85)$$

sujeitas a restrição

$$\det \mathbf{U}(t) = a(t)a^*(t) + b(t)b^*(t) = 1, \quad (3.86)$$

e a condição inicial

$$a(0) = 1, \quad b(0) = 0, \quad (3.87)$$

devido ao fato de que $U(0) = 1$.

A essência do método está na técnica utilizada para resolver as equações diferenciais, a qual estabelece a ligação entre os operadores de evolução temporal e a geração de Hamiltonianos integráveis. Portanto, para resolver as equações diferenciais, considera-se as seguintes equações

$$-i\frac{\Omega}{2} = \dot{a}a^* + \dot{b}b^*, \quad (3.88)$$

$$-i\frac{\omega}{2} = \dot{b}a - \dot{a}b, \quad (3.89)$$

em que omitiu-se a dependência temporal para não sobrecarregar a notação. Pode-se observar que a equação (3.89) pode ser resolvida para b em termos de a e ω se reescrita na forma

$$-i\frac{\omega}{2a^2} = \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right), \quad (3.90)$$

resultando na relação

$$b = \frac{a}{2i} \int_0^t \frac{\omega}{a^2} d\tau = \frac{a}{2i} X, \quad (3.91)$$

onde identifica-se a função complexa $X = X(t)$ como sendo

$$X = \int_0^t \frac{\omega}{a^2} d\tau, \quad \dot{X} = \frac{\omega}{a^2}, \quad X(0) = 0. \quad (3.92)$$

Substituindo-se (3.91) na equação diferencial (3.88) e multiplicando ambos os lados pela função a , tem-se

$$-i\frac{a\Omega}{2} = \dot{a} \left[aa^* \left(1 + \frac{1}{4} XX^* \right) \right] + \frac{a^2 a^* \dot{X} X^*}{4}. \quad (3.93)$$

Observa-se que o termo entre colchetes é o determinante de U em termos da função X

$$\det U = aa^* + bb^* = aa^* \left(1 + \frac{1}{4} XX^* \right) = 1, \quad (3.94)$$

de modo que a Equação 3.93 torna-se

$$-i\frac{a\Omega}{2} = \dot{a} + \frac{\omega a^* X^*}{4}. \quad (3.95)$$

uma vez que $\dot{X} = \omega/a^2$. Assim, obtém-se uma equação diferencial para a dependendo dos parâmetros Ω , ω e X , conforme

$$\dot{a} = \frac{a\Omega}{2i} - \frac{\omega a^* X^*}{4}. \quad (3.96)$$

Soluções para os parâmetros a e b do operador de evolução temporal em termos de parâmetros Ω e ω arbitrários do Hamiltoniano, são difíceis. Entretanto, segundo Messina e Nakazato (37), se ao invés de buscar soluções para quaisquer funções de entrada, Ω e ω , buscar para qualquer Ω , formas de ω para as quais o problema seja exatamente solúvel, a dinâmica

do sistema poderá ser descrita sem nenhuma aproximação. Neste sentido, este método possibilita a classificação de soluções U para diferentes operadores Hamiltonianos. Reescrevendo a Equação 3.96 em termos de Ω e X , tratando X como uma função arbitrária,

$$\dot{a} = \frac{a\Omega}{2i} - \frac{a^2 a^* \dot{X} X^*}{4}, \quad (3.97)$$

$$\dot{a} = - \left[i \frac{\Omega}{2} + \frac{\dot{X} X^*}{4 + X X^*} \right] a, \quad (3.98)$$

em que utilizou-se o resultado de (3.94) que permite escrever o produto aa^* como

$$aa^* = |a|^2 = \frac{4}{4 + X X^*}. \quad (3.99)$$

A solução da Equação 3.98 é dada em termos de Ω e X da forma que segue

$$a = \exp \left[- \int_0^t \frac{\Re(X X^*)}{4 + X X^*} d\tau \right] \exp \left[- \frac{i}{2} \int_0^t \Omega d\tau - i \int_0^t \frac{\Im(\dot{X} X^*)}{4 + X X^*} d\tau \right], \quad (3.100)$$

em que identifica-se

$$|a| = \exp \left[- \int_0^t \frac{\Re(\dot{X} X^*)}{4 + X X^*} d\tau \right] = \frac{2}{(4 + X X^*)^{1/2}}, \quad (3.101)$$

e, portanto, a expressão (3.100) torna-se

$$a = \frac{2}{(4 + X X^*)^{1/2}} \exp \left[- \frac{i}{2} \int_0^t \Omega d\tau - i \int_0^t \frac{\Im(\dot{X} X^*)}{4 + X X^*} d\tau \right]. \quad (3.102)$$

Assim, dadas as funções Ω e X , determina-se exatamente os parâmetros do operador de evolução temporal, a e b , por meio de (3.91) e (3.102) e, além disso, pode-se encontrar ω por (3.92) para se obter a forma do Hamiltoniano.

Este método não trata de uma forma geral para resolver qualquer sistema quântico, mas no contexto de problemas exatamente solúveis, permite efetuar uma engenharia de Hamiltonianos com simetria $SU(2)$, no sentido de que é possível estabelecer a relação entre um dado X e o operador Hamiltoniano correspondente, cuja dinâmica pode ser descrita de forma exata.

Até agora, foi discutido sobre a dinâmica de sistemas quânticos regida sob evolução unitária dada em termos da representação do grupo $SU(2)$, que caracteriza um sistema fechado. Do ponto de vista da Teoria de Grupos, também é possível considerar grupos não-unitários, como por exemplo o grupo $SL(2, \mathbb{C})$ discutido no Capítulo 2, o qual está associado à dinâmica de sistemas dissipativos (38). O Hamiltoniano escrito na base composta pelos elementos da álgebra $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ é um operador não-hermitiano, que de acordo com os Postulados da Mecânica Quântica brevemente discutidos, não deve representar um observável físico. Entretanto, nos últimos anos muitos pesquisadores vêm contribuindo na frente não-hermitiana da Mecânica Quântica (21). Portanto, no capítulo seguinte, algumas ideias propostas na literatura são apresentadas e, de forma análoga ao sistema quântico $SU(2)$, é obtida a evolução temporal não-unitária que inclui a simetria do grupo $SL(2, \mathbb{C})$.

4 MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-HERMITIANA

A Mecânica Quântica convencional postula que um observável deve ser representado por um operador hermitiano, uma vez que as quantidades mensuráveis estão associadas aos seus autovalores reais (13). Entretanto, a hermiticidade é um caráter matemático e não físico, que representa uma condição suficiente, porém, não necessária para a realidade do espectro de um operador (14). Portanto, neste capítulo pretende-se discutir de maneira breve algumas formulações que surgem no contexto não-hermitiano, com o intuito de descrever a dinâmica de um sistema não-hermitiano que inclui a simetria do grupo $SL(2, \mathbb{C})$. Neste contexto, analisar-se-á a representação biortogonal (32), a qual está associada ao estudo da dinâmica não-hermitiana proposta por Dattoli, Torre e Mignani (30). Ainda no contexto da dinâmica, também será analisado o formalismo proposto por Bertlmann, Grimus e Hiesmayr (34). Isso será útil na descrição fenomenológica da dinâmica de relaxação de um sistema de $spin-1/2$ apresentada no Capítulo 5.

4.1 CONTEXTUALIZAÇÃO SOBRE A FORMULAÇÃO NÃO-HERMITIANA

A hermiticidade de um operador é definida em relação a um produto interno, o qual deve satisfazer a definição apresentada na seção 3.1. Considerando um espaço de Hilbert discreto $\mathbb{H}$, como definido no Capítulo 3, tem-se que a primeira entrada do seu produto interno é anti-linear, de modo que para um operador $\mathbf{A}$ tal que $\mathbf{A} : \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$ é válido

$$\langle \psi | \mathbf{A} \phi \rangle = \langle \mathbf{A}^\dagger \psi | \phi \rangle, \quad (4.1)$$

sendo um operador hermitiano definido por

$$\langle \psi | \mathbf{A} \phi \rangle = \langle \mathbf{A} \psi | \phi \rangle, \quad (4.2)$$

para quaisquer vetores arbitrários $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathbb{H}$. Assim, um operador é hermitiano se o seu domínio é o mesmo tanto no espaço de partida quanto no espaço dual. No caso discreto, o conceito de hermiticidade é equivalente ao conceito de auto-adjunticidade, de modo que, representa-se a hermiticidade simbolicamente por $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$ (19).

Como já discutido, o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$ que descreve um sistema quântico deve ser hermitiano ($\mathbf{H}^\dagger = \mathbf{H}$), o que garante a realidade do espectro e a unitariedade da evolução temporal do sistema, implicando na conservação da probabilidade (ver Equação 3.29).

Apesar dos resultados da Mecânica Quântica hermitiana serem bem aceitos, o requisito sobre a hermiticidade do Hamiltoniano foi contestado por Bender e Boettcher (14), mostrando que o espectro de um Hamiltoniano não-hermitiano da forma

$$\mathbf{H} = \mathbf{p}^2 + \mathbf{x}^2(i\mathbf{x})^\varepsilon, \quad (4.3)$$

em que $\mathbf{p}$ e $\mathbf{x}$ são os respectivos operadores de momentum e posição, é real para $\varepsilon \geq 0$; quando $\varepsilon = 0$ o espectro do oscilador harmônico quântico é recuperado (14). Neste estudo, verificou-se

que apesar do Hamiltoniano não ser hermitiano, ele possuía a chamada simetria- $\mathcal{PT}$, a qual expressa invariância sob paridade ($\mathcal{P}$) e reversão temporal ($\mathcal{T}$). Com esta observação, afirmaram que a hermiticidade era uma condição restritiva, propondo sua substituição pela condição mais fraca de invariância sob reflexões espaço-temporais, possibilitando uma extensão não-hermitiana da Mecânica Quântica (15).

Na construção da Mecânica Quântica $\mathcal{PT}$ -simétrica, foi introduzido inicialmente um produto interno modificado, denotado por $\langle \cdot | \cdot \rangle_{\mathcal{PT}}$, o qual dava origem a uma métrica indefinida, que resultava em possíveis normas negativas para os vetores de estado e, portanto, não definia um espaço de Hilbert físico. Para contornar este problema, Bender, Brody e Jones propuseram a introdução de outra simetria associada à simetria $\mathcal{PT}$, chamada de conjugação ($\mathcal{C}$) (16). Com esta simetria, tornou-se possível construir um produto interno definido, denotado por $\langle \cdot | \cdot \rangle_{\mathcal{CPT}}$, em que a norma de um vetor de estado é sempre positiva, estando de acordo com a interpretação probabilística do formalismo padrão da Mecânica Quântica. Portanto, com a simetria $\mathcal{CPT}$, Bender e colaboradores mostraram ser possível construir uma Mecânica Quântica com Hamiltonianos que, apesar de não serem hermitianos, possuem autovalores reais e geram uma evolução unitária para o sistema em relação a essa nova métrica (17). Uma abordagem didática sobre simetria $\mathcal{PT}$ é feita em (70), em que discute-se a equivalência entre os formalismos $\mathcal{PT}$ -simétrica e convencional.

Os resultados obtidos com o formalismo $\mathcal{PT}$ -simétrico, mostraram-se consistentes com a teoria quântica padrão. Além disso, uma generalização foi proposta por Mostafazadeh em uma série de trabalhos (39, 71, 72), nos quais demonstrou que a simetria $\mathcal{PT}$ é um exemplo específico da condição mais geral, denominada pseudo-hermiticidade, necessária para a realidade do espectro de um operador. Esta condição está relacionada à modificação adequada no produto interno do espaço de Hilbert, em relação ao qual o operador Hamiltoniano de um sistema quântico seja hermitiano.

Como um espaço de Hilbert é um espaço vetorial complexo munido de um produto interno, a modificação desta operação define um novo espaço de Hilbert. Assim, para definir o conceito de pseudo-hermiticidade, considera-se dois espaços de Hilbert $\mathbb{H}$ e $\mathbb{H}'$, que compartilham o mesmo conjunto de vetores $\mathbb{V}$, mas diferem em suas estruturas de produto interno (19). Assumindo que no espaço $\mathbb{H}$ está definido o produto interno usual, pode-se construir uma estrutura de produto interno no espaço $\mathbb{H}'$ conforme

$$\langle \psi | \phi \rangle_{\Theta} \equiv \langle \psi | \Theta \phi \rangle, \quad (4.4)$$

relacionando o produto interno modificado $\langle \cdot | \cdot \rangle_{\Theta}$ ao produto interno usual $\langle \cdot | \cdot \rangle$, em que o operador Θ é denominado operador métrico, o qual é hermitiano em relação ao produto interno usual: $\Theta = \Theta^{\dagger}$. Observa-se que para $\Theta = 1$ o produto interno usual é recuperado.

Seja $\mathbf{A}$ um operador que atua em ambos os espaços de Hilbert, de modo que em $\mathbb{H}$ vale a relação (4.1), enquanto em $\mathbb{H}'$ vale

$$\langle \psi | \mathbf{A} \phi \rangle_{\Theta} = \langle \mathbf{A}^{\dagger} \psi | \phi \rangle_{\Theta}, \quad (4.5)$$

onde $\mathbf{A}^\dagger$ denota o adjunto de $\mathbf{A}$ em relação ao produto interno modificado. Uma vez que este produto está associado ao produto interno usual através de (4.4), tem-se

$$\langle \psi | \mathbf{A} \phi \rangle_{\Theta} = \langle \psi | \Theta \mathbf{A} \phi \rangle = \langle \mathbf{A}^\dagger \Theta \psi | \phi \rangle, \quad (4.6)$$

e da relação (4.5),

$$\langle \psi | \mathbf{A} \phi \rangle_{\Theta} = \langle \mathbf{A}^\dagger \psi | \phi \rangle_{\Theta} = \langle \Theta \mathbf{A}^\dagger \psi | \phi \rangle. \quad (4.7)$$

Como (4.6) deve ser igual a (4.7), os operadores $\mathbf{A}^\dagger$ e $\mathbf{A}^\ddagger$ relacionam-se através de

$$\mathbf{A}^\dagger = \Theta \mathbf{A}^\ddagger \Theta^{-1}, \quad (4.8)$$

que no caso em que o operador $\mathbf{A}$ é hermitiano em relação ao produto interno modificado, $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\ddagger$, obtém-se a relação

$$\mathbf{A}^\dagger = \Theta \mathbf{A} \Theta^{-1}, \quad (4.9)$$

a qual é chamada de condição de pseudo-hermiticidade. Portanto, um operador que satisfaz a relação (4.9) é hermitiano no espaço de Hilbert $\mathbb{H}'$,

$$\langle \psi | \mathbf{A} \phi \rangle_{\Theta} = \langle \psi | \Theta \mathbf{A} \phi \rangle = \langle \mathbf{A}^\dagger \Theta \psi | \phi \rangle \quad (4.10)$$

$$= \langle \Theta \mathbf{A} \Theta^{-1} \Theta \psi | \phi \rangle = \langle \Theta \mathbf{A} \psi | \phi \rangle \quad (4.11)$$

$$= \langle \mathbf{A} \psi | \Theta \phi \rangle = \langle \mathbf{A} \psi | \phi \rangle_{\Theta}. \quad (4.12)$$

Portanto, um operador pode não ser hermitiano em relação ao produto interno usual, mas pode-se encontrar uma métrica na qual ele seja. Neste caso, o operador é chamado de pseudo-hermitiano e satisfaz a relação (4.9). O espectro de um operador pseudo-hermitiano não é necessariamente real podendo aparecer aos pares complexos conjugados (39), como no exemplo apresentado na referência (73).

Nota-se que, em geral, o produto interno modificado pode ser indefinido, não podendo ser utilizado para definir um espaço de Hilbert físico conforme o formalismo convencional (19), embora haja discussões sobre espaços com produto interno indefinido (74). Para construir um produto interno definido, deve-se considerar um operador métrico Θ positivo, ou seja,

$$\langle \psi | \Theta \psi \rangle > 0, \quad (4.13)$$

para todo $|\psi\rangle$. Isto torna possível definir normas positivas para os vetores em $\mathbb{H}'$, uma vez que

$$||\psi||_{\Theta}^2 = \langle \psi | \psi \rangle_{\Theta} = \langle \psi | \Theta \psi \rangle \geq 0, \quad (4.14)$$

onde a igualdade é válida somente quando $|\psi\rangle$ for um vetor nulo. Com isso, a interpretação probabilística da Mecânica Quântica é assegurada.

Um operador que satisfaz a relação de pseudo-hermiticidade (4.9), com um operador métrico positivo é dito quase-hermitiano (18), pertencendo à classe mais geral de operadores que podem ser associados fisicamente a Hamiltonianos (assumindo um espaço de Hilbert com norma

positiva) cujo espectro é real, uma vez que um operador quase-hermitiano possui um similar hermitiano (71). Isto se dá pelo fato de que o operador métrico é positivo e hermitiano, podendo ser reescrito em termos de um operador η conforme

$$\Theta = \eta^\dagger \eta, \quad (4.15)$$

que ao ser substituído em (4.9), resulta em

$$\mathbf{A}^\dagger = \eta^\dagger \eta \mathbf{A} \eta^{-1} (\eta^\dagger)^{-1}. \quad (4.16)$$

Multiplicando esta relação por $(\eta^\dagger)^{-1}$ à esquerda e por $\eta^\dagger$ à direita, obtém-se

$$(\eta^\dagger)^{-1} \mathbf{A}^\dagger \eta^\dagger = \eta \mathbf{A} \eta^{-1}, \quad (4.17)$$

$$(\eta \mathbf{A} \eta^{-1})^\dagger = \eta \mathbf{A} \eta^{-1}, \quad (4.18)$$

$$\mathbf{a}^\dagger = \mathbf{a}, \quad (4.19)$$

em que o operador hermitiano $\mathbf{a}$ é identificado como

$$\mathbf{a} = \eta \mathbf{A} \eta^{-1}, \quad (4.20)$$

sendo $\mathbf{a}$ o similar hermitiano de $\mathbf{A}$, estando relacionados pela transformação de similaridade expressa em (4.20). Destaca-se que o operador η não é único, uma vez que a relação (4.15) é satisfeita se $\eta = \mathbf{U}_0 \Theta^{\frac{1}{2}}$ para qualquer operador unitário $\mathbf{U}_0$ (19).

A relação (4.20) indica a existência de uma evolução temporal unitária associada a um Hamiltoniano não-hermitiano no espaço de Hilbert $\mathbb{H}'$, onde verifica-se que

$$\langle \psi(t) | \phi(t) \rangle_\Theta = \langle \psi(t_0) | \exp[-i\mathbf{H}t]^\dagger \Theta \exp[-i\mathbf{H}t] | \phi(t_0) \rangle, \quad (4.21)$$

$$= \langle \psi(t_0) | \eta^\dagger \exp[i\mathbf{h}t] (\eta^\dagger)^{-1} \eta^\dagger \eta \eta^{-1} \exp[-i\mathbf{h}t] \eta | \phi(t_0) \rangle, \quad (4.22)$$

$$= \langle \psi(t_0) | \Theta | \phi(t_0) \rangle, \quad (4.23)$$

$$= \langle \psi(t_0) | \phi(t_0) \rangle_\Theta, \quad (4.24)$$

em que $\exp[-i\mathbf{H}t]$ é o operador de evolução temporal pseudo-unitário¹ associado ao operador unitário $\exp[-i\mathbf{h}t]$ via transformação $\exp[-i\mathbf{H}t] = \eta^{-1} \exp[-i\mathbf{h}t] \eta$. Também é possível associar o valor esperado de um observável não-hermitiano $\mathbf{A}$ em $\mathbb{H}'$ ao valor esperado de seu similar hermitiano em $\mathbb{H}$ conforme

$$\langle \mathbf{A} \rangle_{\mathbb{H}'} = \langle \psi' | \mathbf{A} \psi' \rangle_\Theta = \langle \psi' | \Theta \mathbf{A} | \psi' \rangle, \quad (4.25)$$

$$= \langle \psi' | \eta^\dagger \eta (\eta^{-1} \mathbf{a} \eta) | \psi' \rangle = \langle \psi' | \eta^\dagger \mathbf{a} \eta | \psi' \rangle, \quad (4.26)$$

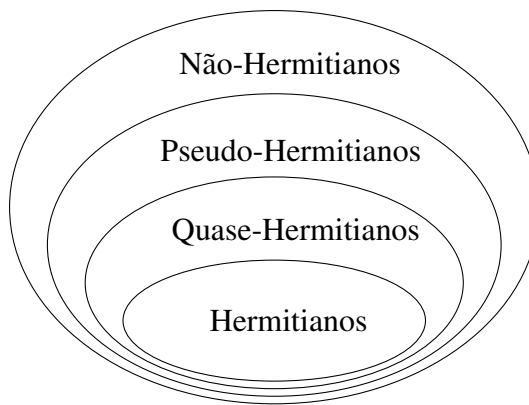
$$= \langle \psi | \mathbf{a} | \psi \rangle = \langle \mathbf{a} \rangle_{\mathbb{H}} \quad (4.27)$$

em que foi definido o vetor $|\psi\rangle = \eta |\psi'\rangle$, onde η conecta os vetores $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$ e $|\psi'\rangle \in \mathbb{H}'$.

¹ Um operador pseudo-unitário $\mathbf{U}$ satisfaz uma relação da forma $\mathbf{U}^\dagger \Theta \mathbf{U} = \Theta$, em que Θ é uma quantidade invariante sob esta transformação. Um exemplo aparece em transformações associadas ao grupo $SU(1, 1)$ (58).

Desta forma, com a formulação quase-hermitiana é possível incorporar Hamiltonianos não-hermitianos que apresentam resultados compatíveis com aqueles obtidos pelo formalismo convencional, como é visto em trabalhos teóricos (75) e experimentais (29, 76). Entretanto, diferentemente da frente seguida por Bender e Mostafazadeh, outros autores utilizam o formalismo não-hermitiano na análise de sistemas abertos (21). A respeito disso, discussões teóricas são feitas na representação biortogonal da Mecânica Quântica em (30, 32, 77) e também em teorias de dissipação na tentativa de explicar fenômenos de perda de energia, como abordado em (40, 78, 79). Nesse sentido, a Mecânica Quântica não-hermitiana apresenta-se como uma formulação alternativa àquela utilizada em Mecânica Quântica de sistemas abertos (no sentido de uma abordagem fenomenológica). Dentro disso, identifica-se uma hierarquia não-hermitiana da Mecânica Quântica vista na Figura 3.

Figura 3 – Hierarquia Não-Hermitiana.



Fonte: O autor (2018).

Um sistema não-hermitiano com autovalores complexos, deve ser tratado *a priori* de forma heurística, pois, em geral, a probabilidade não se conserva, salvo formalismos híbridos, como o mostrado em (34), que tratam Hamiltonianos não-hermitianos efetivos via equação de Lindblad-Kossakowski e permitem uma descrição da evolução do sistema onde a probabilidade é conservada. Talvez este caminho permita dar uma interpretação adequada ao Hamiltoniano não-hermitiano; interpretações sobre Hamiltonianos não-hermitianos em simetria- $\mathcal{PT}$ são discutidas em (80).

Na próxima seção, será discutida a formulação biortogonal da Mecânica Quântica. Também será verificada uma conexão com a representação pseudo-hermitiana.

4.2 REPRESENTAÇÃO BIORTOGONAL

A representação biortogonal surge na tentativa de encontrar uma base adequada para descrever um dado sistema físico, uma vez que os autoestados de um Hamiltoniano não-hermitiano

não são ortogonais. Para isso, é necessário considerar que o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$ e seu adjunto $\mathbf{H}^\dagger$ são diagonalizáveis e, portanto, satisfazem as seguintes equações de autovalor e autovetor

$$\mathbf{H} |\phi_n\rangle = \lambda_n |\phi_n\rangle, \quad \lambda_n \in \mathbb{C} \quad (4.28)$$

$$\mathbf{H}^\dagger |\chi_n\rangle = \nu_n |\chi_n\rangle, \quad \nu_n \in \mathbb{C}. \quad (4.29)$$

em que os respectivos autoestados do Hamiltoniano e do seu adjunto, $|\phi_n\rangle$ e $|\chi_n\rangle$, não são ortonormais entre si, o que significa

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle \neq \delta_{mn}, \quad \langle \chi_m | \chi_n \rangle \neq \delta_{mn}. \quad (4.30)$$

No espaço dual, tem-se as seguintes equações

$$\langle \phi_n | \mathbf{H}^\dagger = \langle \phi_n | \lambda_n^*, \quad (4.31)$$

$$\langle \chi_n | \mathbf{H} = \langle \chi_n | \nu_n^*, \quad (4.32)$$

onde os autovalores do Hamiltoniano e do seu adjunto, λ_n e ν_n , respectivamente, são números complexos.

Entretanto, é possível encontrar uma relação entre os autovalores e autovetores de $\mathbf{H}$ e $\mathbf{H}^\dagger$, projetando (4.28) em $\langle \chi_n |$ e utilizando (4.32), de modo que surge a relação

$$(\lambda_n - \nu_n^*) \langle \chi_n | \phi_n \rangle = 0, \quad (4.33)$$

onde uma escolha adequada é tal que

$$\lambda_n = \nu_n^*, \quad (4.34)$$

sendo os autovalores do adjunto, os complexos conjugados dos autovalores do Hamiltoniano, implicando em um conjunto biortogonal formado pelos autovetores de $\mathbf{H}$ e $\mathbf{H}^\dagger$, que satisfazem a relação de biortogonalidade

$$\langle \chi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn}, \quad (4.35)$$

assumindo que os vetores estão bi-normalizados. Observa-se que se o Hamiltoniano for hermitiano, $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$, a estrutura ortogonal usual é recuperada; isto justifica a escolha (4.34).

Assim, apesar dos autovetores do Hamiltoniano não serem ortogonais entre si, combinando-os com os autovetores do adjunto, é possível compor uma base biortogonal, na qual um estado genérico $|\Psi\rangle$ pode ser expandido como

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle, \quad a_n = \langle \chi_n | \Psi \rangle, \quad (4.36)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n b_n |\chi_n\rangle, \quad b_n = \langle \phi_n | \Psi \rangle. \quad (4.37)$$

Substituindo os coeficientes a_n e b_n dentro das expansões, obtém-se uma relação de bi-completeza

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \chi_n| = \mathbf{1} = \sum_n |\chi_n\rangle \langle \phi_n|, \quad (4.38)$$

onde pode-se introduzir os operadores Π_n^ϕ e Π_n^χ , definidos conforme

$$\Pi_n^\phi = |\phi_n\rangle \langle \chi_n|, \quad \Pi_n^\chi = |\chi_n\rangle \langle \phi_n|, \quad (4.39)$$

que fazem o papel do operador de projeção, satisfazendo a relação $\Pi_n^{\phi,\chi} \Pi_m^{\phi,\chi} = \delta_{nm} \Pi_n^{\phi,\chi}$. Com isso, o Hamiltoniano admite a seguinte decomposição espectral

$$\mathbf{H} = \sum_n \lambda_n \Pi_n^\phi = \sum_n \lambda_n |\phi_n\rangle \langle \chi_n|, \quad (4.40)$$

para o adjunto a decomposição é direta, bastando tomar transposto complexo conjugado de (4.40) e verificar que $(\Pi_n^\phi)^\dagger = \Pi_n^\chi$.

Dada uma base biortogonal $\{|\phi_n\rangle, |\chi_n\rangle\}$, um operador $\mathbf{A}$ qualquer pode ser representado da seguinte maneira

$$\mathbf{A} = \sum_{n,m} a_{nm} |\phi_n\rangle \langle \chi_m|, \quad (4.41)$$

de tal forma que $\mathbf{A}$ pode ser visto como uma matriz, cujos elementos são dados por a_{nm} . Assim, se $\mathbf{B}$ for outra matriz com elementos b_{nm} na base $\{|\phi_n\rangle, |\chi_n\rangle\}$, então, os elementos de matriz do produto $\mathbf{AB}$ ficam dados por $\sum_l a_{nl} b_{lm}$.

Para introduzir uma interpretação probabilística consistente com aquela da Mecânica Quântica convencional, faz-se necessário definir um estado associado (32), que estabelece uma relação entre os elementos do espaço de Hilbert e do seu dual, conforme

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle \tilde{\Psi}| = \sum_n a_n^* \langle \chi_n| \quad \Rightarrow \quad |\tilde{\Psi}\rangle = \sum_n a_n |\chi_n\rangle, \quad (4.42)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n b_n |\chi_n\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle \tilde{\Psi}| = \sum_n b_n^* \langle \phi_n| \quad \Rightarrow \quad |\tilde{\Psi}\rangle = \sum_n b_n |\phi_n\rangle, \quad (4.43)$$

em que o estado dual de $|\Psi\rangle$ é definido por $\langle \tilde{\Psi}|$, sendo o estado associado de $|\Psi\rangle$, denotado por $|\tilde{\Psi}\rangle$, o adjunto de $\langle \tilde{\Psi}|$. Isso permite definir a norma do vetor de estado em relação à base biortogonal da maneira que segue

$$\langle \tilde{\Psi}|\Psi\rangle = \sum_n a_n^* a_n = \sum_n b_n^* b_n = 1, \quad (4.44)$$

considerando que o estado esteja normalizado.

O valor médio de um operador $\mathbf{A}$ no estado puro $|\Psi\rangle$, na representação biortogonal, é expresso como

$$\langle\langle \mathbf{A} \rangle\rangle = \langle \tilde{\Psi}|\mathbf{A}|\Psi\rangle. \quad (4.45)$$

onde utilizou-se a notação $\langle\langle \cdot \rangle\rangle$ para distinguir da definição usual. Em particular, se os elementos de matriz de $\mathbf{A}$ satisfazem a relação $a_{nm}^* = a_{mn}$, então, a matriz $\mathbf{A}$ é hermitiana em relação à base biortogonal, mesmo não sendo auto-adjunta no sentido usual. Além disso, na representação biortogonal também é possível escrever o valor médio em termos do operador densidade (o caso

usual é apresentado no Apêndice A). Para isso, é introduzido uma relação de bi-completeza (4.38) na expressão (4.45) conforme segue

$$\langle\langle \mathbf{A} \rangle\rangle = \langle \tilde{\Psi} | \mathbf{A} | \Psi \rangle, \quad (4.46)$$

$$= \sum_n \langle \tilde{\Psi} | \mathbf{A} | \phi_n \rangle \langle \chi_n | \Psi \rangle, \quad (4.47)$$

$$= \sum_n \langle \chi_n | \Psi \rangle \langle \tilde{\Psi} | \mathbf{A} | \phi_n \rangle, \quad (4.48)$$

$$= \text{Tr}(\tilde{\rho} \mathbf{A}), \quad (4.49)$$

onde identifica-se o operador densidade $\tilde{\rho}$ como sendo

$$\tilde{\rho} = |\Psi\rangle\langle\tilde{\Psi}|, \quad (4.50)$$

para um estado puro $|\Psi\rangle$; a expressão (4.49) também vale para estados mistos.

É interessante notar que a representação pseudo-hermitiana discutida anteriormente está de acordo com a representação biortogonal, como mostrado em (18). Considerando um Hamiltoniano não-hermitiano $\mathbf{H}$ com autovalores reais e distintos, que satisfaz a relação de pseudo-hermiticidade $\mathbf{H}^\dagger = \mathbf{\Theta} \mathbf{H} \mathbf{\Theta}^{-1}$ com $\mathbf{\Theta}$ hermitiano e positivo, as equações (4.28) e (4.29) tornam-se

$$\mathbf{H} |\phi_n\rangle = \lambda_n |\phi_n\rangle, \quad (4.51)$$

$$\mathbf{H} \mathbf{\Theta}^{-1} |\chi_n\rangle = \lambda_n \mathbf{\Theta}^{-1} |\chi_n\rangle, \quad (4.52)$$

onde identifica-se uma relação entre os elementos da base biortogonal, dada por

$$|\phi_n\rangle = \mathbf{\Theta}^{-1} |\chi_n\rangle, \quad |\chi_n\rangle = \mathbf{\Theta} |\phi_n\rangle. \quad (4.53)$$

Desta forma, os autoestados do Hamiltoniano são ortogonais em relação ao produto interno modificado expresso em (4.4), pois das relações (4.53) e da condição de biortogonalidade (4.35), tem-se

$$\langle \phi_n | \mathbf{\Theta} | \phi_m \rangle = \langle \phi_n | \phi_m \rangle_{\mathbf{\Theta}} = \langle \phi_n | \chi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (4.54)$$

o que permite escrever o operador métrico $\mathbf{\Theta}$ e seu inverso como sendo

$$\mathbf{\Theta} = \sum_n |\chi_n\rangle\langle\chi_n|, \quad \mathbf{\Theta}^{-1} = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|. \quad (4.55)$$

Portanto, o operador métrico pode ser construído utilizando-se os elementos do adjunto do Hamiltoniano (18). Além disso, pode-se observar que no caso em que o Hamiltoniano é hermitiano, o operador métrico é igual à identidade, uma vez que a forma expressa em (4.55) torna-se uma relação de completeza.

Até aqui foram tratados os aspectos estacionários de sistemas quânticos não-hermitianos, de modo que na seção seguinte, será discutido a evolução temporal de um sistema não-hermitiano que surgem no contexto da representação biortogonal.

4.3 EVOLUÇÃO TEMPORAL DE UM SISTEMA NÃO-HERMITIANO

Antes de descrever a evolução temporal do sistema é conveniente definir uma decomposição adequada para o Hamiltoniano que representa o sistema. Neste sentido, todo operador pode ser decomposto em uma parte hermitiana e uma anti-hermitiana (7) conforme

$$\mathbf{A} = \frac{(\mathbf{A} + \mathbf{A}^\dagger)}{2} - i \frac{(\mathbf{A}^\dagger - \mathbf{A})}{2i} = \mathbf{A}_0 - i\mathbf{\Gamma}, \quad (4.56)$$

onde identificam-se os dois operadores hermitianos, $\mathbf{A}_0$ e $\mathbf{\Gamma}$ como

$$\mathbf{A}_0 = \frac{(\mathbf{A} + \mathbf{A}^\dagger)}{2}, \quad \mathbf{\Gamma} = \frac{(\mathbf{A}^\dagger - \mathbf{A})}{2i}. \quad (4.57)$$

Portanto, fazendo $\mathbf{A} = \mathbf{H}$, o Hamiltoniano é decomposto na forma

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - i\mathbf{\Gamma}, \quad (4.58)$$

em que pode-se assumir $\mathbf{\Gamma}$ como sendo um operador positivo, para que a evolução temporal gere decaimento de probabilidade. Além disso, como operadores quase-hermitianos possuem similares hermitianos, esta relação pode ser estendida de maneira direta para a forma na qual $\mathbf{H}_0$ e $\mathbf{\Gamma}$ são quase-hermitianos, como é visto em (35).

A evolução temporal de um sistema não-hermitiano pode ser introduzida de forma similar ao caso hermitiano visto na subseção 3.2.1. Porém, no caso geral, em que um Hamiltoniano não é hermitiano, o operador de evolução temporal é necessariamente não-unitário e, por isso, segundo Dattoli, Torre e Mignani (30) é conveniente introduzir um operador de evolução temporal associado ao adjunto do Hamiltoniano, a fim de construir uma condição de "unitariedade" conforme

$$\mathbf{U}(t)\mathbf{V}^\dagger(t) = \mathbf{V}^\dagger(t)\mathbf{U}(t) = \mathbf{1}, \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad (4.59)$$

em que os operadores $\mathbf{U}(t)$ e $\mathbf{V}(t)$ são determinados a partir das equações

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{U}(t) = \mathbf{H}\mathbf{U}(t), \quad t \geq 0, \quad (4.60)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{V}(t) = \mathbf{H}^\dagger \mathbf{V}(t), \quad t \leq 0, \quad (4.61)$$

obedecendo diferentes propriedades de semi-grupos (ao invés de grupos, como no caso hermitiano) dadas por

$$\mathbf{U}(t_1)\mathbf{U}(t_2) = \mathbf{U}(t_1 + t_2), \quad t_k \geq 0, \quad (4.62)$$

$$\mathbf{V}(t_1)\mathbf{V}(t_2) = \mathbf{V}(t_1 + t_2), \quad t_k \leq 0, \quad (4.63)$$

no sentido de que os $\mathbf{H}$ e $\mathbf{H}^\dagger$ são os geradores de translação temporal para frente ($t \geq 0$) e para trás ($t \leq 0$), respectivamente, sendo esta uma das características não-convencionais da Mecânica Quântica não-hermitiana (30). Além disso, como o Hamiltoniano não depende do tempo, as

soluções das Equações (4.60) e (4.61) são dadas por

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{H}}{\hbar} t \right] = \exp \left[-i \frac{\mathbf{H}_0}{\hbar} t - \frac{\mathbf{\Gamma}}{\hbar} t \right], \quad t \geq 0, \quad (4.64)$$

$$\mathbf{V}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{H}^\dagger}{\hbar} t \right] = \exp \left[-i \frac{\mathbf{H}_0}{\hbar} t + \frac{\mathbf{\Gamma}}{\hbar} t \right], \quad t \leq 0. \quad (4.65)$$

Um sistema que se encontra inicialmente no estado genérico normalizado $|\Psi_0\rangle$ no instante de tempo $t = 0$, deve evoluir nos dois sentidos do tempo devido à estrutura biortogonal. Assim, o sistema em um instante de tempo qualquer fica caracterizado em termos de dois estados

$$|\Psi_f(t)\rangle = \mathbf{U}(t) |\Psi_0\rangle, \quad t \geq 0, \quad (4.66)$$

$$|\Psi_b(t)\rangle = \mathbf{V}(t) |\Psi_0\rangle, \quad t \leq 0, \quad (4.67)$$

em que $|\Psi_f(t)\rangle$ e $|\Psi_b(t)\rangle$ são os estados do sistema para tempos positivos e negativos, respectivamente. A evolução não-unitária implica em um decaimento da probabilidade

$$\langle \Psi_f(t) | \Psi_f(t) \rangle = \langle \Psi_0 | \mathbf{U}^\dagger(t) \mathbf{U}(t) | \Psi_0 \rangle, \quad t \geq 0, \quad (4.68)$$

$$\langle \Psi_b(t) | \Psi_b(t) \rangle = \langle \Psi_0 | \mathbf{V}^\dagger(t) \mathbf{V}(t) | \Psi_0 \rangle, \quad t \leq 0, \quad (4.69)$$

em que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Psi_f(t) | \Psi_f(t) \rangle = 0 = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \Psi_b(t) | \Psi_b(t) \rangle. \quad (4.70)$$

Além disso, pela relação (4.59) é possível compor uma evolução "unitária" da seguinte forma:

$$\langle \Psi_b(t) | \Psi_f(t) \rangle = \langle \Psi_0 | \mathbf{V}^\dagger(t) \mathbf{U}(t) | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle, \quad (4.71)$$

$$\langle \Psi_f(t) | \Psi_b(t) \rangle = \langle \Psi_0 | \mathbf{U}^\dagger(t) \mathbf{V}(t) | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle. \quad (4.72)$$

Com esse algoritmo apresentado por Dattoli, Torre e Mignani (30), será introduzido um sistema que contém a simetria dinâmica $SL(2, \mathbb{C})$, como estudado na referência (38) para o caso de um sistema de dois níveis.

4.4 DINÂMICA QUÂNTICA COM SIMETRIA $SL(2, \mathbb{C})$

Analogamente ao sistema com simetria dinâmica $SU(2)$ estudado no Capítulo 3, pode-se construir um Hamiltoniano não-hermitiano de dois níveis utilizando-se a base de matrizes $\{\mathbf{I}_0, \mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2, \mathbf{I}_3\}$, lembrando que $\mathbf{I}_0 = \frac{1}{2}$ e $\mathbf{I}_j = \frac{\sigma_j}{2}$,

$$\mathbf{H} = \hbar \mathbf{c}_0 \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^3 \hbar \mathbf{c}_j \frac{\sigma_j}{2}, \quad \mathbf{c}_j \in \mathbb{C}. \quad (4.73)$$

A diferença entre os Hamiltonianos (4.73) e (3.40) está nos coeficientes $\mathbf{c}_j$ que agora são complexos. Assim, os coeficiente $\mathbf{c}_j$ podem ser colocados na forma

$$\mathbf{c}_j = \mathbf{a}_j - i \mathbf{b}_j, \quad \mathbf{a}_j, \mathbf{b}_j \in \mathbb{R}, \quad (4.74)$$

de modo que o Hamiltoniano expresso em (4.73) pode ser reescrito como

$$\mathbf{H} = \left(\hbar \mathbf{a}_0 \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^3 \hbar \mathbf{a}_j \frac{\sigma_j}{2} \right) - i \left(\hbar \mathbf{b}_0 \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^3 \hbar \mathbf{b}_j \frac{\sigma_j}{2} \right) \quad (4.75)$$

onde as estruturas hermitianas entre parênteses pertencem à álgebra $u(2)$ e, portanto, têm a mesma forma expressa em (3.40),

Como discutido anteriormente, a evolução temporal de um Hamiltoniano é dada em termos de dois operadores, $\mathbf{U}(t)$ e $\mathbf{V}(t)$, que ditam as evoluções para tempos positivos e negativos, respectivamente. Uma vez que o Hamiltoniano (4.73) não depende do tempo, o operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t)$ é dado por (4.64),

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\hbar \mathbf{c}_0 \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^3 \hbar \mathbf{c}_j \frac{\sigma_j}{2} \right) t \right]. \quad (4.76)$$

O termo que contém a identidade $\mathbf{1}$ comuta com todos os outros, gerando apenas uma fase complexa global e, desta forma, o operador $\mathbf{U}(t)$ fica escrito como

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0}{2} t \right] \exp \left[-i \sum_{j=1}^3 \mathbf{c}_j \frac{\sigma_j}{2} t \right], \quad (4.77)$$

Além disso, o segundo termo pode ser reescrito utilizando a notação vetorial de modo que

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0}{2} t \right] \exp \left[-i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\sigma}}{2} t \right], \quad (4.78)$$

onde $\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\sigma} = \sum_{j=1}^3 \mathbf{c}_j \sigma_j$ com $\vec{\mathbf{c}} \in \mathbb{C}^3$. De maneira semelhante a (2.81), pode-se expandir o segundo termo em uma série de Taylor em torno do elemento identidade obtendo a forma explícita

$$\exp \left[-i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\sigma}}{2} t \right] = \mathbf{1} \cos \frac{\sqrt{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\mathbf{c}}} t}{2} - i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\sigma}}{\sqrt{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\mathbf{c}}}} \sin \frac{\sqrt{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\mathbf{c}}} t}{2}. \quad (4.79)$$

Com isso, o operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t)$ para $t \geq 0$ fica expresso na forma

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0}{2} t \right] \left(\mathbf{1} \cos \frac{\sqrt{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\mathbf{c}}} t}{2} - i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\sigma}}{\sqrt{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\mathbf{c}}}} \sin \frac{\sqrt{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\mathbf{c}}} t}{2} \right), \quad t \geq 0, \quad (4.80)$$

que de acordo com (4.74), o vetor $\vec{\mathbf{c}} = \vec{\mathbf{a}} - i\vec{\mathbf{b}}$ com $\vec{\mathbf{a}}, \vec{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^3$, sendo as componentes dos vetores reais $\vec{\mathbf{a}}$ e $\vec{\mathbf{b}}$ identificadas de acordo com a decomposição do Hamiltoniano na forma (4.75).

Ainda é necessário encontrar o operador de evolução temporal $\mathbf{V}(t)$ para $t \leq 0$, de acordo com a discussão sobre a dinâmica de um sistema não-hermitiano do item anterior. Para isso, escreve-se o adjunto do Hamiltoniano (4.73) que é dado por

$$\mathbf{H}^\dagger = \hbar \mathbf{c}_0^* \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^3 \hbar \mathbf{c}_j^* \frac{\sigma_j}{2}, \quad \mathbf{c}_j \in \mathbb{C}. \quad (4.81)$$

de modo que o operador $\mathbf{V}(t)$ é obtido através de (4.65) de maneira análoga, resultando em

$$\mathbf{V}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0^*}{2} t \right] \left(\mathbf{1} \cos \frac{\sqrt{\vec{\mathbf{c}}^* \cdot \vec{\mathbf{c}}^*} t}{2} - i \frac{\vec{\mathbf{c}}^* \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{\sqrt{\vec{\mathbf{c}}^* \cdot \vec{\mathbf{c}}^*}} \sin \frac{\sqrt{\vec{\mathbf{c}}^* \cdot \vec{\mathbf{c}}^*} t}{2} \right), \quad t \leq 0, \quad (4.82)$$

em que $\mathbf{c}_0^* = \mathbf{a}_0 + i\mathbf{b}_0$ e $\vec{\mathbf{c}}^* = \vec{\mathbf{a}} + i\vec{\mathbf{b}}$.

Observa-se que os operadores de evolução temporal $\mathbf{U}(t)$ e $\mathbf{V}(t)$ não são elementos do grupo $SL(2, \mathbb{C})$, uma vez que seus determinantes são iguais a $\exp(-i\mathbf{c}_0 t)$ e $\exp(-i\mathbf{c}_0^* t)$, respectivamente. Para que estes operadores de evolução temporal estejam inteiramente no grupo $SL(2, \mathbb{C})$, deve-se ter que $\mathbf{c}_0 = 0$. Portanto, os operadores de evolução temporal com simetria $SL(2, \mathbb{C})$ são dados por

$$\mathbf{U}_{SL}(t) = \mathbf{1} \cos \frac{\tilde{\kappa} t}{2} - i \frac{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{\tilde{\kappa}} \sin \frac{\tilde{\kappa} t}{2}, \quad t \geq 0, \quad (4.83)$$

$$\mathbf{V}_{SL}(t) = \mathbf{1} \cos \frac{\tilde{\kappa}^* t}{2} - i \frac{\vec{\mathbf{c}}^* \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}}}{\tilde{\kappa}^*} \sin \frac{\tilde{\kappa}^* t}{2}, \quad t \leq 0, \quad (4.84)$$

em que definiu-se

$$\tilde{\kappa} \equiv \sqrt{\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\mathbf{c}}} = \sqrt{\vec{\mathbf{a}}^2 - \vec{\mathbf{b}}^2 - 2i\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}}}, \quad (4.85)$$

lembrando que $\vec{\mathbf{c}} = \vec{\mathbf{a}} - i\vec{\mathbf{b}}$, com $\vec{\mathbf{a}}, \vec{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^3$.

Assim, as expressões (4.80) e (4.82) podem ser reescritas conforme

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0}{2} t \right] \mathbf{U}_{SL}(t), \quad (4.86)$$

$$\mathbf{V}(t) = \exp \left[-i \frac{\mathbf{c}_0^*}{2} t \right] \mathbf{V}_{SL}(t), \quad (4.87)$$

e, uma vez que $\mathbf{c}_0 = \mathbf{a}_0 - i\mathbf{b}_0$, identificam-se duas fases, uma real e outra complexa, da seguinte forma

$$\mathbf{U}(t) = \exp[-i\mathbf{a}_0 t] \exp[-\mathbf{b}_0 t] \mathbf{U}_{SL}(t), \quad (4.88)$$

$$\mathbf{V}(t) = \exp[-i\mathbf{a}_0 t] \exp[\mathbf{b}_0 t] \mathbf{V}_{SL}(t). \quad (4.89)$$

A fase global imaginária não interfere na dinâmica do sistema, então, pode-se tomar $\mathbf{a}_0 = 0$ sem perder generalidade. Comumente, faz-se $\mathbf{b}_0 > 0$ no sentido de descrever um sistema dissipativo (30), de modo que

$$\mathbf{U}(t) = \exp[-\mathbf{b}_0 t] \mathbf{U}_{SL}(t), \quad (4.90)$$

$$\mathbf{V}(t) = \exp[\mathbf{b}_0 t] \mathbf{V}_{SL}(t). \quad (4.91)$$

Neste caso, os operadores de evolução temporal, $\mathbf{U}(t)$ e $\mathbf{V}(t)$, incorporam a dinâmica das composições $R_- \{+\} \otimes SL(2, \mathbb{C})$ e $R_+ \{+\} \otimes SL(2, \mathbb{C})$, respectivamente, em que $R_{\pm} \{+\}$ representa os semi-grupos formados por exponenciais reais com argumentos negativo ($-$) e positivo ($+$) sob operação de soma (38).

Apesar do formalismo proposto por Dattoli, Torre e Mignani (30) apresentar uma descrição matemática elegante, algumas lacunas ficam abertas quando se tenta dar um significado físico,

por exemplo, para a evolução temporal de tempos negativos. Neste sentido, será apresentado na próxima seção, um formalismo híbrido que incorpora um Hamiltoniano efetivo não-hermitiano na descrição de sistemas quânticos abertos via equação de Lindblad.

4.5 EVOLUÇÃO DE UM SISTEMA NÃO-HERMITIANO VIA EQUAÇÃO MESTRA

Sistemas quânticos reais não estão isolados do ambiente e, por isso, devem ser tratados como sistemas abertos (41). Neste sentido, um sistema cujo estado inicial é puro, torna-se uma mistura (efeito de descoerência) e troca energia com o ambiente (efeito de dissipação). Os efeitos de descoerência e dissipação fragilizam ou destroem o fenômeno quântico de interferência (34). O tratamento desses fenômenos é feito através de equações mestras. Há também o formalismo de operadores soma (64).

A equação mestra de Lindblad para um sistema quântico não-hermitiano descrito por um operador densidade $\rho(t)$ é dada por

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\rho(t) + \frac{i}{\hbar}\rho(t)\mathbf{H}^\dagger - \frac{1}{\hbar}\mathbf{D}[\rho(t)], \quad (4.92)$$

em que $\mathbf{H}$ é o Hamiltoniano efetivo do sistema e $\mathbf{D}[\rho(t)]$ é o dissipador, o qual é definido da maneira que segue

$$\mathbf{D}[\rho(t)] = \frac{1}{2} \sum_j \left[\mathbf{A}_j^\dagger \mathbf{A}_j \rho(t) + \rho(t) \mathbf{A}_j^\dagger \mathbf{A}_j - 2\mathbf{A}_j \rho(t) \mathbf{A}_j^\dagger \right], \quad (4.93)$$

onde o operador $\mathbf{A}_j$ é o chamado operador de Lindblad (41).

Considera-se que o Hamiltoniano efetivo é não-hermitiano e, de forma similar à decomposição (4.58), o Hamiltoniano $\mathbf{H}$ pode ser colocado na forma

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \frac{i}{2}\mathbf{\Gamma}, \quad (4.94)$$

em que $\mathbf{H}_0$ e $\mathbf{\Gamma}$ são hermitianos e, além disso, assume-se que $\mathbf{\Gamma}$ é um operador semi-positivo para que este produza decaimento (34).

A partir da equação mestra (4.92) e do Hamiltoniano efetivo (4.94), é possível incorporar o decaimento dos estados do sistema quântico em um operador de Lindblad específico dentro de um espaço de Hilbert ampliado $\mathbb{H}$ que contém os estados instáveis do sistema e também os estados que são produtos do decaimento dos estados instáveis. Assume-se que o subespaço $\mathbb{H}_s$ que contém os estados instáveis do sistema e o subespaço dos produtos do decaimento $\mathbb{H}_f$ são distintos, de modo que o espaço de Hilbert ampliado $\mathbb{H}$ tem a seguinte estrutura:

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_s \oplus \mathbb{H}_f.$$

O subespaço $\mathbb{H}_f$ é adicionado de tal forma que a probabilidade perdida em $\mathbb{H}_s$ migra para ele; garantindo assim a conservação da probabilidade no espaço de Hilbert total.

Considerando que a dimensão do espaço de Hilbert do sistema é finita, dada por $d_s = \dim \mathbb{H}_s < \infty$, assumindo que o operador $\mathbf{\Gamma}$ da parte anti-hermitiana do Hamiltoniano (4.94) é

diagonal, pode-se decompor Γ da seguinte maneira

$$\Gamma = \sum_{j=1}^r \gamma_j |s_j\rangle \langle s_j|, \quad \gamma_j \geq 0, \quad (4.95)$$

com $\{|s_j\rangle\}$ sendo um conjunto de vetores ortonormais em $\mathbb{H}_s$ e $r = \dim \mathbb{H}_s - n_0$, onde n_0 denota a degenerescência dos autovalores zero do operador Γ .

Além disso, assume-se também que a dimensão do subespaço dos produtos do decaimento $d_f = \dim \mathbb{H}_f \geq r$. Isto significa que para um sistema no qual Γ possui apenas autovalores positivos não nulos, é possível construir um subespaço $\mathbb{H}_f$ com dimensão igual ou maior que a dimensão do subespaço $\mathbb{H}_s$.

No espaço de Hilbert ampliado $\mathbb{H}$, o operador densidade ampliado ϱ é denotado por

$$\varrho = \begin{pmatrix} \rho_{ss} & \rho_{sf} \\ \rho_{fs} & \rho_{ff} \end{pmatrix}, \quad (4.96)$$

em que $\rho_{ss} = \rho_{ss}^\dagger$, $\rho_{ff} = \rho_{ff}^\dagger$, $\rho_{fs} = \rho_{sf}^\dagger$. Uma vez definido o operador densidade no novo espaço, é necessário definir a evolução temporal deste operador. Para isso, definem-se os operadores Hamiltoniano $\mathcal{H}$ e o operador de Lindblad $\mathcal{A}_j$ no espaço de Hilbert ampliado $\mathbb{H}$ conforme:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{A}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_j & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.97)$$

Onde foi utilizado apenas a parte hermitiana do Hamiltoniano (4.94) para definir o Hamiltoniano total $\mathcal{H}$. A parte anti-hermitiana é utilizada para fazer a conexão entre os subespaços $\mathbb{H}_s$ e $\mathbb{H}_f$; o que ficará mais claro adiante.

O decaimento é descrito através da introdução de um operador de Lindblad $\mathcal{B}$ no espaço de Hilbert ampliado $\mathbb{H}$, de modo que $\mathcal{B}$ é definido da seguinte maneira

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \mathbf{B} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.98)$$

onde o operador $\mathbf{B}$ está relacionado com o operador Γ por meio da seguinte definição:

$$\Gamma = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{B}. \quad (4.99)$$

O operador Γ descreve o decaimento no subespaço $\mathbb{H}_s$, enquanto a ação do operador $\mathbf{B}$ conecta ambos subespaços, ou seja, $\mathbf{B} : \mathbb{H}_s \rightarrow \mathbb{H}_f$.

Pode-se decompor o operador $\mathbf{B}$ conforme

$$\mathbf{B} = \sum_{k=1}^{d_f} \sum_{j=1}^r b_{kj} |f_k\rangle \langle s_j|, \quad (4.100)$$

em que $\{|f_j\rangle\}$ é assumido como sendo um conjunto de vetores ortonormais no subespaço $\mathbb{H}_f$, devendo ser válida a relação

$$\sum_{k=1}^{d_f} b_{ki}^* b_{kj} = \delta_{ij} \gamma_j, \quad (4.101)$$

para atender às definições (4.95) e (4.99). Assim, para $d_f \geq r$, uma matriz (b_{kj}) com dimensão $d_f \times r$ sempre existe. Em particular, para $d_f = r$ tem-se que o operador $\mathbf{B}$ toma a forma

$$\mathbf{B} = \sum_{k=1}^{d_f} \sqrt{\gamma_k} |f_k\rangle \langle s_k|, \quad (4.102)$$

o que significa que cada estado instável do sistema $|s_j\rangle$ deve decair em apenas um estado de decaimento específico $|f_k\rangle$.

Assim, a equação mestra de Lindblad para o operador densidade $\varrho(t)$ no espaço de Hilbert total $\mathbb{H}$ fica dada por

$$\frac{d}{dt}\varrho(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\varrho(t) + \frac{i}{\hbar}\varrho(t)\mathcal{H} - \frac{1}{\hbar}\mathcal{D}[\varrho(t)], \quad (4.103)$$

em que o dissipador assume a forma

$$\mathcal{D}[\varrho(t)] = \frac{1}{2} \sum_j \left[\mathcal{A}_j^\dagger \mathcal{A}_j \varrho(t) + \varrho(t) \mathcal{A}_j^\dagger \mathcal{A}_j - 2\mathcal{A}_j \varrho(t) \mathcal{A}_j^\dagger \right] \quad (4.104)$$

$$+ \frac{1}{2} \left[\mathcal{B}^\dagger \mathcal{B} \varrho(t) + \varrho(t) \mathcal{B}^\dagger \mathcal{B} - 2\mathcal{B} \varrho(t) \mathcal{B}^\dagger \right]. \quad (4.105)$$

Da Equação 4.103 surgem as equações de evolução temporal relativas a cada subespaço do operador densidade ampliado $\varrho(t)$, as quais são dadas a seguir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_{ss}(t) = & -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}_0, \rho_{ss}(t)] - \frac{1}{2\hbar} \{\Gamma, \rho_{ss}(t)\} + \\ & - \frac{1}{2\hbar} \sum_j \left[\mathbf{A}_j^\dagger \mathbf{A}_j \rho_{ss}(t) + \rho_{ss}(t) \mathbf{A}_j^\dagger \mathbf{A}_j - 2\mathbf{A}_j \rho_{ss}(t) \mathbf{A}_j^\dagger \right], \end{aligned} \quad (4.106)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{sf}(t) = -\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{H}_0 - i\frac{\Gamma}{2} - \frac{i}{2} \sum_j \mathbf{A}_j^\dagger \mathbf{A}_j \right) \rho_{sf}(t), \quad (4.107)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{ff}(t) = \frac{1}{\hbar} \mathbf{B} \rho_{ss}(t) \mathbf{B}^\dagger, \quad (4.108)$$

onde define-se o anti-comutador $\{\Gamma, \rho_{ss}\} = \Gamma \rho_{ss} + \rho_{ss} \Gamma$. Na ausência de descoerência no subespaço $\mathbb{H}_s$, tem-se que $\mathbf{A}_j = \mathbf{0}$, de modo que essas equações tornam-se

$$\frac{d}{dt}\rho_{ss}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}_0, \rho_{ss}(t)] - \frac{1}{2\hbar} \{\Gamma, \rho_{ss}(t)\} \quad (4.109)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{sf}(t) = -\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{H}_0 - i\frac{\Gamma}{2} \right) \rho_{sf}(t) \quad (4.110)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{ff}(t) = \frac{1}{\hbar} \mathbf{B} \rho_{ss}(t) \mathbf{B}^\dagger. \quad (4.111)$$

Nota-se que para $\mathbf{B}$ com a mesma dimensão de Γ , é possível fazer a seguinte escolha $\mathbf{B} = \mathbf{U}_0 \Gamma^{\frac{1}{2}}$, com $\mathbf{U}_0$ sendo um operador unitário qualquer que satisfaz a relação $\mathbf{U}_0^\dagger \mathbf{U}_0 = \mathbf{1}$.

O traço do operador densidade ampliado $\varrho(t)$ é conservado para qualquer instante de tempo. Isso pode ser verificado tomando o traço da Equação 4.109 e da Equação 4.111, o que

fornece

$$\frac{d}{dt} \text{Tr} [\boldsymbol{\rho}_{ss}(t)] = -\text{Tr} \left[\frac{\boldsymbol{\Gamma}}{\hbar} \boldsymbol{\rho}_{ss}(t) \right], \quad (4.112)$$

$$\frac{d}{dt} \text{Tr} [\boldsymbol{\rho}_{ff}(t)] = \text{Tr} \left[\frac{\boldsymbol{\Gamma}}{\hbar} \boldsymbol{\rho}_{ss}(t) \right]. \quad (4.113)$$

Somando ambas equações, tem-se que

$$\frac{d}{dt} \{ \text{Tr} [\boldsymbol{\rho}_{ss}(t)] + \text{Tr} [\boldsymbol{\rho}_{ff}(t)] \} = \frac{d}{dt} \text{Tr} [\boldsymbol{\varrho}(t)] = 0, \quad (4.114)$$

mostrando que o traço da matriz densidade ampliada é conservado durante a evolução temporal.

Portanto, fenômenos de decaimento e descoerência/dissipação estão relacionados, podendo ser tratados através de um mesmo formalismo. Assim, essa técnica torna possível descrever formalmente o decaimento da magnetização em um sistema de *spin*-1/2 utilizando um Hamiltoniano efetivo não-hermitiano, como será apresentado no próximo capítulo.

5 MODELO FENOMENOLÓGICO COM SIMETRIA $SL(2, \mathbb{C})$

As medidas da magnetização de uma amostra, realizadas via técnica de RMN (81), levam em conta a interação entre os *spins* e o ambiente, de modo que os mecanismos de dissipação e descoerência que atuam sobre o sistema devem ser considerados. Estes mecanismos são analisados no formalismo padrão da Mecânica Quântica por meio de equações mestras (82) e formalismo do operador soma. Alternativamente, conforme às discussões anteriores, é possível introduzir um Hamiltoniano efetivo não-hermitiano adequado para descrever sistemas abertos, ainda que de maneira heurística. Nesse sentido, no presente capítulo serão abordados brevemente os princípios da RMN e, em seguida, será introduzido um modelo fenomenológico não-hermitiano que inclui a simetria dinâmica $SL(2, \mathbb{C})$, o qual permite descrever o decaimento da magnetização de um sistema de *spin*-1/2. A partir desse modelo, as magnetizações teóricas serão comparadas com aquelas obtidas em um experimento constituído de uma amostra de núcleos de ^{31}P da molécula de H_3PO_4 .

5.1 RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

A espectroscopia de RMN foi desenvolvida para estudar as propriedades de sistemas de moléculas através dos núcleos atômicos, o que a faz útil em diversas áreas. Na física, essa técnica é utilizada, por exemplo, na determinação das distribuições espaciais de momentos magnéticos e cargas elétricas existentes dentro de materiais, bem como processos de interações entre esses momentos e suas vizinhanças (83). Na química e biologia, a RMN auxilia no estudo das estruturas de moléculas complexas, como por exemplo, os polímeros e as proteínas (84). Na medicina, os tomógrafos utilizam-se da técnica de RMN para produzir imagens do interior do corpo humano *in vivo* de forma não invasiva (85). A partir do final do século XX, a RMN apresenta-se como candidata à implementação de portas lógicas e algoritmos quânticos (86).

O fenômeno de ressonância pode ocorrer em diversos sistemas físicos; desde que um sistema apresente uma frequência natural de vibração, ele pode ser excitado pela ação de um agente externo que esteja em ressonância com aquela vibração natural. Um exemplo clássico envolvendo frequência natural é o de uma massa m presa a uma mola com constante elástica k , de modo que a frequência natural de vibração é dada por $\omega_0 = \sqrt{k/m}$. Aplicando-se uma força externa oscilante do tipo $F(t) = F_0 \cos(\omega_0 t)$ sobre o sistema, ocorrerá o fenômeno de ressonância, que se caracterizará por uma grande amplitude de oscilação da massa presa à mola, mesmo para uma força aplicada de pequeno módulo (52).

Um tipo importante de frequência natural é aquela de um momento magnético μ de um núcleo atômico na presença de um campo magnético estático B_0 , dada por $\omega_L = \gamma B_0$ (frequência de Larmor), em que γ é a razão giromagnética da espécie nuclear (3). Uma vez que o momento magnético total do núcleo atômico $\vec{\mu}$ é proporcional ao momento angular total $\hbar \vec{I} = \hbar(I_x, I_y, I_z)$, segue que $\vec{\mu} = \hbar \gamma \vec{I}$ com $\hbar$ sendo a constante de Planck reduzida, de modo que o fenômeno de

ressonância magnética nuclear é observado apenas para núcleos com momento angular total não-nulo. Este momento angular total é chamado de *spin* nuclear (81).

Na próxima seção, será descrito um sistema de RMN para o caso de núcleos de *spin*-1/2.

5.1.1 O SISTEMA DE RMN

A descrição de um sistema de RMN é baseada no Hamiltoniano do sistema e no Hamiltoniano de controle. Em geral, no referencial de laboratório, o Hamiltoniano do sistema contém a energia dos *spins* acoplados e desacoplados em um campo magnético estático, enquanto o Hamiltoniano de controle surge da aplicação de pulsos de rádio-frequência (67).

O Hamiltoniano de um sistema constituído de um núcleo com *spin*-1/2 representa a interação entre o momento magnético intrínseco $\vec{\mu}$ e o campo magnético $\vec{B}$, sendo escrito conforme

$$\mathbf{H}_s = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{\hbar\gamma}{2} (B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z), \quad (5.1)$$

com $\vec{\mu} = \frac{\hbar\gamma}{2}\vec{\sigma}$ sendo o momento magnético.

No caso particular em que $\vec{B} = B_0\vec{e}_z$, o operador Hamiltoniano torna-se

$$\mathbf{H}_s = -\frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma_z, \quad (5.2)$$

sendo $\omega_L = \gamma B_0$ é a frequência de Larmor. Neste caso, os dois autoestados de $\mathbf{H}_s$, $|\uparrow\rangle \doteq (1, 0)$ (*spin up*) e $|\downarrow\rangle \doteq (0, 1)$ (*spin down*), correspondem às autoenergias $-\hbar\omega_L/2$ e $\hbar\omega_L/2$, respectivamente.

Uma vez que o Hamiltoniano (5.2) pode ser identificado como um elemento da álgebra $\mathfrak{su}(2)$, então o operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t)$ associado a ele, é dado pela Equação 3.49 com $\vec{\tau} = (0, 0, -\omega_L)$, de modo que

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{1} \cos \frac{\omega_L t}{2} + i\sigma_z \sin \frac{\omega_L t}{2}. \quad (5.3)$$

Aplicando-se o operador de evolução temporal em um estado inicial geral $|\Psi_0\rangle$ escrito como

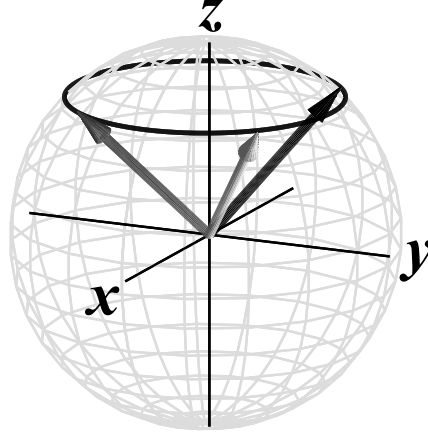
$$|\Psi_0\rangle = \cos \frac{\theta_0}{2} |\uparrow\rangle + \exp[i\phi_0] \sin \frac{\theta_0}{2} |\downarrow\rangle, \quad (5.4)$$

onde θ_0 é o ângulo polar entre o momento magnético intrínseco e o eixo z e ϕ_0 é o ângulo azimutal no plano xy , o estado do sistema em um instante de tempo qualquer $|\Psi(t)\rangle$ evolui conforme

$$|\Psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t) |\Psi_0\rangle = \exp \left[i \frac{\omega_L t}{2} \right] \left(\cos \frac{\theta_0}{2} |\uparrow\rangle + \exp [-i(\omega_L t - \phi_0)] \sin \frac{\theta_0}{2} |\downarrow\rangle \right). \quad (5.5)$$

Este estado pode ser interpretado como a precessão do *spin* em torno do campo magnético na direção z , através de um ângulo θ_0 fixo, com frequência angular ω_L . A visualização da evolução do estado de uma partícula de *spin*-1/2 pode ser feita através do vetor de Bloch (64), como mostrado na Figura 4.

Figura 4 – Representação do vetor de Bloch associado ao estado do sistema $|\Psi(t)\rangle$ (Equação 5.5) para $\theta_0 = \phi_0 = \pi/4$. A trajetória percorrida pelo vetor representa a precessão do momento magnético intrínseco em torno do campo magnético aplicado ao longo da direção positiva do eixo- z .



Fonte: O autor (2018).

A aplicação do campo magnético longitudinal apenas mantém o *spin* executando um movimento de precessão em torno dele. Para fazer o controle do *spin*, aplica-se um campo magnético transversal $\vec{B}_1(t) = B_1[\cos(\omega_{rf}t + \phi)\vec{e}_x - \sin(\omega_{rf}t + \phi)\vec{e}_y]$, que oscila no plano xy com frequência angular ω_{rf} (rádio-frequência). Portanto, o Hamiltoniano de controle no referencial de laboratório é

$$\mathbf{H}_c(t) = -\frac{\hbar\omega_1}{2} [\cos(\omega_{rf}t + \phi)\sigma_x - \sin(\omega_{rf}t + \phi)\sigma_y]. \quad (5.6)$$

Consequentemente, o Hamiltoniano total $\mathbf{H}(t)$ fica sendo expresso como a soma dos Hamiltonianos do sistema $\mathbf{H}_s$ e de controle $\mathbf{H}_c(t)$, ou seja,

$$\mathbf{H}(t) = -\frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma_z - \frac{\hbar\omega_1}{2} [\cos(\omega_{rf}t + \phi)\sigma_x - \sin(\omega_{rf}t + \phi)\sigma_y], \quad (5.7)$$

em que o ângulo ϕ é a fase do campo de rádio-frequência no plano xy e B_1 é a intensidade deste campo, a partir da qual define-se a frequência de nutação $\omega_1 = \gamma B_1$.

A descrição da evolução temporal do *spin* em termos do referencial de laboratório é complicada, uma vez que envolve o Hamiltoniano (5.7) que depende do tempo e não comuta consigo mesmo em tempos diferentes. Entretanto, esse problema pode ser simplificado descrevendo-se a evolução do sistema a partir de um referencial que rotaciona em torno do eixo z com frequência angular ω_{rf} . Este referencial é chamado de referencial girante (67).

O estado do sistema no referencial girante, $|\Psi_r(t)\rangle$, está associado ao estado do sistema no referencial de laboratório, $|\Psi(t)\rangle$, por meio da transformação unitária $\mathbf{U}_z(t)$ conforme

$$|\Psi_r(t)\rangle = \mathbf{U}_z(t)|\Psi(t)\rangle, \quad \mathbf{U}_z(t) = \exp\left[-i\frac{\omega_{rf}\sigma_z}{2}t\right]. \quad (5.8)$$

Invertendo a Equação 5.8, pode-se obter o estado no referencial de laboratório expresso em termos do estado no referencial girante como segue

$$|\Psi(t)\rangle = \mathbf{U}_z^\dagger(t)|\Psi_r(t)\rangle. \quad (5.9)$$

Substituindo o estado $|\Psi(t)\rangle$ na Equação 3.25, obtém-se uma equação que descreve o sistema do ponto de vista do referencial girante, a qual é dada por

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_r(t)\rangle = \mathbf{H}_r |\Psi_r(t)\rangle, \quad (5.10)$$

em que $\mathbf{H}_r$ representa o Hamiltoniano do sistema no novo referencial, ficando definido como

$$\mathbf{H}_r = \frac{\hbar\omega_{rf}}{2} \boldsymbol{\sigma}_z + \mathbf{U}_z(t) \mathbf{H}(t) \mathbf{U}_z^\dagger(t). \quad (5.11)$$

Pode-se mostrar que este novo Hamiltoniano é independente do tempo, uma vez que o segundo termo é dado por

$$\mathbf{U}_z(t) \mathbf{H}(t) \mathbf{U}_z^\dagger(t) = -\frac{\hbar\omega_L}{2} \boldsymbol{\sigma}_z - \frac{\hbar\omega_1}{2} [\cos \phi \boldsymbol{\sigma}_x - \sin \phi \boldsymbol{\sigma}_y], \quad (5.12)$$

em que as componentes $\boldsymbol{\sigma}_j$ do Hamiltoniano (5.7) são transformadas de acordo com as seguintes relações:

$$\mathbf{U}_z(t) \boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{U}_z^\dagger(t) = \cos(\omega_{rf}t) \boldsymbol{\sigma}_x + \sin(\omega_{rf}t) \boldsymbol{\sigma}_y, \quad (5.13)$$

$$\mathbf{U}_z(t) \boldsymbol{\sigma}_y \mathbf{U}_z^\dagger(t) = -\sin(\omega_{rf}t) \boldsymbol{\sigma}_x + \cos(\omega_{rf}t) \boldsymbol{\sigma}_y, \quad (5.14)$$

$$\mathbf{U}_z(t) \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{U}_z^\dagger(t) = \boldsymbol{\sigma}_z. \quad (5.15)$$

Por fim, o Hamiltoniano no referencial girante $\mathbf{H}_r$ torna-se

$$\mathbf{H}_r = -\frac{\hbar\Delta\omega}{2} \boldsymbol{\sigma}_z - \frac{\hbar\omega_1}{2} [\cos \phi \boldsymbol{\sigma}_x - \sin \phi \boldsymbol{\sigma}_y], \quad (5.16)$$

em que $\Delta\omega = \omega_L - \omega_{rf}$.

De acordo com a Equação 3.49, o operador de evolução temporal $\mathbf{U}_r(t)$ associado ao Hamiltoniano $\mathbf{H}_r$ é dado por

$$\mathbf{U}_r(t) = \mathbf{1} \cos \frac{\kappa t}{2} - i \frac{(-\omega_1 \cos \phi, \omega_1 \sin \phi, -\Delta\omega)}{\kappa} \cdot (\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y, \boldsymbol{\sigma}_z) \sin \frac{\kappa t}{2}, \quad (5.17)$$

onde $\kappa = \sqrt{\omega_1^2 + \Delta\omega^2}$. Sob a ação do operador (5.17), o estado do sistema precessiona em torno de um eixo inclinado com um ângulo $\alpha = \arctan(\omega_1/\Delta\omega)$ em relação ao eixo z com frequência κ , conforme é ilustrado na Figura 5a. Por exemplo, considerando a direção do pulso de rádio-frequência $\phi = \pi/2$, o operador de evolução temporal da Equação 5.17 fica dado por

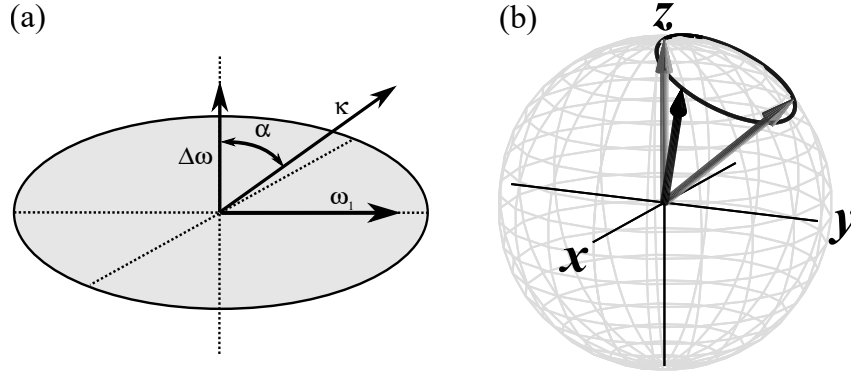
$$\mathbf{U}_r(t) = \mathbf{1} \cos \frac{\kappa t}{2} - i \frac{\omega_1}{\kappa} \boldsymbol{\sigma}_y + i \frac{\Delta\omega}{\kappa} \boldsymbol{\sigma}_z \sin \frac{\kappa t}{2}. \quad (5.18)$$

Seja o estado inicial do sistema $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\rangle$, de modo que o estado do sistema em um instante de tempo t qualquer fica dado por

$$|\Psi_r(t)\rangle = \mathbf{U}_r(t) |\Psi_0\rangle = \left(\cos \frac{\kappa t}{2} + i \frac{\Delta\omega}{\kappa} \sin \frac{\kappa t}{2} \right) |\uparrow\rangle + \frac{\omega_1}{\kappa} \sin \frac{\kappa t}{2} |\downarrow\rangle. \quad (5.19)$$

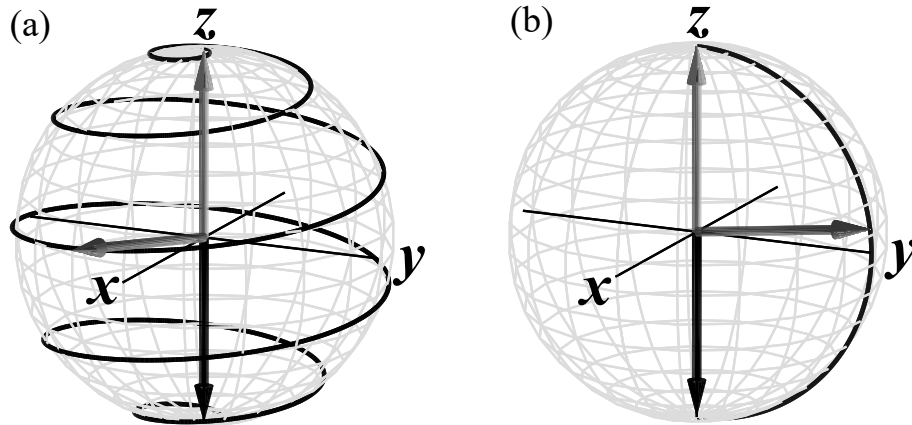
Neste caso, o *spin* precessiona em torno do campo efetivo com frequência angular κ , como é representado pelo vetor de Bloch na Figura 5b.

Figura 5 – Resultado da aplicação do pulso de rádio-frequência visto do referencial girante, para o caso fora da ressonância $\omega_{rf} \neq \omega_L$. (a) Esquema indicando a frequência efetiva $\kappa = \sqrt{\omega_1^2 + \Delta\omega^2}$ produzida pela aplicação do pulso de rádio-frequência. O ângulo α indica a direção do campo magnético efetivo em torno do qual o *spin* precessiona. (b) Vetor de Bloch associado ao estado $|\Psi(t)\rangle$ (Equação 5.19) representando a precessão do *spin* em torno do campo efetivo com frequência angular κ , para os parâmetros $\omega_L = 1$ Hz, $\omega_{rf} = 0.8$ Hz e $\omega_1 = 0.1$ Hz. O vetor cinza claro indica o estado inicial, enquanto os vetores cinza escuro e preto indicam as posições em tempos posteriores.



Fonte: O autor (2018).

Figura 6 – Nutação do *spin* sujeito a um campo de rádio-frequência com intensidade proporcional à frequência de nutação $\omega_1 = \gamma B_1 = 0.1$ Hz, considerando um pulso de rádio-frequência na direção x ($\phi = 0$) com frequência ω_{rf} igual a frequência de precessão de Larmor ω_L do núcleo, $\omega_{rf} = \omega_L = 1$ Hz. O vetor cinza claro indica o estado inicial, enquanto os vetores cinza escuro e preto indicam o estado em tempos posteriores, vistos (a) do referencial de laboratório e (b) do referencial girante.



Fonte: O autor (2018).

Considerando um pulso de rádio-frequência com frequência ω_{rf} igual à frequência de Larmor (ω_L), $\omega_{rf} = \omega_L$, o *spin* traça uma trajetória complicada (Figura 6a) gerada pelo Hamiltoniano (5.7) do ponto de vista do referencial de laboratório. Entretanto, do ponto de vista do referencial girante, o *spin* apenas precessiona em torno do campo efetivo $\vec{B}_e = B_1[\cos \phi \vec{e}_x - \sin \phi \vec{e}_y]$, cuja direção é determinada pelo ângulo azimutal ϕ (Figura 6b).

Núcleos que estão fora da ressonância não sofrem o efeito do pulso de rádio-frequência,

pois α torna-se muito pequeno quando comparado com $\Delta\omega \gg \omega_1$. Assim, pode-se considerar que todos os *spins* possuem frequências de Larmor separadas, sendo possível selecionar e rodar um *spin* específico sem rodar os outros (67). Entretanto, em sistemas reais é difícil obter medidas referentes a um núcleo isolado, uma vez que ele está em contato com um grande número de núcleos com a mesma frequência de Larmor (ou próxima) presentes na amostra.

A aplicação do pulso de rádio-frequência perturba o estado de equilíbrio térmico do sistema de *spins* e após certo tempo ele retorna ao equilíbrio por meio de um processo chamado de relaxação *spin-rede* (87). Esse processo é caracterizado pela troca de energia entre o sistema de *spins* e o reservatório térmico (rede), o qual está em equilíbrio (88, 89). Além disso, a relaxação ocorre também pela interação das flutuações dos campos magnéticos (campos internos) produzidos por cada um dos núcleos, esse processo é chamado de relaxação *spin-spin* (81, 90).

A descrição do fenômeno de relaxação é feita em muitos textos através de uma abordagem fenomenológica semi-clássica utilizando as equações de Bloch (83, 87). Essas equações descrevem o comportamento da magnetização líquida de um sistema de RMN. No contexto da Mecânica Quântica, a relaxação é reescrita através de uma equação mestra para o operador densidade do sistema na representação de interação, chamada de equação de Redfield, que contém termos com as informações físicas responsáveis pela relaxação (83, 90, 91, 92).

Na seção seguinte, será discutido brevemente um experimento de RMN no qual a magnetização líquida decai no tempo. Apresentar-se-á os dados experimentais referentes às medidas das componentes da magnetização líquida de um experimento composto por núcleos de ^{31}P .

5.2 UMA PROPOSTA EXPERIMENTAL

Nesta seção serão esboçados alguns aspectos referentes a um experimento constituído de núcleos de *spin*-1/2 via técnica de RMN cuja magnetização líquida decai no tempo.

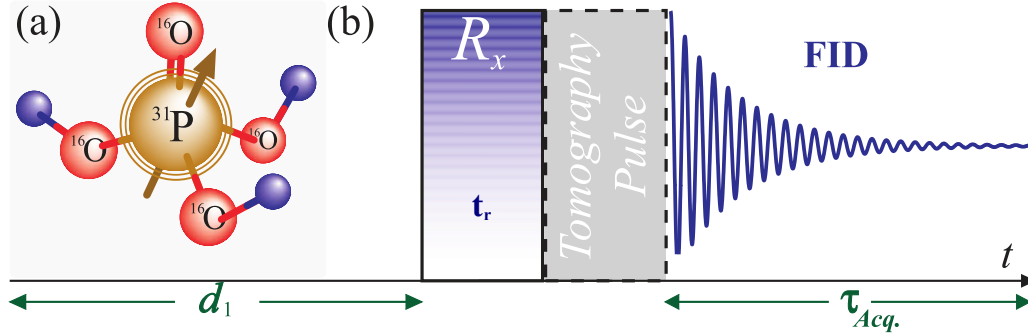
5.2.1 METODOLOGIA

Uma amostra que pode representar o *qubit* é o núcleo ^{31}P da molécula de H_3PO_4 , ilustrada na Figura 7a. Em relação à estequiometria da amostra, esta contém 12.5% de H_3PO_4 e 87.5% de D_2O em uma solução de 0.650 mL, sendo colocada em um tubo de 5 mm de diâmetro externo, próprio para experimentos de RMN. Esta amostra é analisada por meio de um espectrômetro Ascend Bruker¹ de 400 MHz (equivalente a um campo magnético estático $B_0 = 9.39 \text{ T}$), o qual possui um canal contendo a faixa de frequência necessária para excitar e detectar os sinais dos núcleos de ^{31}P . Neste canal, pode-se ajustar o pulso de rádio-frequência $\omega_{rf} = 2\pi(161.975 \text{ MHz})$, aplica-se um pulso de $\pi/2$ em um tempo de $11.4 \mu\text{s}$ correspondente à intensidade do pulso de rádio-frequência $\omega_1 = 2\pi(21930 \text{ Hz})$ proporcional à intensidade do campo magnético transversal

¹ C-LABMU-UEPG

B_1 . Além disso, o tempo de repetição de cada experimento é $d_1 = 20$ s e o tempo de aquisição do sinal (FID²) é $\tau_{Acq} = 2.5$ s (como é representado na Figura 7b).

Figura 7 – (a) Figura representativa de uma molécula de H_3PO_4 . (b) Sequência de pulsos para implementar e monitorar a dinâmica da matriz densidade. O tempo de espera d_1 permite alcançar o estado de equilíbrio do núcleo na amostra. A rotação $R_x(t_r)$ é utilizada para controlar a dinâmica dos núcleos. O retângulo tracejado representa o pulso de tomografia de estado quântico. Finalmente, é feita a leitura do FID (*Free Induction Decay*). O pulso de tomografia de um experimento semelhante é discutido em (93).



Fonte: O autor (2018).

5.2.2 O ESTADO INICIAL PSEUDO-PURO

Em uma dinâmica coerente do sistema de RMN, o Hamiltoniano de interação entre o momento magnético do núcleo $\hbar\gamma(\mathbf{I}_x, \mathbf{I}_y, \mathbf{I}_z)$ e um intenso campo magnético ao longo do eixo z igual a $\vec{B}_0 = B_0\vec{e}_z$, é representado por $\mathbf{H}_s = -\hbar\gamma B_0\mathbf{I}_z = -\hbar\omega_L\mathbf{I}_z$ com γ sendo a razão giromagnética e ω_L a frequência de Larmor. Assim, o estado quântico estacionário termodinâmico (estado térmico) de um sistema de *spin* em RMN é dado por (81)

$$\rho_{eq} = \frac{e^{-\beta\mathbf{H}_s}}{\mathcal{Z}}, \quad (5.20)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, com k_B sendo a constante de Boltzmann e T a temperatura, $\mathcal{Z} = \text{Tr}[e^{-\beta\mathbf{H}_s}] = 2 \cosh\left(\frac{\beta\hbar\omega_L}{2}\right)$ é a função de partição. Expandindo o numerador da expressão (5.20), é possível reescrever o estado térmico ρ_{eq} na forma

$$\rho_{eq} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \exp\left(\frac{\beta\hbar\omega_L\sigma_z}{2}\right) = \frac{1}{2} + \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega_L}{2}\right) \frac{\sigma_z}{2}, \quad (5.21)$$

onde a função $\tanh(\beta\hbar\omega_L/2)$ é conhecida como polarização (94, 95).

Em baixas temperaturas ($\hbar\omega_L \gg k_B T$) o estado térmico tende a um estado puro

$$\rho_{eq} \approx \frac{1}{2} + \frac{\sigma_z}{2} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|, \quad (5.22)$$

² Decaimento de indução livre, do inglês *Free Induction Decay*.

enquanto no regime de altas temperaturas ($\hbar\omega_L \ll k_B T$), o estado térmico obedece a relação

$$\rho_{eq} \approx \frac{1}{2} + \epsilon \frac{\sigma_z}{2}, \quad (5.23)$$

em que $\epsilon \equiv \frac{\hbar\omega_L}{2k_B T}$ é o fator de polarização e corresponde a um ligeiro desvio entre a matriz identidade dividida por 2 e a matriz de Pauli $\sigma_z/2$, a qual representa a matriz de desvio $\Delta\rho_0$:

$$\Delta\rho_0 \equiv \frac{\sigma_z}{2}. \quad (5.24)$$

Apesar de $\Delta\rho_0$ não representar uma matriz densidade no sentido estrito, já que $\text{Tr}[\Delta\rho_0] = 0$ e possui autovalor negativo, é esta a matriz detectada na tomografia de estado quântico (96).

O fato do sistema de *spins* nucleares utilizado em RMN encontrar-se em equilíbrio térmico à temperatura ambiente, significa que o operador densidade do sistema encontra-se em uma mistura estatística de estados, pois das Equações (5.21) e (5.23) tem-se que $\rho_{eq} \approx \frac{1}{2}\mathbf{1}$, uma vez que $\epsilon \ll 1$. Para núcleos de ^{31}P à temperatura ambiente (24°C), o fator de polarização é dado por $\epsilon = 1.304 \times 10^{-5}$.

Em uma mistura não há nenhum estado bem definido, de modo que não saber exatamente qual o estado inicial do sistema, significa também não saber qual o estado final após à aplicação de uma operação. Isso a princípio é um problema, pois para que o estado em que o sistema se encontra seja bem definido, ele deve ser um estado puro. Entretanto, através da aplicação de pulsos de rádio-frequência pode-se manipular as populações e coerências quânticas do sistema de *spins* para fazer com que ele seja levado a um estado pseudo-puro (81, 97).

No caso de sistemas de *spin*-1/2, o estado de equilíbrio ρ_{eq} é equivalente ao estado pseudo-puro do sistema. Isto fica evidente se o termo $\epsilon\mathbf{1}/2$ for adicionado e subtraído do lado direito da Equação 5.23, de modo que

$$\rho_{eq} = \frac{1}{2}(1 - \epsilon)\mathbf{1} + \epsilon \left(\frac{\mathbf{1} + \sigma_z}{2} \right) \quad (5.25)$$

onde o segundo termo representa o estado puro $|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$ (*spin up*), de tal forma que

$$\rho_{eq} = \frac{1}{2}(1 - \epsilon)\mathbf{1} + \epsilon |\uparrow\rangle\langle\uparrow|. \quad (5.26)$$

Como os observáveis em RMN possuem traço nulo, apenas o segundo termo da Equação 5.26 contribui com a detecção, uma vez que de acordo com a Equação 5.25 o estado puro $|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$ contém a matriz densidade de desvio $\Delta\rho_0 = \sigma_z/2$. Esta matriz é a única detectada em medidas de RMN, a qual é tomografada e reconstruída por meio do uso de rotações globais (98). Portanto, o estado inicial do sistema de RMN é dado pela matriz densidade de desvio $\Delta\rho_0$ (este estado está representado pelo índice $k = 1$ na Figura 8).

5.2.3 RESULTADOS EXPERIMENTAIS

No experimento com núcleos de ^{31}P à temperatura ambiente, o estado inicial $\Delta\rho_0 = \sigma_z/2$ pode ser controlado através da aplicação de pulsos de rádio-frequência e, neste caso, o

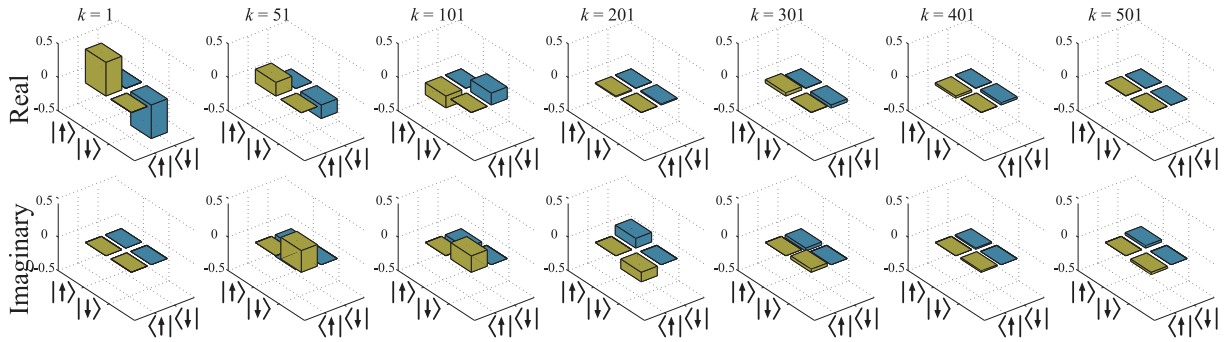
Hamiltoniano do sistema possui a forma (5.7). Uma dinâmica específica é estabelecida colocando-se o sistema em ressonância por meio da aplicação de pulsos de rádio-frequência com fase $\phi = 0$ e frequência angular ω_{rf} igual a frequência de Larmor ω_L do núcleo ^{31}P . Com isso, visto do referencial girante, os *spins* precessionam em torno de um campo magnético efetivo ao longo do eixo x tal que o Hamiltoniano (5.16) é reduzido a $\mathbf{H}_r = -\hbar\omega_1\mathbf{I}_x$ com a intensidade do campo proporcional a frequência angular experimental $\omega_1 = 2\pi(21930 \text{ Hz})$. Assim, o estado quântico inicial é transformado pelo operador $\mathbf{R}_x$ definido como

$$\mathbf{R}_x(t_{r,k}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_r t_{r,k}\right] = \exp[i\omega_1 t_{r,k}\mathbf{I}_x] . \quad (5.27)$$

para quinhentos diferentes $t_{r,k} \in [0 \text{ s}, 500 \times 10^{-6} \text{ s}]$ com $\Delta t_r = t_{r,k} - t_{r,k-1} = 1 \times 10^{-6} \text{ s}$.

Os resultados experimentais obtidos por meio de processos de tomografia de estado quântico (96, 98, 99) são caracterizados pelos gráficos de barra mostrados na Figura 8 para os índices $k = 1, 51, 101, 201, 301, 401, 501$ associados ao tempo $t_{r,k}$. Os gráficos em barra apresentados em cima e embaixo representam as partes real e imaginária, respectivamente, da matriz densidade de desvio $\Delta\rho(t_{r,k})$. Os resultados experimentais mostram que o sistema

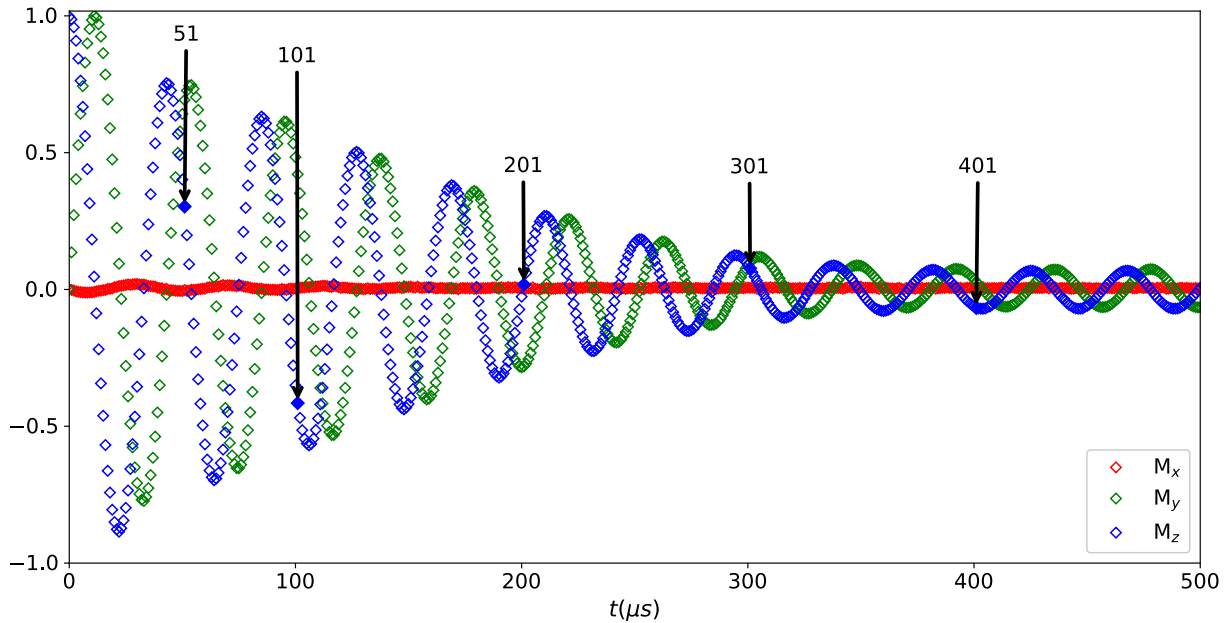
Figura 8 – Partes real e imaginária da matriz densidade de desvio $\Delta\rho(t_{r,k})$ obtidas experimentalmente para os diferentes valores de tempo indexados por $k = 1, 51, 101, 201, 301, 401$ e 501. O estado inicial representa o alinhamento dos *spins* no sentido do campo B_0 e o estado final representa uma mistura de estados.



Fonte: O autor (2018).

encontra-se inicialmente no estado pseudo-puro *spin up* (índice $k = 1$ na Figura 8) e é conduzido a um estado misto à medida que o tempo avança ($k = 301, 401, 501$ na Figura 8) devido às flutuações térmicas que induzem a perda de coerência durante a evolução temporal. Também foram quantificadas as magnetizações, cuja análise está resumida na Figura 9. Os resultados experimentais representam as componentes $M_{x,y,z}$ da magnetização líquida normalizada e os instantes representados na Figura 8 para matriz densidade estão indicados na Figura 9 pelas setas numeradas apontadas para os símbolos preenchidos nos dados experimentais de M_z . As interpretações e discussões a respeito dos resultados experimentais serão feitas mais adiante na seção 5.4 quando os dados obtidos no laboratório forem comparados com os obtidos através do modelo teórico proposto neste trabalho.

Figura 9 – Gráfico com os dados experimentais para as componentes M_x (vermelho), M_y (verde) e M_z (azul) da magnetização líquida normalizada. As setas numeradas apontam os símbolos preenchidos que denotam os instantes correspondentes aqueles da Figura 8.



Fonte: O autor (2018).

O valor calibrado para a frequência angular de nutação ω_1 tem um erro de 0.1% em relação ao valor $\omega_{1,\text{exp}} = 2\pi(21956 \pm 1996 \text{ Hz})$ obtido a partir do pico no espectro representado na Figura 10. Nota-se que há uma distribuição de valores devido à inhomogeneidade do campo magnético transversal. Caso a homogeneidade do campo fosse alta, o espectro de absorção (azul) tenderia a uma delta de Dirac. Por outro lado, isso permite que o valor da frequência angular ω_1 no modelo teórico seja ajustado entre os valores mínimo e máximo de $\omega_{1,\text{exp}}$.

Para descrever formalmente os resultados referentes à matriz densidade tomografada e as magnetizações, é necessário empregar a teoria de Redfield que incorpora a relaxação (100). A interação de uma partícula com $spin-1/2$ é apresentada via Equação mestra na referência (101). Entretanto, na seção seguinte será introduzido um modelo não-hermitiano que permite descrever as magnetizações de maneira simples e com boa precisão dentro do tempo de observação.

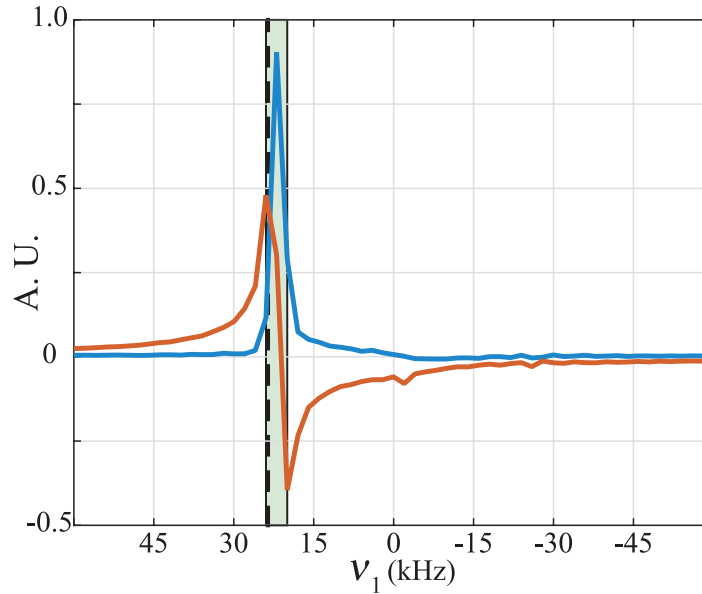
5.3 O MODELO TEÓRICO

Como visto no Capítulo 4, o Hamiltoniano não-hermitiano de um sistema de dois níveis geral pode ser escrito em termos dos geradores do grupo $SL(2, \mathbb{C})$ mais uma identidade, de modo que este Hamiltoniano não-hermitiano $\mathbf{H}$ toma a forma

$$\mathbf{H} = \hbar(\mathbf{a}_0 - i\mathbf{b}_0)\mathbf{I}_0 + \sum_{\{x,y,z\}} \hbar\mathbf{a}_k\mathbf{I}_k - i \sum_{\{x,y,z\}} \hbar\mathbf{b}_k\mathbf{I}_k, \quad \mathbf{I}_k = \frac{\boldsymbol{\sigma}_k}{2}, \quad (5.28)$$

em que $\mathbf{a}_k$ e $\mathbf{b}_k$ são constantes reais, $\boldsymbol{\sigma}_k$ as matrizes de Pauli e $\mathbf{I}_0 = 1/2$. Um operador Hamiltoniano hermitiano é obtido em (5.28) considerando-se $\mathbf{b}_k = 0$, neste caso, o operador possui

Figura 10 – A partir da transformada de Fourier dos dados experimentais da Figura 9 obtêm-se os espectros de absorção (azul) e dispersão (laranja), tal que o valor máximo da frequência ν_1 acontece em 21956 ± 1996 Hz. O erro no valor da frequência corresponde ao tamanho mínimo do passo representado pelo retângulo. A linha tracejada indica o valor $\nu'_1 = 23566$ Hz que é a melhor frequência para o ajuste dos resultados teóricos aos dados experimentais (Figura 9) como é visto na seção 5.4.



Fonte: O autor (2018).

espectro real e as leis da Mecânica Quântica convencional são mantidas. Entretanto, o operador Hamiltoniano não-hermitiano (5.28), em geral, possui espectro complexo; é possível que o Hamiltoniano seja não-hermitiano e, ainda assim, possua espectro real, sendo um operador quase-hermitiano e, neste sentido, vale a discussão sobre sistemas quase-hermitianos feita no Capítulo 4. O termo $\alpha_0 \mathbf{I}_0$ representa um fator de fase global na dinâmica, enquanto o termo $i\mathbf{b}_0 \mathbf{I}_0$ é responsável por um fator dissipativo no modelo, que pode ser empregado para simular os efeitos de relaxação.

Como visto anteriormente, um sistema de *spin*-1/2 ideal submetido a um campo magnético B_1 ao longo do eixo x evolui de forma unitária, de modo que, no referencial girante, o *spin* precessiona indefinidamente no plano perpendicular yz (Figura 6b), consequentemente, as componentes y e z das magnetizações oscilam indefinidamente sem nenhum tipo de atenuação. Entretanto, em um sistema quântico de *spin* real, os núcleos não estão completamente isolados, havendo a interação entre os núcleos e também com o ambiente, como pode ser observado nos resultados experimentais obtidos em um experimento com núcleos de ^{31}P da molécula de H_3PO_4 (Figura 9). Desta forma, a descrição do experimento na seção anterior, é feita empregando-se um Hamiltoniano efetivo não-hermitiano de uma partícula de *spin*-1/2 no intuito de simular os efeitos de dissipação e perda de coerência através da criação de um estado efetivo instável que simula o estado coletivo do sistema de *spins*.

De acordo com o objetivo do trabalho, propõe-se um modelo fenomenológico similar ao proposto por Ellinas (38) e aplicado por Sergi e Zloshchastieva (40) na descrição de sistemas de dois níveis em ambientes dissipativos. O modelo aqui proposto, baseia-se em um sistema de RMN composto pelo Hamiltoniano (5.7) que descreve a interação entre uma partícula de *spin*-1/2 com um forte campo magnético externo ao longo da direção z e um campo magnético transversal dependente do tempo, com a adição de um termo anti-hermitiano para simular a dissipação nas componentes da magnetização. Portanto, o Hamiltoniano não-hermitiano do modelo tem a seguinte forma no sistema de referencial de laboratório:

$$\mathbf{H}(t) = -\hbar\omega_L \mathbf{I}_z - \hbar\omega'_1 [\cos(\omega_{rf}t + \phi) \mathbf{I}_x - \sin(\omega_{rf}t + \phi) \mathbf{I}_y] - i\hbar\omega'_1 (\lambda \mathbf{I}_0 + \mu \mathbf{I}_z). \quad (5.29)$$

Visto de um referencial girante, o Hamiltoniano (5.29) assume a seguinte forma

$$\mathbf{H}_r = -\hbar(\omega_L - \omega_{rf}) \mathbf{I}_z - \hbar\omega'_1 [\cos \phi \mathbf{I}_x - \sin \phi \mathbf{I}_y] - i\hbar\omega'_1 (\lambda \mathbf{I}_0 + \mu \mathbf{I}_z), \quad (5.30)$$

onde identificam-se os coeficientes da Equação 5.28 como sendo: $\hbar a_z = -\hbar\omega_L$ é a energia de precessão proporcional à frequência de Larmor ω_L , $\hbar a_y = -\hbar\omega'_1 \sin(\phi)$ e $\hbar a_x = \hbar\omega'_1 \cos(\phi)$ estão associados à contribuição de energia relativa ao campo de rádio-frequência com intensidade proporcional à frequência de nutação ω'_1 e defasado por ϕ , $\hbar b_0 = \hbar\lambda\omega'_1$ e $\hbar b_z = \hbar\mu\omega'_1$ representam a dissipação de energia proporcional a ω'_1 . O operador Hamiltoniano em (5.29) é definido de acordo com a simetria $\mathbb{R}_-^b \{+\} \otimes SL(2, \mathbb{C})$, onde $\mathbb{R}_-^b \{+\}$ denota o conjunto de domínio dos fatores de dissipação isomórfico ao semigrupo de números reais negativos sob operação de adição (38).

No Capítulo 4, foi discutido que do ponto de vista teórico a dinâmica não-hermitiana pode ser descrita utilizando a representação biortogonal, na qual consideram-se dois operadores de evolução temporal, $\mathbf{U}(t)$ e $\mathbf{V}(t)$, que ditam as evoluções temporais do sistema para tempos positivos e negativos, respectivamente (30). Entretanto, a dinâmica descrita por um estado quântico instável é determinada unicamente pela evolução temporal para tempos positivos; a evolução temporal para tempos negativos ainda não tem significado claro. Assim, um estado inicialmente puro $|\Psi_0\rangle$ evolui no tempo de acordo com

$$|\Psi_f(t)\rangle = \mathbf{U}(t) |\Psi_0\rangle, \quad t \geq 0, \quad (5.31)$$

em que $\mathbf{U}(t)$ é um operador não-unitário que representa a evolução temporal do sistema.

Considerando o regime de ressonância $\omega_{rf} = \omega_L$, o operador Hamiltoniano (5.30) torna-se

$$\mathbf{H}_r = -\hbar\omega'_1 [\cos \phi \mathbf{I}_x - \sin \phi \mathbf{I}_y] - i\hbar\omega'_1 (\lambda \mathbf{I}_0 + \mu \mathbf{I}_z). \quad (5.32)$$

Além disso, assume-se que o parâmetro adimensional μ está definido no intervalo $-1 < \mu < 1$ para garantir que a parte do Hamiltoniano que contém a simetria $SL(2, \mathbb{C})$ da evolução possua autovalores reais, o que mantém termos oscilantes no operador de evolução temporal. Além

disso, $\lambda \geq 0$ para que haja o decaimento nos estados. Neste caso, a evolução temporal fica representada pelo operador matricial $U(t)$ conforme

$$U(\tau) = e^{-\frac{\lambda\omega'_1 t}{2}} \begin{pmatrix} C_\mu - \mu S_\mu & -i \exp(i\phi) S_\mu \\ -i \exp(-i\phi) S_\mu & C_\mu + \mu S_\mu \end{pmatrix}, \quad t \geq 0, \quad (5.33)$$

onde identificam-se as funções S_μ e C_μ como sendo

$$S_\mu = \frac{1}{\sqrt{1-\mu^2}} \sin\left(\frac{\sqrt{1-\mu^2} \omega'_1 t}{2}\right), \quad C_\mu = \cos\left(\frac{\sqrt{1-\mu^2} \omega'_1 t}{2}\right). \quad (5.34)$$

Uma vez que deseja-se descrever os resultados experimentais através de um modelo teórico para dinâmica incoerente de um sistema de *spin*-1/2, é necessário utilizar o formalismo do operador densidade descrito no Apêndice A. De acordo com a Equação A.22, a dinâmica quântica associada a um estado inicial ρ_0 definido como

$$\rho_0 = |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|, \quad (5.35)$$

é dada por

$$\rho(t) = U(t) \rho_0 U^\dagger(t), \quad t \geq t_0, . \quad (5.36)$$

Fazendo-se a escolha particular do estado inicial como sendo

$$\rho_0 = |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0| = |\uparrow\rangle \langle \uparrow|, \quad (5.37)$$

os elementos da matriz densidade $\rho(t)$, em um instante de tempo t qualquer, ficam dados por

$$\rho_{11}(t) = (C_\mu - \mu S_\mu)^2 e^{-\lambda\omega'_1 t}, \quad (5.38)$$

$$\rho_{22}(t) = S_\mu^2 e^{-\lambda\omega'_1 t}, \quad (5.39)$$

$$\rho_{12}(t) = \rho_{21}^*(t) = -i S_\mu (C_\mu - \mu S_\mu) \exp[i\phi] e^{-\lambda\omega'_1 t}. \quad (5.40)$$

Além disso, o traço de $\rho(t)$ é dado por

$$\text{Tr}[\rho(t)] = [(C_\mu - \mu S_\mu)^2 + S_\mu^2] e^{-\lambda\omega'_1 t}, \quad (5.41)$$

que é igual à unidade no limite em que $\mu \rightarrow 0$; neste limite, a simetria dinâmica $SU(2)$ é recuperada. Nota-se que a utilização do Hamiltoniano não-hermitiano leva a uma evolução não-unitária a qual implica na não conservação do traço da matriz densidade.

O fato do traço da matriz densidade $\rho(t)$ não ser conservado à medida que $t \rightarrow \infty$, deixa essa teoria em um quadro obscuro em relação à estrutura formal da Mecânica Quântica, na qual o traço da matriz densidade deve se conservar. Para isso, é possível recorrer ao formalismo híbrido proposto por Bertlmann, Grimus e Hiesmayr (34) (descrito no Capítulo 4) que oferece uma descrição na qual o traço da matriz densidade é conservado.

Para aplicar o formalismo híbrido ao modelo proposto, considera-se a equação de Lindblad (dada pela Equação 4.103) no espaço de Hilbert ampliado, $\mathbb{H} = \mathbb{H}_s \oplus \mathbb{H}_f$, para o operador densidade $\varrho(t)$,

$$\frac{d}{dt}\varrho(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\varrho(t) + \frac{i}{\hbar}\varrho(t)\mathcal{H} - \frac{1}{\hbar}\mathcal{D}[\varrho(t)], \quad (5.42)$$

onde o dissipador assume a forma

$$\mathcal{D}[\varrho(t)] = \frac{1}{2} [\mathcal{B}^\dagger \mathcal{B} \varrho(t) + \varrho(t) \mathcal{B}^\dagger \mathcal{B} - 2\mathcal{B} \varrho(t) \mathcal{B}^\dagger]. \quad (5.43)$$

Os operadores no espaço ampliado ficam dados por

$$\varrho = \begin{pmatrix} \rho_{ss} & \rho_{sf} \\ \rho_{sf}^\dagger & \rho_{ff} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \Gamma^{\frac{1}{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.44)$$

em que os operadores $\mathbf{H}_0$ e Γ são identificados pela decomposição do Hamiltoniano (5.32) na forma

$$\mathbf{H}_r = \mathbf{H}_0 - i\frac{\Gamma}{2}, \quad (5.45)$$

com

$$\mathbf{H}_0 = -\hbar\omega'_1 [\cos\phi \mathbf{I}_x - \sin\phi \mathbf{I}_y], \quad \Gamma = 2\hbar\omega'_1 (\lambda\mathbf{I}_0 + \mu\mathbf{I}_z). \quad (5.46)$$

Aqui, tem-se que $\lambda \geq \mu$ para que Γ seja um operador semi-positivo (34).

Desta forma, as equações de evolução temporal relativas a cada subespaço do operador densidade ampliado são dadas por

$$\frac{d}{dt}\rho_{ss}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}_0, \rho_{ss}(t)] - \frac{1}{2\hbar} \{\Gamma, \rho_{ss}(t)\}, \quad (5.47)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{sf}(t) = -\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{H}_0 - i\frac{\Gamma}{2} \right) \rho_{sf}(t), \quad (5.48)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{ff}(t) = \frac{1}{\hbar} \Gamma^{\frac{1}{2}} \rho_{ss}(t) \Gamma^{\frac{1}{2}}. \quad (5.49)$$

com as condições iniciais escolhidas na forma

$$\rho_{ss}(0) = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|, \quad \rho_{sf} = 0, \quad \rho_{ff} = 0. \quad (5.50)$$

A solução para $\rho_{ss}(t)$ é expressa a seguir em termos de suas componentes:

$$\rho_{ss}^{11}(t) = (C_\mu - \mu S_\mu)^2 e^{-\lambda\omega'_1 t}, \quad (5.51)$$

$$\rho_{ss}^{22}(t) = S_\mu^2 e^{-\lambda\omega'_1 t}, \quad (5.52)$$

$$\rho_{ss}^{12}(t) = \rho_{ss}^{21*}(t) = -iS_\mu(C_\mu - \mu S_\mu) \exp[i\phi] e^{-\lambda\omega'_1 t}. \quad (5.53)$$

Pode-se notar que a solução da Equação 5.47 é exatamente a mesma dada pela Equação 5.36, ou seja, $\rho_{ss}(t) = \rho(t)$. No limite de $t \rightarrow \infty$, o traço da matriz densidade $\rho_{ss}(t)$ é

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \text{Tr} [\rho_{ss}(t)] = 0. \quad (5.54)$$

A solução $\rho_{\text{ff}}(t)$ é dada por

$$\rho_{\text{ff}}(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t d\tau \Gamma^{\frac{1}{2}} \rho_{\text{ss}}(\tau) \Gamma^{\frac{1}{2}}. \quad (5.55)$$

cujos elementos são

$$\rho_{\text{ff}}^{11}(t) = \omega'_1(\lambda + \mu) \int_0^t d\tau (C_\mu - \mu S_\mu)^2 e^{-\lambda \omega'_1 \tau}, \quad (5.56)$$

$$\rho_{\text{ff}}^{22}(t) = \omega'_1(\lambda - \mu) \int_0^t d\tau S_\mu^2 e^{-\lambda \omega'_1 \tau}, \quad (5.57)$$

$$\rho_{\text{ff}}^{12}(t) = \rho_{\text{ff}}^{21*}(t) = -i\omega'_1 \sqrt{\lambda^2 - \mu^2} \exp[i\phi] \int_0^t d\tau (C_\mu - \mu S_\mu) S_\mu e^{-\lambda \omega'_1 \tau}, \quad (5.58)$$

em que as integrais não serão calculadas, uma vez que não há necessidade em conhecer a forma explícita da matriz densidade $\rho_{\text{ff}}(t)$ para o cálculo das magnetizações. Neste caso, no limite em que $t \rightarrow \infty$ o traço da matriz densidade $\rho_{\text{ff}}(t)$ é

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \text{Tr} [\rho_{\text{ff}}(t)] = 1, \quad (5.59)$$

como pode ser visto na Figura 11. Para $\rho_{\text{sf}}(t)$ a solução é da forma

$$\rho_{\text{sf}}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{H}_0 - i \frac{\Gamma}{2} \right) t \right] \rho_{\text{sf}}(0) = \mathbf{0}, \quad (5.60)$$

uma vez que o estado inicial é dado em termos de uma matriz nula e, desta forma, $\rho_{\text{sf}}(t)$ permanece nula no decorrer do tempo.

Pode-se verificar que o traço da matriz densidade ampliada é dado por

$$\text{Tr} [\varrho(t)] = \text{Tr} [\rho_{\text{ss}}(t)] + \text{Tr} [\rho_{\text{ff}}(t)] = 1, \quad (5.61)$$

ou seja, o traço é igual à unidade para qualquer instante de tempo t (Figura 11). Assim, esta formulação permite uma descrição do sistema com uma matriz densidade cujo traço é conservado, estando de acordo com a formulação da Mecânica Quântica padrão.

Como já comentado, a matriz densidade ρ_{ss} corresponde àquela matriz densidade encontrada na formulação de Dattoli, Torre e Mignani (30) para tempos positivos expressa em (5.36), ou seja, $\rho_{\text{ss}} \equiv \rho$. A matriz densidade ρ_{ff} no espaço de Hilbert adicional presente na formulação, a princípio é desprovida de significado físico, de modo que ρ_{ff} representa apenas um artifício matemático para construir uma formulação não-hermitiana na qual o traço da matriz densidade total é conservado.

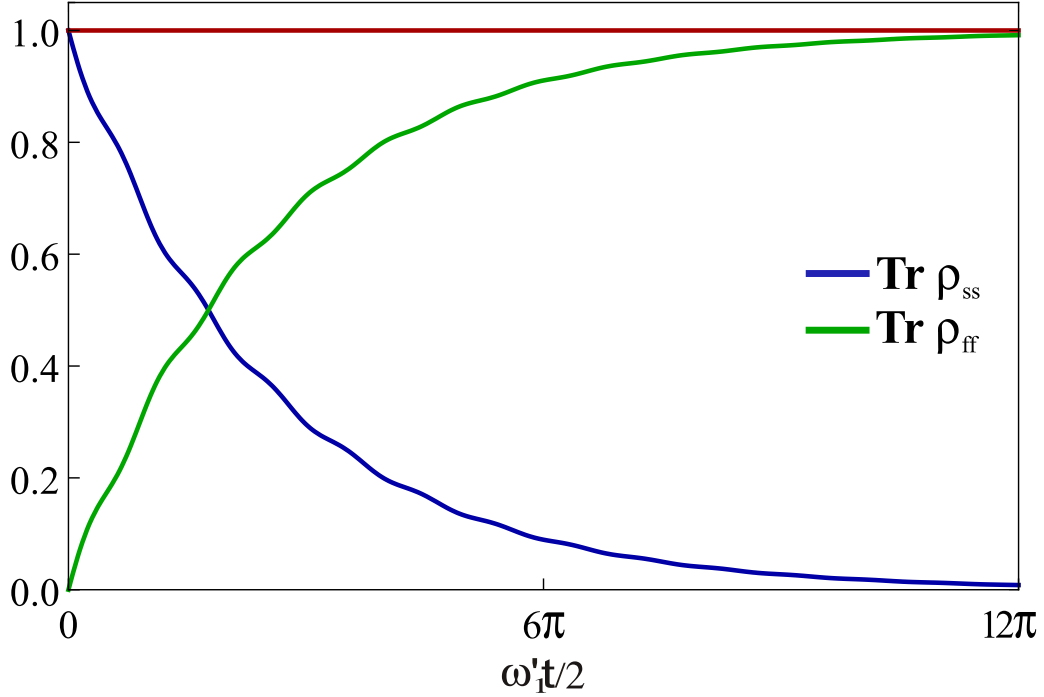
As componentes M_k da magnetização líquida normalizada M do sistema podem ser determinadas de acordo com

$$M_k(t) = \frac{\text{Tr}[\varrho(t) \Sigma_k]}{\text{Tr}[\varrho(t)]}, \quad (5.62)$$

em que Σ_k é definido como

$$\Sigma_k = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.63)$$

Figura 11 – Gráfico mostrando a conservação do traço da matriz densidade total ϱ (curva vermelha) no decorrer do tempo à medida que o traço da matriz densidade ρ_{ss} decai no tempo (curva azul) e o traço da matriz densidade ρ_{ff} aumenta (curva verde).



Fonte: O autor (2018).

em que σ_k é a matriz de Pauli relativa a coordenada k , com $k = x, y, z$, e $\mathbf{0}$ representa uma matriz nula 2×2 . Além disso, verifica-se que a relação (5.62) para as componentes da magnetização líquida é reduzida à seguinte relação (81)

$$M_k(t) = \text{Tr}[\rho_{ss}(t)\sigma_k], \quad (5.64)$$

uma vez que $\text{Tr}[\varrho(t)\Sigma_k] = \text{Tr}[\rho_{ss}(t)\sigma_k]$ e $\text{Tr}[\varrho(t)] = 1$. Desta forma, a magnetização líquida normalizada do sistema fica expressa pela relação

$$M(t) = \sqrt{M_x^2(t) + M_y^2(t) + M_z^2(t)}. \quad (5.65)$$

Portanto, as formas explícitas das componentes M_k da magnetização do sistema são dadas por

$$M_x(t) = 2S_\mu(C_\mu - \mu S_\mu) \sin(\phi) e^{-\lambda\omega'_1 t}, \quad (5.66)$$

$$M_y(t) = 2S_\mu(C_\mu - \mu S_\mu) \cos(\phi) e^{-\lambda\omega'_1 t}, \quad (5.67)$$

$$M_z(t) = [2C_\mu(C_\mu - \mu S_\mu) - 1] e^{-\lambda\omega'_1 t}, \quad (5.68)$$

e, com isso, a magnetização líquida normalizada toma a forma

$$M(t) = e^{-\lambda\omega'_1 t} [4(1 + \mu^2 S_\mu)(C_\mu - \mu S_\mu)^2 - 4C_\mu(C_\mu - \mu S_\mu) + 1]^{1/2}. \quad (5.69)$$

Verifica-se que o termo 1 presente no Hamiltoniano (5.32) gera o fator exponencial responsável pelo decaimento da magnetização, enquanto o termo σ_z introduz um pequeno atraso nas

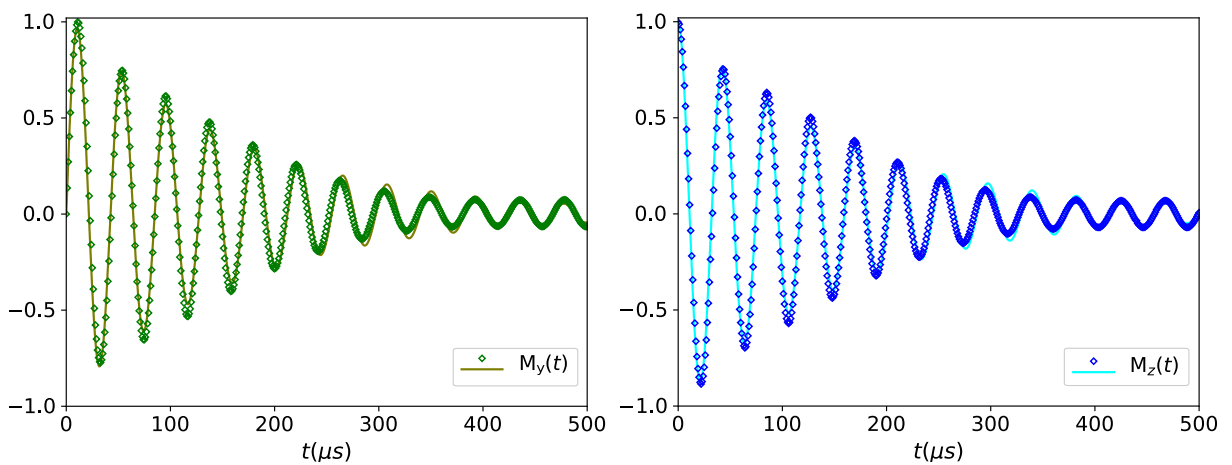
oscilações das magnetizações proporcional à $\sqrt{1 - \mu^2}$ (5.66–5.68). No limite para $\lambda, \mu \rightarrow 0$, as magnetizações usuais referentes a um único núcleo de *spin*-1/2 isolado é recuperado.

Destaca-se que o modelo teórico introduzido neste trabalho consiste em um sistema de dois níveis de partícula única que contém estados instáveis que decaem no tempo. Este modelo foi considerado no sentido de imitar a dinâmica coletiva incoerente de um sistema de *spin*-1/2 através do formalismo proposto por Bertlmann, Grimus e Hiesmayr (34) no estudo do decaimento de partículas através de Hamiltonianos não-hermitianos. Além disso, deve ficar claro que a matriz densidade utilizada no modelo teórico não corresponde à matriz densidade real tomografada, embora os mensuráveis (magnetizações) obtidos teoricamente concordem com os resultados do laboratório dentro do intervalo de tempo observado. Portanto, serão comparadas as magnetizações teóricas (5.66–5.68) obtidas através do modelo proposto com as magnetizações obtidas experimentalmente na seção anterior (Figura 9).

5.4 COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS TEÓRICOS E EXPERIMENTAIS

No sentido de tentar dar um significado físico para o formalismo teórico, faz-se a comparação dos resultados obtidos a partir do modelo fenomenológico com os dados experimentais. Para uma frequência angular $\omega'_1 = 2\pi(23566 \text{ Hz})$, correspondente a um erro de 7.4% em relação ao pico do espectro (Figura 10), foram encontrados os parâmetros adimensionais $\lambda = 41.77 \times 10^{-3}$ e $\mu = -34.43 \times 10^{-3}$ que melhor ajusta os resultados experimentais às curvas teóricas como mostra a Figura 12. Para encontrar esses valores foi elaborado um programa em Python utilizando a biblioteca `scipy.optimize`, com o qual pode ser encontrado pequenas variações da ordem de 10^{-5} dependendo da escolha dos valores iniciais para λ e μ .

Figura 12 – Dados experimentais (símbolos) e previsões teóricas (curva sólida) para as componentes M_y e M_z da magnetização líquida concordam quando os parâmetros adimensionais valem $\lambda = 41.77 \times 10^{-3}$ e $\mu = -34.43 \times 10^{-3}$.



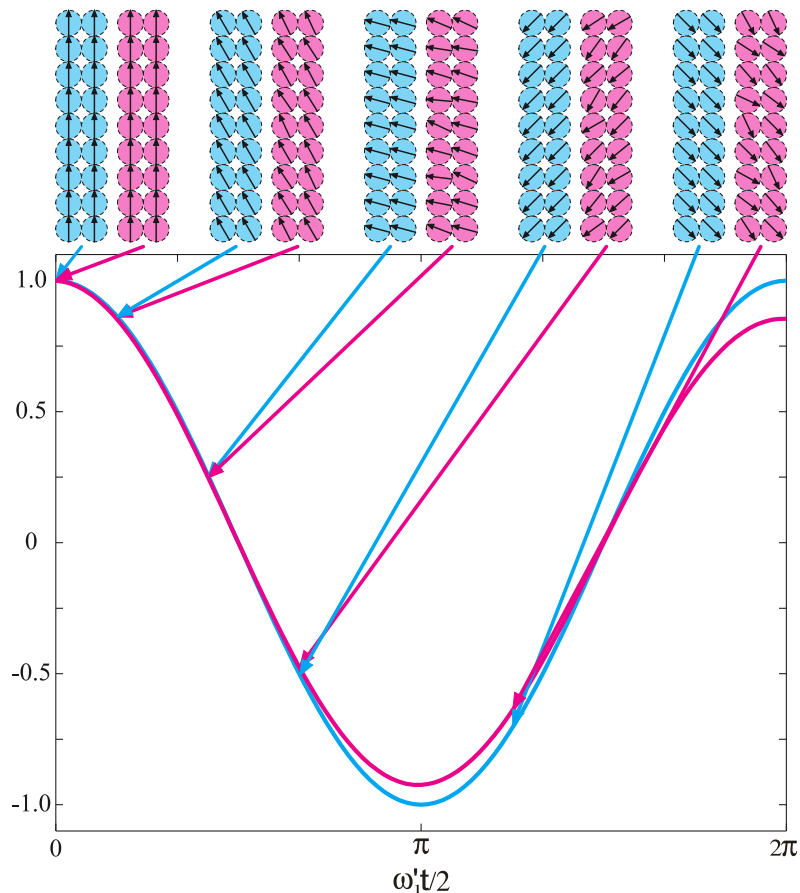
Fonte: O autor (2018).

A interpretação física acerca dos resultados apresentados é tal que a maioria dos núcleos da amostra encontram-se inicialmente no estado *spin up* e, à medida que o tempo avança, há

uma dessincronização no giro dos *spins*, de tal forma que, alguns giram mais rápido do que outros. Esta dinâmica incoerente é esquematizada na Figura 13 (cor magenta). A perda de coerência no sistema acontece devido às interações dos núcleos com o ambiente bem como com seus vizinhos devido a flutuações térmicas (Figura 8). Outro fator que acelera ainda mais a dessincronização dos *spins* é a inhomogeneidade do campo magnético transversal $\vec{B}_1$ gerado pela sonda do aparelho, de modo que nem todos os núcleos interagem com um campo de mesma intensidade $\omega_1 = \gamma B_1$, como pode ser visto no espectro de frequências (Figura 10). De fato, esta limitação experimental poderia ser contornada pela troca da sonda por outra que gere um campo magnético mais homogêneo e, neste caso, a coerência poderia ser mantida por mais tempo, de modo que o decaimento nas magnetizações seria muito pequeno.

Se a dinâmica do sistema fosse coerente, a evolução temporal seria dada em termos dos elementos do grupo $SU(2)$, uma vez que os *spins* girariam de forma sincronizada, de tal maneira que, poder-se-ia tratar o sistema de muitos *spins* como um sistema de partícula única, não havendo a necessidade de introduzir termos não-hermitianos no Hamiltoniano do sistema ($\lambda = \mu = 0$). Esta dinâmica está esquematizada na Figura 13 (cor azul).

Figura 13 – Esquema pictórico de dois tipos de *ensemble* de partículas de dois níveis. As esferas coloridas azuis (magenta) representam a dinâmica em fase (fora de fase) de um sistema de *spins* ideal (real) e as curvas sólidas representam a componente z da magnetização líquida.



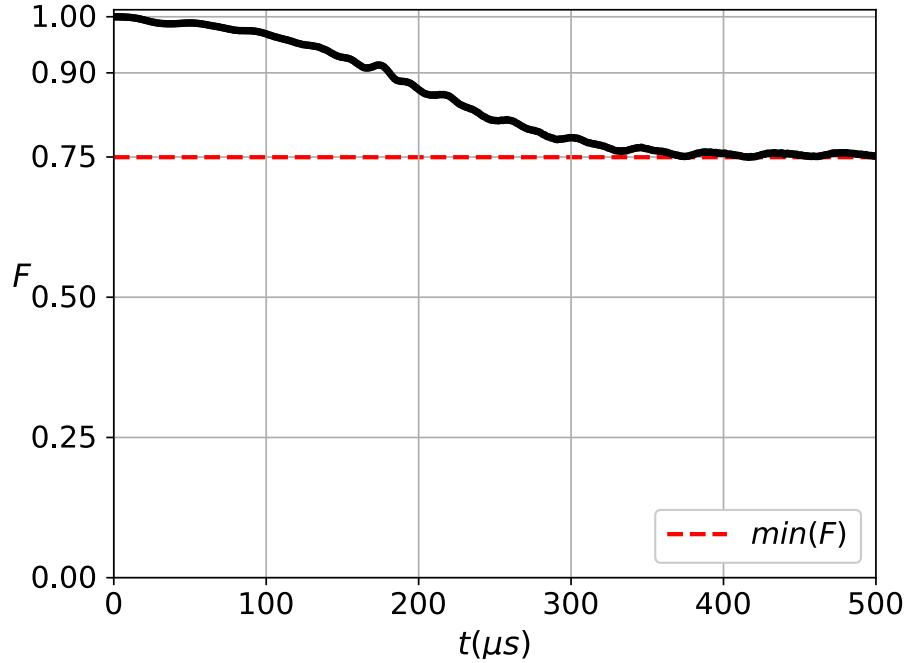
Fonte: O autor (2018).

Uma análise de erro entre as magnetizações teóricas e experimentais pode ser feita através do conceito de Fidelidade. A Fidelidade permite dizer o quão similar dois operadores são, de modo que, pode-se comparar as matrizes densidades teórica $\rho_{ss}(t_{r,k})$ e experimental $\rho_{exp}(t_{r,k})$ nos instantes de tempo medidos $t_{r,k}$. A definição do parâmetro de Fidelidade $F(t_{r,k})$ adotada nesta análise é tal que

$$F(t_{r,k}) = \frac{\text{Tr} [\rho_{exp}^\dagger(t_{r,k}) \rho_{ss}(t_{r,k})]}{\sqrt{\text{Tr} [\rho_{ss}^\dagger(t_{r,k}) \rho_{ss}(t_{r,k})] \text{Tr} [\rho_{exp}^\dagger(t_{r,k}) \rho_{exp}(t_{r,k})]}}. \quad (5.70)$$

Esta forma está discutida na referência (102). Com esta definição, observa-se que a fidelidade decai até o instante em que a magnetização do sistema estabiliza, a partir deste ponto a Fidelidade é mantida constante em $F = 75\%$. Particularmente, nos primeiros $181 \mu s$ a Fidelidade é maior que 90% de modo que as matrizes densidade teórica e experimental são bastante similares. Do instante de tempo $182 \mu s$ até o instante $359 \mu s$, o parâmetro de Fidelidade decai até atingir o valor de 75%. Deste instante em diante, a Fidelidade é mantida ligeiramente acima de 75%, como é mostrado na Figura 14.

Figura 14 – O gráfico apresenta a evolução do parâmetro de Fidelidade de acordo com a definição apresentada por Fortunato et al. (102), o qual mostra que o parâmetro de Fidelidade (pontos pretos) evolui acima dos 75% (linha tracejada vermelha).



Fonte: O autor (2018).

Portanto, os resultados apontam a formulação não-hermitiana como um atalho na descrição de sistemas quânticos da natureza quando comparados à outros formalismos padrões, ainda que os modelos não-hermitianos devam ser tratados de maneira heurística. As conclusões e propostas a respeito do trabalho são dadas nos capítulos seguintes.

6 CONCLUSÃO

Primeiramente, conclui-se que o estudo de grupos de simetria em Mecânica Quântica contribuiu significativamente para o entendimento e elaboração de modelos de sistemas quânticos discretos cujas dinâmicas podem ser descritas de forma exata. A compreensão a respeito de grupos permite definir uma conexão entre o Hamiltoniano e o operador de evolução temporal, de modo que, se o Hamiltoniano possui a forma de um elemento da álgebra de um grupo, então, o operador de evolução temporal tem sua forma geral definida por um elemento deste grupo. Isto define um sistema com simetria dinâmica.

Mencionou-se o método proposto por Messina e Nakazato (37) no qual os autores encontram uma forma de mapear Hamiltonianos dependentes do tempo para sistemas de dois níveis com simetria $SU(2)$, cuja dinâmica pode ser descrita de forma exata. Possíveis generalizações podem ser consideradas, incluindo outras simetrias, como por exemplo, a simetria $SL(2, \mathbb{C})$. Neste caso, são considerados Hamiltonianos não-hermitianos.

Recentemente, sistemas quânticos não-hermitianos estão sendo frequentemente considerados na literatura; embora Hamiltonianos não-hermitianos possam ser encontrados em abordagens fenomenológicas antigas, principalmente no estudo de decaimentos de partículas. Entretanto, abordagens como simetria $\mathcal{PT}$ e representação pseudo-hermitiana, permitem estender o conceito de hermiticidade para incluir observáveis não-hermitianos com autovalores reais na formulação da Mecânica Quântica. Hamiltonianos com autovalores complexos também permitem estabelecer modelos que descrevem efetivamente sistemas abertos.

O método proposto por Dattoli, Torre e Mignani (30) para descrever a evolução temporal de um sistema quântico não-hermitiano, apesar de contra-intuitivo devido às evoluções nos dois sentidos do tempo, permite considerar a evolução temporal para tempos positivos para descrever um sistema de decaimento de maneira efetiva. Entretanto, a não conservação do traço da matriz densidade que descreve o sistema, deixa essa formulação em um quadro obscuro em relação ao formalismo padrão da Mecânica Quântica.

Para manter uma formulação consistente com aquela do formalismo padrão, a não conservação da probabilidade exibida pelo método mencionado anteriormente, pode ser corrigida através de um formalismo híbrido, como o proposto por Bertlmann, Grimus e Hiesmayr (34), o qual permite por meio da ampliação do espaço de Hilbert estabelecer um subespaço para o qual a probabilidade migra. Além disso, ainda permanece em aberto o significado físico deste subespaço e, portanto, este resultado foi utilizado meramente como um artifício matemático para manter o traço da matriz densidade total conservado. Nota-se que o formalismo discutido em (34) foi utilizado para descrever o decaimento de partículas através de Hamiltonianos efetivos não-hermitianos, que é um fenômeno diferente do apresentado nesta dissertação. Entretanto, apesar da natureza distinta entre dos fenômenos físicos, o formalismo matemático apresentou resultados satisfatórios na descrição do sistema de $spin-1/2$.

O modelo fenomenológico analisado é dado em termos de um Hamiltoniano não-hermitiano associado à simetria dinâmica $\mathbb{R}_-\{+\} \otimes SL(2, \mathbb{C})$, em que o fator de dissipação é isomorfo ao semigrupo composto pelos números reais negativos sob operação de adição. Desta forma, um sistema não-hermitiano de uma única partícula de dois níveis pode ser descrito em termos de estados instáveis, os quais permitem simular a dinâmica incoerente do estado coletivo de um sistema de $spin-1/2$ de forma fenomenológica. Portanto, os resultados teóricos simulam de maneira efetiva o comportamento da magnetização líquida do conjunto de partículas com $spin-1/2$ na amostra contendo núcleos de ^{31}P . Em relação à matriz densidade de desvio obtida no processo de tomografia de estado quântico, ela difere da matriz densidade do modelo teórico, uma vez que trata-se de um modelo efetivo (um "atalho") que permite descrever os mensuráveis (magnetizações) relativos aos sistemas de $spin$.

Ainda é necessário uma análise mais detalhada da parte experimental para obtenção de um conjunto de parâmetros ótimos λ e μ , no sentido de especificar a contribuição e a relevância de cada termo não-hermitiano do Hamiltoniano do modelo. Utilizou-se uma frequência angular ω'_1 escolhida à mão, porém, que estava contida no espectro de frequências (Figura 10) e, a partir deste valor, os parâmetros λ e μ foram ajustados. Pode-se dizer que os resultados experimentais dão indícios da validade do modelo teórico.

Para finalizar, conclui-se que apesar dos Hamiltonianos não-hermitianos não estarem incluídos na formulação da Mecânica Quântica usual, alguns fenômenos da Natureza parecem de fato ser regidos por estruturas não-hermitianas e evoluções não-unitárias. Os resultados apresentados aqui contribuem para esta possível interpretação, embora seja necessário uma análise mais profunda e rigorosa para tal afirmação.

7 PERSPECTIVAS FUTURAS

- Analisar de forma mais sistemática o experimento no sentido de obter os valores adequados para os pares de parâmetros (λ, μ) e interpretá-los fisicamente;
- Dar uma interpretação adequada às matrizes densidades dos estados instáveis do sistema e dos produtos do decaimento desses estados;
- Comparar os resultados obtidos a partir do modelo deste trabalho com os resultados obtidos através de abordagens padrões, como por exemplo, equação mestra e operadores soma, no sentido de verificar regimes em que a abordagem de Hamiltonianos efetivos não-hermitianos são válidos;
- Analisar de forma mais detalhada grupos de simetria compactos e não-compactos, no sentido de possíveis extensões do método de Messina e Nakazato (37) incluindo Hamiltonianos não-hermitianos dependentes do tempo;
- Verificar uma possível aplicação do método apresentado na referência (68) considerando sistemas com simetrias dinâmicas;
- Estender esse estudo para um sistema não-hermitiano de dois *qubits* acoplados, no sentido de verificar como os termos não-hermitianos afetam as magnetizações do sistema composto. Além disso, considerar sistemas com *spin* maior que $1/2$, como por exemplo, sistemas quadrupolares;
- Aplicar o formalismo não-hermitiano em outros tipos de sistemas, por exemplo, em Óptica Quântica.

REFERÊNCIAS

- 1 SCHULZ, P. A. Duas nuvens ainda fazem sombra na reputação de Lorde Kelvin. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, Scielo, v. 29, p. 509 – 512, 00 2007.
- 2 SHANKLAND, R. S. Michelson-Morley Experiment. *American Journal of Physics*, v. 32, n. 1, p. 16–35, 1964.
- 3 SERWAY, R. A.; MOSES, C. J.; MOYER, C. A. *Modern Physics*. 3. ed. United States of America: Cengage Learning, 2004.
- 4 NUSSENZVEIG, H. M. *Curso de Física Básica: Ótica, Relatividade, Física Quântica*. 1. ed. São Paulo: Editora Blucher, 1998. v. 4.
- 5 PRUGOVECKI, E. *Quantum Mechanics in Hilbert Space*. [S.l.]: Academic Press, 1982. v. 92.
- 6 GROSS, D. J. The Role of Symmetry in Fundamental Physics. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, NAS, v. 93, n. 25, p. 14256–14259, 1996.
- 7 ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Física Matemática: Métodos Matemáticos para Engenharia e Física*. Tradução de Arlete Simille Marques. 1. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007. Título original: *Mathematical Methods for Physicists*. Sixth Edition.
- 8 BASSALO, J. M. F.; CATTANI, M. S. D. *Teoria de Grupos*. 2. ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2008.
- 9 MAJORANA, E. Atomi Orientati in Campo Magnetico Variabile. *Il Nuovo Cimento (1924-1942)*, v. 9, n. 2, p. 43–50, 1932.
- 10 RABI, I. I. Space Quantization in a Gyrrating Magnetic Field. *Physical Review*, APS, v. 51, p. 652–654, Apr 1937.
- 11 BLOCH, F.; RABI, I. I. Atoms in Variable Magnetic Fields. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 17, p. 237–244, Apr 1945.
- 12 RAMSEY, N. *Molecular Beams*. Oxford: Clarendon Press, 1956. v. 20.
- 13 DIRAC, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. [S.l.]: Oxford university press, 1981.
- 14 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real Spectra in non-Hermitian Hamiltonians having PT-symmetry. *Physical Review Letters*, APS, v. 80, n. 24, p. 5243, 1998.
- 15 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S.; MEISINGER, P. N. PT-Symmetric Quantum Mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, AIP, v. 40, n. 5, p. 2201–2229, 1999.
- 16 BENDER, C. M.; BRODY, D. C.; JONES, H. F. Complex Extension of Quantum Mechanics. *Physical Review Letters*, APS, v. 89, n. 27, p. 270401, 2002.
- 17 BENDER, C. M. Introduction to PT-symmetric Quantum Theory. *Contemporary Physics*, v. 46, n. 4, p. 277–292, 2005.

- 18 MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-Hermitian Representation of Quantum Mechanics. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, World Scientific, v. 7, n. 07, p. 1191–1306, 2010.
- 19 CROKE, S. PT-symmetric Hamiltonians and their application in quantum information. *Physical Review A*, APS, v. 91, n. 5, p. 052113, 2015.
- 20 FRING, A.; MOUSSA, M. H. Y. Unitary quantum evolution for time-dependent quasi-Hermitian systems with nonobservable Hamiltonians. *Physical Review A*, APS, v. 93, p. 042114, Apr 2016.
- 21 MOISEYEV, N. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- 22 JOHN, W. et al. Statistical properties of resonances in quantum irregular scattering. *Physical Review Letters*, APS, v. 67, p. 1949 – 1952, 1991.
- 23 MOISEYEV, N. Quantum theory of resonances: calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling. *Physics Reports*, v. 302, n. 5–6, p. 212 – 293, 1998.
- 24 BERGGREN, K.-F.; YAKIMENKO, I. I.; HAKANEN, J. Modeling of open quantum dots and wave billiards using imaginary potentials for the source and the sink. *New Journal of Physics*, v. 12, n. 7, p. 073005, 2010.
- 25 WIBKING, B.; VARGA, K. Quantum mechanics with complex injecting potentials. *Physics Letters A*, v. 376, n. 4, p. 365 – 369, 2012.
- 26 SUDARSHAN, E. C. G.; CHIU, C. B.; GORINI, V. Decaying states as complex energy eigenvectors in generalized quantum mechanics. *Physical Review D*, APS, v. 18, p. 2914–2929, Oct 1978.
- 27 BAKER, H. C. Non-Hermitian Dynamics of Multiphoton Ionization. *Physical Review Letters*, APS, v. 50, p. 1579–1582, May 1983.
- 28 BAKER, H. C. Non-Hermitian quantum theory of multiphoton ionization. *Physical Review A*, APS, v. 30, p. 773–793, Aug 1984.
- 29 RÜTER, C. E. et al. Observation of parity-time symmetry in optics. *Nature physics*, NPG, v. 6, n. 3, p. 192–195, 2010.
- 30 DATTOLI, G.; TORRE, A.; MIGNANI, R. Non-Hermitian evolution of two-level quantum systems. *Physical Review A*, APS, v. 42, p. 1467–1475, Aug 1990.
- 31 EXNER, P. *Open Quantum Systems and Feynman Integrals*. Netherlands: Dordrecht, 1985.
- 32 BRODY, D. C. Biorthogonal Quantum Mechanics. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 47, n. 3, p. 035305, 2014.
- 33 GRAEFE, E.-M.; HÖNING, M.; KORSCH, H. J. Classical limit of non-Hermitian quantum dynamics—a generalized canonical structure. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 43, n. 7, p. 075306, 2010.
- 34 BERTLMANN, R. A.; GRIMUS, W.; HIESMAYR, B. C. Open-quantum-system formulation of particle decay. *Physical Review A*, APS, v. 73, n. 5, p. 054101, 2006.

- 35 SCOLARICI, G.; SOLOMBRINO, L. Time evolution of non-Hermitian quantum systems and generalized master equations. *Czechoslovak Journal of Physics*, Springer, v. 56, n. 9, p. 935–941, 2006.
- 36 HIOE, F. T. N-level Quantum Systems with SU(2) Dynamic Symmetry. *Journal of the Optical Society of America. B*, OSA, v. 4, n. 8, p. 1327–1332, Aug 1987.
- 37 MESSINA, A.; NAKAZATO, H. Analytically solvable Hamiltonians for quantum two-level systems and their dynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 47, n. 44, p. 445302, 2014.
- 38 ELLINAS, D. SL(2,C) multilevel dynamics. *Physical Review A*, APS, v. 45, p. 1822–1828, Feb 1992.
- 39 MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-Hermiticity versus PT-Symmetry: The Necessary Condition for the Reality of the Spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian. *Journal of Mathematical Physics*, v. 43, n. 1, p. 205–214, 2002.
- 40 SERGI, A.; ZLOSHCHASTIEVE, K. G. Non-Hermitian Quantum Dynamics of a Two-level System and Models of Dissipative Environments. *International Journal of Modern Physics B*, v. 27, n. 27, p. 1350163, 2013.
- 41 BREUER, H.-P.; PETRUCCIONE, F. *The Theory of Open Quantum Systems*. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2002.
- 42 SATTINGER, D. H.; WEAVER, O. L. *Lie Groups and Algebras with Applications to Physics, Geometry, and Mechanics*. New York: Springer Science & Business Media, 2013. v. 61.
- 43 SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J. *Mecânica Quântica Moderna*. Tradução de: Sílvia Renato Dahmen. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2013. Título original: Modern Quantum Mechanics.
- 44 HAMERMESH, M. *Group Theory and its Application to Physical Problems*. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company Inc., 1962.
- 45 SZEKERES, P. *A Course in Modern Mathematical Physics: Groups, Hilbert Space and Differential Geometry*. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- 46 KOSMANN-SCHWARZBACH, Y. *Groups and Symmetries: From Finite Groups to Lie Groups*. 1. ed. New York: Springer-Verlag, 2009.
- 47 KURZWEIL, H.; STELLMACHER, B. *The Theory of Finite Groups: an Introduction*. 1. ed. New York: Springer Science & Business Media, 2006.
- 48 TUNG, W.-K. *Group Theory in Physics: an Introduction to Symmetry Principles, Group Representations, and Special Functions in Classical and Quantum Physics*. 1. ed. Singapore: World Scientific, 1985.
- 49 ATKINS, P. W.; FRIEDMAN, R. S. *Molecular Quantum Mechanics*. 5. ed. United States of America: Oxford University Press, 2011.
- 50 NOWICK, A. S. *Crystal Properties via Group Theory*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.

- 51 DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; JORIO, A. *Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter*. Berlin: Springer, 2007.
- 52 THORNTON, S. T.; MARION, J. B. *Dinâmica Clássica de Partículas e Sistemas*. Tradução de All Tasks. São Paulo: Cengage Learning, 2011. Título original: Classical dynamics of particles and systems.
- 53 JONES, H. F. *Groups, Representations and Physics*. 2. ed. [S.l.]: CRC Press, 1998.
- 54 CORNWELL, J. F. *Group Theory in Physics: An Introduction*. [S.l.]: Academic Press, 1997. v. 1.
- 55 MANTON, N. S. *Symmetries, Fields and Particles: Notes*. Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, University of Cambridge, Cambridge: [s.n.], 2014. 68 p. Disponível em: <<http://www.damtp.cam.ac.uk/user/examples/indexP3.html>>. Acesso em: 10 de Julho de 2017.
- 56 BARATA, J. C. A. *Notas para um Curso de Física-Matemática*. Departamento de Física-Matemática, Universidade de São Paulo, São Paulo: [s.n.], 2017. 29 p. Disponível em: <<http://denbola.if.usp.br>>. Acesso em: 10 de Setembro de 2017.
- 57 BOLDRINI, J. L. et al. *Álgebra Linear*. 3. ed. São Paulo: Harper & Row, 1986.
- 58 BAN, M. Decomposition formulas for $su(1, 1)$ and $su(2)$ Lie algebras and their applications in quantum optics. *Journal of the Optical Society of America. B, OSA*, v. 10, n. 8, p. 1347–1359, Aug 1993.
- 59 PIZA, A. F. R. T. *Mecânica Quântica*. 2. ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2009.
- 60 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics*. New York: John Wiley & Sons, 1977. v. 1.
- 61 HASSANI, S. *Mathematical Methods: for Students of Physics and Related Fields*. 2. ed. Illinois: Springer Science & Business Media, 2009.
- 62 LIBOFF, R. L. *Introductory Quantum Mechanics*. 4. ed. Delhi: Addison-Wesley, 2003.
- 63 GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. 2. ed. [S.l.]: Pearson Education Professional, 2005.
- 64 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge: Cambridge University Press India, 2000.
- 65 BLUM, K. *Density Matrix Theory and Applications*. 3. ed. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 64.
- 66 PURI, R. R. *Mathematical Methods of Quantum Optics*. 1. ed. Berlin: Springer Science & Business Media, 2001. v. 79.
- 67 VANDERSYPEN, L. M.; CHUANG, I. L. NMR techniques for quantum control and computation. *Reviews of Modern Physics, APS*, v. 76, n. 4, p. 1037, 2004.
- 68 FRING, A.; FRITH, T. Exact analytical solutions for time-dependent Hermitian Hamiltonian systems from static unobservable non-Hermitian Hamiltonians. *Physical Review A, APS*, v. 95, p. 010102, Jan 2017.

- 69 HIOE, F. T. N-level quantum systems with Gell-Mann dynamic symmetry. *Journal of the Optical Society of America. B, OSA*, v. 5, n. 4, p. 859–862, Apr 1988.
- 70 GIRARDELLI, D.; ZAVANIN, E. M.; GUZZO, M. M. Equivalence between quantum mechanics and PT-symmetric quantum mechanics. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 37, n. 1, p. 1304, 2015.
- 71 MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-Hermiticity versus PT-Symmetry II. A complete characterization of non-Hermitian Hamiltonians with a real spectrum. *Journal of Mathematical Physics*, v. 43, n. 5, p. 2814–2816, 2002.
- 72 MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-Hermiticity versus PT-Symmetry III: Equivalence of pseudo-Hermiticity and the presence of antilinear symmetries. *Journal of Mathematical Physics*, v. 43, n. 8, p. 3944–3951, 2002.
- 73 BEN-ARYEH, Y.; MANN, A.; YAAKOV, I. Rabi oscillations in a two-level atomic system with a pseudo-Hermitian Hamiltonian. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 37, n. 50, p. 12059, 2004.
- 74 MOSTAFAZADEH, A. Krein-space formulation of PT- symmetry, CPT-inner products, and pseudo-Hermiticity. *Czechoslovak Journal of Physics*, v. 56, n. 9, p. 919–933, 2006.
- 75 BAGARELLO, F.; PASSANTE, R.; TRAPANI, C. Non-Hermitian Hamiltonians in quantum physics. In: SPRINGER. *Selected Contributions from the 15th International Conference on Non-Hermitian Hamiltonians in Quantum Physics, Palermo, Italy*. [S.l.], 2015.
- 76 GAO, T. et al. Observation of non-Hermitian degeneracies in a chaotic exciton-polariton billiard. *Nature Physics*, v. 526, p. 554–558, 2015.
- 77 STERNHEIM, M. M.; WALKER, J. F. Non-Hermitian Hamiltonians, Decaying States, and Perturbation Theory. *Physical Review C, APS*, v. 6, p. 114–121, 1972.
- 78 MIZRAHI, S. S.; DODONOV, V. V.; OTERO, D. Nonlinear Schrödinger-Liouville Equation with Antihermitian Terms. *Physica Scripta*, v. 57, n. 1, p. 24, 1998.
- 79 BRODY, D. C.; GRAEFE, E.-M. Mixed-State Evolution in the Presence of Gain and Loss. *Physical Review Letters, APS*, v. 109, p. 230405, Dec 2012.
- 80 JIN, L.; SONG, Z. A physical interpretation for the non-Hermitian Hamiltonian. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 44, n. 37, p. 375304, 2011.
- 81 OLIVEIRA, I. S. et al. *NMR Quantum Information Processing*. Amsterdam: Elsevier, 2007.
- 82 ZHAO, P. et al. Dynamics of open quantum spin systems: An assessment of the quantum master equation approach. *Physical Review E, APS*, v. 94, p. 022126, 2016.
- 83 SLICHTER, C. P. *Principles of Magnetic Resonance*. 3. ed. Berlin: Springer, 1990.
- 84 BALDOCK, J. A. et al. Aspects of the chemical structure of soil organic materials as revealed by solid-state¹³C NMR spectroscopy. *Biogeochemistry*, v. 16, n. 1, p. 1–42, 1992.
- 85 BOTTOMLEY, P. A. Human in vivo NMR spectroscopy in diagnostic medicine: clinical tool or research probe? *Radiology*, v. 170, n. 1, p. 1–15, 1989.

- 86 JONES, J. A. NMR quantum computation. *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, Pergamon, v. 38, n. 4, p. 325–360, 2001.
- 87 CALLAGHAN, P. T. *Principles of Nuclear Magnetic Resonance Microscopy*. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 1993.
- 88 JONES, G. P. Spin-Lattice Relaxation in the Rotating Frame: Weak-Collision Case. *Physical Review*, APS, v. 148, p. 332–335, Aug 1966.
- 89 JACQUINOT, J. F.; GOLDMAN, M. Nuclear Spin-Lattice Relaxation in the Rotating Frame. *Physical Review B*, APS, v. 8, p. 1944–1957, Sep 1973.
- 90 PALKE, W. E.; GERIG, J. T. Relaxation in the presence of an RF field. *Concepts in Magnetic Resonance*, John Wiley & Sons, Inc., v. 9, n. 5, p. 347–353.
- 91 SMITH, S. A.; PALKE, W. E.; GERIG, J. Theoretical treatment of relaxation in the presence of an RF field. *Journal of Magnetic Resonance (1969)*, v. 100, n. 1, p. 18 – 24, 1992.
- 92 REDFIELD, A. G. *Relaxation Theory: Density Matrix Formulation*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2007.
- 93 VILLAMIZAR, D. V. et al. Estimating the time evolution of nmr systems via quantum speed limit. *arXiv:1705.06137v1 [quant-ph]*, p. 1–12, 2017.
- 94 JEFFRIES, C. D. Dynamic Orientation of Nuclei. *Annual Review of Nuclear Science*, v. 14, n. 1, p. 101–134, 1964.
- 95 GÜNTHER, U. L. *Dynamic Nuclear Hyperpolarization in Liquids*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013. 23-69 p.
- 96 LEE, J.-S. The quantum state tomography on an NMR system. *Physics Letters A*, v. 305, n. 6, p. 349 – 353, 2002.
- 97 BULNES, J. D. et al. Quantum information processing through nuclear magnetic resonance. *Brazilian Journal of Physics*, Scielo, v. 35, p. 617 – 625, 09 2005.
- 98 TELES, J. et al. Quantum state tomography for quadrupolar nuclei using global rotations of the spin system. *The Journal of Chemical Physics*, v. 126, n. 15, p. 154506, 2007.
- 99 CHILDS, A. M.; CHUANG, I. L.; LEUNG, D. W. Realization of quantum process tomography in NMR. *Physical Review A*, APS, v. 64, p. 012314, Jun 2001.
- 100 NICHOLAS, M. P. et al. Nuclear spin relaxation in isotropic and anisotropic media. *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, v. 57, n. 2, p. 111 – 158, 2010.
- 101 BHATTACHARYA, S. et al. Exact master equation for a spin interacting with a spin bath: Non-markovianity and negative entropy production rate. *Physical Review A*, v. 95, p. 012122, 2017.
- 102 FORTUNATO, E. M. et al. Design of strongly modulating pulses to implement precise effective Hamiltonians for quantum information processing. *The Journal of Chemical Physics*, v. 116, n. 17, p. 7599–7606, 2002.

APÊNDICE A – OPERADOR DENSIDADE E ESFERA DE BLOCH

Seja um conjunto de N sistemas quânticos idênticos representados cada um pelo seu estado $|\psi^{(\mu)}\rangle$, o que significa que cada elemento do *ensemble* é descrito por um único vetor de estado. Cada vetor de estado desses elementos pode ser escrito como uma combinação linear de vetores $|\phi_n\rangle$ que formam uma base ortonormal completa e, portanto, satisfazem a Equação 3.12 e a Equação 3.23. Assim, cada estado associado ao elemento μ do *ensemble* pode ser expresso conforme

$$|\psi^{(\mu)}\rangle = \sum_n c_n^{(\mu)} |\phi_n\rangle, \quad c_n^{(\mu)} = \langle \phi_n | \psi^{(\mu)} \rangle. \quad (\text{A.1})$$

Além disso, se o estado do elemento μ é normalizado, tem-se que $\sum_n |c_n^{(\mu)}|^2 = 1$.

Considerando-se um observável $\mathcal{O}$, obtém-se que o seu valor esperado no elemento μ é dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\mu = \langle \psi^{(\mu)} | \mathcal{O} | \psi^{(\mu)} \rangle, \quad (\text{A.2})$$

$$= \sum_{i,j} c_j^{(\mu)*} c_i^{(\mu)} \langle \phi_j | \mathcal{O} | \phi_i \rangle, \quad (\text{A.3})$$

$$= \sum_{i,j} \langle \phi_i | \psi^{(\mu)} \rangle \langle \psi^{(\mu)} | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \mathcal{O} | \phi_i \rangle. \quad (\text{A.4})$$

Define-se agora o operador

$$\rho^{(\mu)} = |\psi^{(\mu)}\rangle \langle \psi^{(\mu)}| \quad (\text{A.5})$$

que representa o operador densidade associado ao elemento puro μ . Portanto, em termos do operador densidade, o valor médio do observável fica sendo dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\mu = \sum_{i,j} \langle \phi_i | \rho^{(\mu)} | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \mathcal{O} | \phi_i \rangle, \quad (\text{A.6})$$

$$= \sum_i \langle \phi_i | \rho^{(\mu)} \mathcal{O} | \phi_i \rangle, \quad (\text{A.7})$$

$$= \text{Tr}[\rho^{(\mu)} \mathcal{O}]. \quad (\text{A.8})$$

O valor esperado do observável no sistema todo é dado pela média estatística sobre cada um dos subsistemas que compõem o *ensemble* e, portanto, fica dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_\mu p_\mu \langle \mathcal{O} \rangle_\mu, \quad p_\mu \in [0, 1], \quad (\text{A.9})$$

em que p_μ corresponde à probabilidade de se encontrar no *ensemble* um estado quântico caracterizado por $|\psi^{(\mu)}\rangle$. Pela normalização da probabilidade, tem-se que

$$\sum_\mu p_\mu = 1. \quad (\text{A.10})$$

Além disso, o valor esperado do observável pode ser reescrito na forma

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \mathcal{O} \rangle_{\mu}, \quad (\text{A.11})$$

$$= \text{Tr} \left[\sum_{\mu} p_{\mu} \boldsymbol{\rho}^{(\mu)} \mathcal{O} \right], \quad (\text{A.12})$$

em que define-se o operador

$$\boldsymbol{\rho} = \sum_{\mu} p_{\mu} \boldsymbol{\rho}^{(\mu)} = \sum_{\mu} p_{\mu} |\psi^{(\mu)}\rangle \langle \psi^{(\mu)}|, \quad (\text{A.13})$$

que representa o operador densidade característico de todo o sistema. Portanto, o valor esperado do observável $\mathcal{O}$ fica dado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}[\boldsymbol{\rho} \mathcal{O}]. \quad (\text{A.14})$$

Assim, o sistema quântico como um todo pode ser descrito por meio do operador densidade, o qual fornece uma descrição completa do *ensemble*. O operador densidade incorpora toda a informação fisicamente relevante que se pode obter a respeito do *ensemble* em questão (43).

A dinâmica de um sistema, no contexto do operador densidade, pode ser obtida da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} \boldsymbol{\rho}(t) = \sum_{\mu} p_{\mu} \frac{d}{dt} \left[|\psi^{(\mu)}(t)\rangle \langle \psi^{(\mu)}(t)| \right]. \quad (\text{A.15})$$

Pode-se assumir que cada estado puro $|\psi^{(\mu)}(t)\rangle$ evolui de acordo com a equação de Schrödinger, conforme

$$\frac{d}{dt} |\psi^{(\mu)}(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}(t) |\psi^{(\mu)}(t)\rangle, \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{d}{dt} \langle \psi^{(\mu)}(t)| = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi^{(\mu)}(t)| \mathbf{H}(t). \quad (\text{A.17})$$

Desta forma, multiplicando-se a Equação A.16 pela direita por $\langle \psi^{(\mu)}(t)|$, também multiplicando-se a Equação A.17 pela esquerda por $|\psi^{(\mu)}(t)\rangle$ e somando-se as duas, obtém-se

$$\frac{d}{dt} \left[|\psi^{(\mu)}(t)\rangle \langle \psi^{(\mu)}(t)| \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[\mathbf{H}(t) |\psi^{(\mu)}(t)\rangle \langle \psi^{(\mu)}(t)| - |\psi^{(\mu)}(t)\rangle \langle \psi^{(\mu)}(t)| \mathbf{H}(t) \right]. \quad (\text{A.18})$$

Este resultado permite que o lado direito da Equação A.15 seja reescrito pela substituição da (A.18) em (A.15) conforme

$$\frac{d}{dt} \boldsymbol{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{H}(t), \boldsymbol{\rho}(t)], \quad (\text{A.19})$$

que é a equação de Liouville-von Neumann para o operador densidade.

Além disso, a evolução temporal da matriz densidade também pode ser obtida utilizando-se o operador de evolução temporal $\mathbf{U}(t)$, pois de acordo com (3.26) as evoluções temporais do estado puro e de seu dual são expressas da seguinte forma

$$|\psi^{(\mu)}(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\psi^{(\mu)}(t_0)\rangle, \quad \langle \psi^{(\mu)}(t)| = \langle \psi^{(\mu)}(t_0)| \mathbf{U}^{\dagger}(t, t_0), \quad (\text{A.20})$$

de modo que o operador densidade $\rho(t)$ pode ser escrito como

$$\rho(t) = \sum_{\mu} p_{\mu} |\psi^{(\mu)}(t)\rangle \langle \psi^{(\mu)}(t)| = \mathbf{U}(t, t_0) \sum_{\mu} p_{\mu} |\psi^{(\mu)}(t_0)\rangle \langle \psi^{(\mu)}(t_0)| \mathbf{U}^{\dagger}(t, t_0), \quad (\text{A.21})$$

onde o termo $\sum_{\mu} p_{\mu} |\psi^{(\mu)}(t_0)\rangle \langle \psi^{(\mu)}(t_0)| = \rho(t_0)$ e, portanto, a evolução da matriz densidade fica dada conforme

$$\rho(t) = \mathbf{U}(t, t_0) \rho(t_0) \mathbf{U}^{\dagger}(t, t_0). \quad (\text{A.22})$$

Esta expressão vale tanto para estado puro quanto para estado misto (65).

A partir do conceito de operador densidade, é possível representar a dinâmica de *spin* por meio da Esfera de Bloch, no sentido de obter uma visualização tridimensional da dinâmica (64). Sem detalhes matemáticos, neste apêndice é fornecido o algoritmo para representação tridimensional do estado de uma partícula de *spin*-1/2.

É possível escrever o operador densidade ρ na base $\{\mathbf{1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ conforme

$$\rho = x'_0 \mathbf{1} + \sum_{j=1}^3 x'_j \sigma_j, \quad (\text{A.23})$$

onde σ_j é a matriz de Pauli relativa a coordenada x'_j . Utilizando as propriedades das matrizes de Pauli e a operação de traço, é possível determinar cada um coeficiente x_j . Para isso, multiplica-se ambos os lados da expressão para o operador densidade por σ_k e toma-se o traço, de modo que

$$\text{Tr} [\rho \sigma_k] = x'_0 \text{Tr} [\sigma_k] + \sum_{j=1}^3 x'_j \text{Tr} [\sigma_j \sigma_k], \quad (\text{A.24})$$

uma vez que as matrizes de Pauli possuem traço nulo e também a propriedade $\text{Tr} [\sigma_j \sigma_k] = 2\delta_{jk}$, tem-se que

$$x'_j = \frac{\text{Tr} [\rho \sigma_j]}{2}, \quad (\text{A.25})$$

para $j = 1, 2, 3$. O coeficiente x'_0 pode ser obtido tomando o traço de $\hat{\rho}$ e exigindo que este seja igual a 1. Neste caso, obtém-se que $x'_0 = 1/2$.

Portanto, reescrevê-se a matriz densidade conforme

$$\rho = \frac{1}{2} \left[\mathbf{1} + \sum_{j=1}^3 x_j \sigma_j \right], \quad (\text{A.26})$$

ou de forma compacta

$$\rho = \frac{1}{2} [\mathbf{1} + \vec{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}], \quad (\text{A.27})$$

com $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$ e $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$, onde $x_j = 2x'_j = \text{Tr} [\rho \sigma_j]$. O vetor unitário tridimensional $\vec{r}$ é chamado de vetor de Bloch, e suas componentes expressam os valores médios do momento angular intrínseco nas três direções.

Um exemplo é considerar o estado de um sistema de dois níveis mais geral possível

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + \exp(-i\phi) \sin \frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle, \quad (\text{A.28})$$

de modo que o operador densidade fica expresso por

$$\begin{aligned}\rho &= |\psi\rangle\langle\psi| \\ &= \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) + \frac{\sin\theta\cos\phi}{2} (|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|) + \\ &\quad + \frac{\sin\theta\sin\phi}{2} (-i|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + i|\downarrow\rangle\langle\uparrow|) + \frac{\cos\theta}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|),\end{aligned}\quad (\text{A.29})$$

que pode ser reescrito como

$$\rho = \frac{1}{2} [\mathbf{1} + \sin\theta\cos\phi\sigma_1 + \sin\theta\sin\phi\sigma_2 + \cos\theta\sigma_3], \quad (\text{A.30})$$

onde identifica-se as seguintes quantidades

$$\sigma_1 = |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|, \quad (\text{A.31})$$

$$\sigma_2 = -i|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + i|\downarrow\rangle\langle\uparrow|, \quad (\text{A.32})$$

$$\sigma_3 = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|. \quad (\text{A.33})$$

Portanto, o vetor de Bloch associado ao estado $|\psi\rangle$ fica expresso como

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + \exp(-i\phi)\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle \iff \vec{r} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta), \quad (\text{A.34})$$

que é um vetor unitário tridimensional escrito em termos das coordenadas esféricas (θ, ϕ) . Alguns casos particulares podem ser verificados:

- $\theta = 0$

$$|\psi\rangle = |\uparrow\rangle \iff \vec{r} = (0, 0, 1), \quad (\text{A.35})$$

- $\theta = \pi$

$$|\psi\rangle = |\downarrow\rangle \iff \vec{r} = (0, 0, -1), \quad (\text{A.36})$$

- $\theta = \pi/2$ e $\phi = 0$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \iff \vec{r} = (1, 0, 0), \quad (\text{A.37})$$

- $\theta = \pi/2$ e $\phi = \pi$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \iff \vec{r} = (-1, 0, 0), \quad (\text{A.38})$$

- $\theta = \pi/2$ e $\phi = \pi/2$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle) \iff \vec{r} = (0, 1, 0). \quad (\text{A.39})$$

- $\theta = \pi/2$ e $\phi = 3\pi/2$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle) \iff \vec{r} = (0, -1, 0). \quad (\text{A.40})$$