

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE FÍSICA

Dinâmica Quântica do Modelo de Heisenberg

Bruno Heitor de Carvalho Barros

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado para a
obtenção do grau de Bacharel no Curso de Física

Orientadora: Angela Foerster

Coorientador: Rafael Barfknecht

Porto Alegre - RS

Junho de 2019

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todos no grupo de pesquisa em Física Matemática, liderado pela Prof^a Dra. Angela Foerster, aos colegas de faculdade, aos professores da UFRGS e da Universidade de Århus por todo o apoio e pelo fornecimento de todas as ferramentas que tornaram a realização desse trabalho possível.

Agradeço também à minha família e amigos por me acompanharem durante essa etapa muito importante e durante todo o decorrer de minha vida acadêmica em especial à minha namorada por ela sempre ter se mostrado sempre presente e paciente e ter se tornado umas das pessoas que mais estimo.

Finalmente agradeço profundamente à minha mãe pois, apesar de sua partida um ano após meu ingresso na faculdade, eu não teria sido nem a metade da pessoa que sou hoje sem sua presença em minha vida e seu amor.

Resumo

Neste trabalho a dinâmica de cadeias de *spin* unidimensionais descritas pelo modelo de Heisenberg é estudada para diferentes situações físicas. Na primeira parte, o Hamiltoniano de Heisenberg homogêneo e isotrópico é analisado do ponto de vista da magnetização e fidelidade do sistema em configurações de 2, 3 e 9 partículas. Este estudo preliminar serve de base para a exposição dos procedimentos de diagonalização exata usados na descrição dos sistemas apresentados. Os resultados teóricos obtidos são comparados com resultados do método numérico de Crank-Nicolson de forma a ratificar sua validade. Na segunda parte, dois tipos de dependências temporais na forma de potenciais periódicos ou de *driving* e uma anisotropia relacionada a interações do tipo Ising são adicionadas ao Hamiltoniano e sua dinâmica é estudada para cada tipo de *driving* considerado. Para diagonalizar exatamente este tipo de Hamiltoniano, o método de Floquet é introduzido, fornecendo uma base dependente do tempo usada para expressar a função de onda do sistema. Os potenciais tratados são uma oscilação do coeficiente de troca central da cadeia numa configuração de 4 partículas e o pulso de rotação numa configuração de 5 partículas. O primeiro potencial de *driving* foi escolhido para o estudo do problema da impureza e o pulso de rotação foi escolhido por ter sido usado na discussão de cristais temporais. Ao final deste trabalho, são mencionadas possíveis extensões deste estudo.

Abstract

In this work the dynamics of one-dimensional quantum spin chains described by the Heisenberg model is studied for different physical situations. In the first part the homogeneous and isotropic Heisenberg Hamiltonian is analyzed from the magnetization and system's fidelity point of view for configurations of 2, 3 and 9 particles. This preliminary study serves as basis for the exposition of the exact diagonalization procedures used in the description of the presented systems. The theoretical results obtained are compared with the ones that came from the numeric Crank-Nicolson method as a way to confirm they are valid. In the second part two types of time dependencies under the form of periodic driving potentials and an anisotropy related to Ising interactions are added to the Hamiltonian and its dynamics is studied for each type of driving considered. In order to exactly diagonalize this type of Hamiltonian, the Floquet method is introduced, providing a time dependent base used to express the system's wave function. The potentials treated are an oscillation of the chain's central exchange coefficient for a configuration of 4 particles and the rotation pulse for a configuration of 5 particles. The first driving potential is chosen for the study of the impurity problem and the rotation pulse is chosen because of its usage in the discussion of time crystals. At the end of this work, it is mentioned some remarks about possible extensions of this study.

Sumário

1	Introdução	1
2	O Hamiltoniano de Heisenberg (H_s)	4
2.1	Dinâmica do Sistema para 2 Partículas	6
2.2	Dinâmica do Sistema para 3 e 9 Partículas	10
3	Introduzindo Driving Externo em H_s	15
3.1	Potencial J_α oscilante	17
3.2	Pulso de rotação	22
4	Conclusões	26
A	Material Complementar	28
A.1	A relação de comutação de $S_z^{(T)}$ com H_s	28
A.2	O método de Crank-Nicolson	29
A.3	O método de Floquet	31

Capítulo 1

Introdução

Uma das primeiras tentativas de se modelar teoricamente o magnetismo em sólidos surgiu com Werner Heisenberg em 1928 quando ele sugeriu um modelo para esse fenômeno. Tal Hamiltoniano foi concebido para descrever uma rede de *spins* submetida a interações de primeiros vizinhos, podendo ser facilmente adaptado para várias geometrias diferentes. Para uma cadeia de *spins* finita unidimensional de N componentes este Hamiltoniano é dado em unidades naturais por [1-3]:

$$H_s = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left[J_{i,x} \sigma_x^{(i)} \sigma_x^{(i+1)} + J_{i,y} \sigma_y^{(i)} \sigma_y^{(i+1)} + J_{i,z} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(i+1)} \right] \quad (1.0.1)$$

em que $\sigma_j^{(i)}$ são as matrizes de Pauli σ_j generalizadas para o sítio i . Como elas devem atuar trivialmente em todos os sítios exceto o i -ésimo, elas são definidas da seguinte maneira:

$$\sigma_j^{(i)} = \bigotimes_{k=1}^N \left[I_d (1 - \delta_{k,i}) + \sigma_j \delta_{k,i} \right] \quad (1.0.2)$$

em que I_d é a matriz identidade com a dimensão $d = 2s + 1$ do espaço interno de *spin* do sistema e δ_{ki} é a delta de Kronecker. No que segue ao longo de todo este Trabalho de Conclusão de Curso (TCC), unidades naturais em que $\hbar = 1$ serão usadas. O modelo de Heisenberg é de grande importância no campo de matéria condensada pois foi uma das primeiras tentativas de se modelar as interações magnéticas que surgem em sólidos, e, além disso, é um dos modelos exatamente solúveis mais importantes da Física Matemática.

Dependendo dos valores dos parâmetros J , casos especiais podem ser elencados, como o modelo XXX ou isotrópico, quando $J_{i,k} = J_i \forall k = x, y, z$; ou o modelo XXZ , quando $J_{i,x} = J_{i,y} = J_i \neq J_{i,z}$. Este modelo também pode ser homogêneo quando $J_{i,k} = J_k \forall i$. O modelo XXX foi primeiramente resolvido em 1931 por Hans Bethe [4] ao empregar uma técnica matemática, que hoje leva seu nome. Posteriormente outros estudos elucidaram mais propriedades sobre esse Hamiltoniano. Como no caso clássico, $J < 0$ corresponde a um estado fundamental ferromagnético, em que os termos diagonais no Hamiltoniano favorecem o alinhamento de *spins* e $J > 0$ corresponde ao caso antiferromagnético, em que os termos diagonais do Hamiltoniano favorecem *spins* antialinhados.

No decorrer do tempo, várias realizações experimentais desse modelo já foram feitas, como em *ensembles* de átomos frios em armadilhas ópticas [5], circuitos supercondutores [6], íons aprisionados [7] [8], finas fitas magnéticas que carregam ondas de *spin* [9] [10] e outras [11-19]. Além disso, propriedades físicas de diferentes

compostos já foram estudadas com o modelo de Heisenberg, de forma que muitas de suas propriedades termodinâmicas já são compreendidas [20] [21].

A partir dessas redes de *spins* já foi possível conceber modelos de dispositivos de computação quântica, como um *bus* e um transistor quânticos [22] [5]. Essas cadeias também são o resultado encontrado quando mapeia-se um sistema de átomos ultrafrios fortemente interagentes em armadilhas de potencial e podem ser usadas para se estudar as propriedades magnéticas de tais sistemas [23]. Nesses casos, os coeficientes J da rede são dados por expressões que dependem somente da geometria da armadilha de potencial. Também já foi constatado que casos de cadeias inomogêneas podem ser interpretados como barreiras de potencial que podem otimizar o transporte de estados quânticos [6] e efeitos de tunelamento entre poços de potencial com o modelo de Heisenberg também já foram tema de um estudo [24]. Essas aplicações estão motivando uma análise da dinâmica do modelo de Heisenberg.

Recentemente também está sendo investigado o transporte ao longo da cadeia de *spins* submetida a um potencial periódico. Apesar do risco de se introduzir erros no processo de transporte [25] [22], um controle dinâmico na cadeia pode melhorar significativamente a eficiência na transferência de estados quânticos ao longo da rede. Alguns estudos nesse sentido já foram realizados como, por exemplo, um ajuste adiabático dos coeficientes J da cadeia [26] e a introdução de um potencial de *driving* periódico no Hamiltoniano [27] [28]. O *driving* periódico em particular, tem recebido muita atenção nos últimos anos. Ele pode ser tratado através da teoria de Floquet [29], que consiste num *ansatz* para se encontrar uma solução exata para a equação de Schrödinger que descreve o sistema dado um Hamiltoniano periódico.

Além da possível descrição do sistema pelo formalismo de Floquet, sistemas com *driving* periódico são candidatos para a realização de uma fase da matéria fora do equilíbrio, os cristais temporais. Essa fase da matéria é uma realização experimental recente executada pela primeira vez justamente numa cadeia de *spin* submetida a um protocolo de *driving* periódico na forma de um pulso de rotação [28]. Posteriormente este estudo foi aplicado também para sistemas de poucas partículas [30] [31]. Atualmente também há outro estudo que conseguiu reproduzir esse fenômeno em compostos moleculares com um pulso de rotação semelhante [27].

Assim, devido a grande importância do modelo de Heisenberg em diferentes contextos, neste trabalho será estudada a dinâmica quântica de modelos de cadeia de *spins* tanto no caso de Hamiltonianos estáticos quanto periódicos. Os resultados da evolução temporal exata do sistema desenvolvidos pela diagonalização do Hamiltoniano e pela teoria de Floquet foram comparados com os obtidos com o método numérico de Crank-Nicolson [32], já utilizado em estudos do transporte de *spin* no limite de velocidade quântico [33] e em implementações de soluções da equação de Gross-Pitaevskii [34]. Este trabalho está dividido em duas partes. O Capítulo 2 tratará da dinâmica do modelo estático sem dependência temporal e anisotropia enquanto o Capítulo 3 tratará do modelo dinâmico com potenciais de *driving* periódicos e anisotropia. No Capítulo 2 sua dinâmica foi estudada através da fidelidade do sistema e da componente z de sua magnetização total, referida aqui como simplesmente por magnetização do sistema. Através dessa análise, as técnicas usadas ao longo de todo este trabalho para o estudo exato do sistema foram explicadas e detalhadas.

No caso dos potenciais periódicos estudados no Capítulo 3, em particular, será considerado modelos de *driving* externo que possam ter relação com fenômenos físicos interessantes como o transporte de estados quânticos e cristais temporais. No estudo do transporte de estados quânticos, foi estudado o problema da impureza, em que uma oscilação periódica do coeficiente J central da cadeia dirige a dinâmica do sistema. Nesse caso, a cadeia é iniciada num subespaço de um *spin* antialinhado frente aos demais e esse estado diferente é interpretado como uma impureza num plano de fundo de estados idênticos. Já no estudo de cristais temporais,

o objetivo deste estudo foi reproduzir esse fenômeno teoricamente monitorando a magnetização do sistema sujeito ao pulso de rotação.

Este estudo foi desenvolvido visando adquirir o domínio de diferentes ferramentas que possibilitem a abordagem de problemas físicos atuais. Sendo assim, este trabalho serviu como um teste para a aplicação da teoria de Floquet em outros potenciais periódicos além dos tratados aqui, assim como também foi usado para a implementação do método de Crank-Nicolson. Ao final deste trabalho são feitas conclusões sobre os modelos analisados e perspectivas de futuros estudos com base nesses desenvolvimentos são elencadas.

Capítulo 2

O Hamiltoniano de Heisenberg (H_S)

Como já visto na Introdução, o modelo de Heisenberg é um modelo da Mecânica Quântica que descreve um sistema de N spins interagindo numa rede unidimensional. Neste TCC vamos trabalhar no caso de sistemas de spin com dois estados internos: *spin* para cima ou *spin* para baixo. Este capítulo trata do modelo XXX homogêneo sem anisotropias no caso de uma rede de átomos frios, como descrito em [6]. Portanto, o Hamiltoniano assume a seguinte forma:

$$H_S = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} J \left[I - \boldsymbol{\sigma}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(i+1)} \right] \quad (2.0.1)$$

Nesta expressão, $\boldsymbol{\sigma}^{(i)}$ é o i -ésimo vetor de Pauli, cujas componentes são as i -ésimas matrizes de Pauli para cada direção. Dependendo do sinal de J pode-se diferenciar entre os casos ferromagnético ($J > 0$) e antiferromagnético ($J < 0$). Os autovalores e autovetores deste Hamiltoniano foram obtidos por Bethe em 1931; no entanto, outra possibilidade seria diagonalizar diretamente o Hamiltoniano (2.0.1). A partir disso, é possível obter os estados de *spin* e a magnetização do sistema. Dados seus n autovalores E_j de energia e seus autoestados $|\epsilon_j\rangle$, a solução geral do sistema pode ser expressa como [35]:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^n c_j e^{-iE_j(t-t_0)} |\epsilon_j\rangle \quad (2.0.2)$$

em que $c_j = \langle \epsilon_j | \Psi(t_0) \rangle$. Uma vez obtida a solução para o sistema, quantidades físicas como a fidelidade $F(t)$, que é a projeção da solução sobre o estado inicial e a magnetização $m(t)$ podem ser obtidas como:

$$F(t) = |\langle \Psi(t_0) | \Psi(t) \rangle|^2 \quad (2.0.3)$$

$$m(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \langle \Psi(t) | \sigma_z^{(i)} | \Psi(t) \rangle \quad (2.0.4)$$

A partir dessa definição, é análogo dizer que:

$$m(t) = \langle \Psi(t) | S_z^{(T)} | \Psi(t) \rangle \quad (2.0.5)$$

em que o operador

$$S_z^{(T)} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_z^{(i)} = \sum_{i=1}^N S_z^{(i)} \quad (2.0.6)$$

é a projeção do *spin* total na direção z .

A fidelidade é um dos observáveis de interesse em computação quântica pois nessa área é muito importante o conhecimento de em quais instantes o sistema se apresenta em determinado estado. A fidelidade fornece uma alternativa além da diagonalização direta para as transições de energia do sistema porque, de (2.0.2) pode se escrever:

$$F(t) = \left| \langle \Psi(t_0) | \sum_{j=1}^n c_j e^{-iE_j(t-t_0)} |\epsilon_j\rangle \right|^2 \Rightarrow F(t) = \left| \sum_{j=1}^n |c_j|^2 e^{-iE_j(t-t_0)} \right|^2 \Rightarrow F(t) = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n |c_j|^2 |c_k|^2 e^{-i(E_j-E_k)(t-t_0)} \quad (2.0.7)$$

Com isso, a transformada de Fourier $F(\omega)$ de $F(t)$ será:

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n |c_j|^2 |c_k|^2 e^{-i(E_j-E_k)(t-t_0)} dt \quad (2.0.8)$$

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n |c_j|^2 |c_k|^2 e^{i(E_j-E_k)t_0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i[(E_k-E_j)-\omega]t} dt \quad (2.0.9)$$

$$F(\omega) = \sqrt{2\pi} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n |c_j|^2 |c_k|^2 e^{i(E_j-E_k)t_0} \delta((E_k-E_j)-\omega) \quad (2.0.10)$$

em que $\delta(x)$ é a delta de Dirac. Portanto, a transformada de Fourier da fidelidade terá picos correspondentes às frequências de transição de níveis de energia do sistema. A magnetização por sua vez será útil para acompanhar os efeitos que a variação temporal no Hamiltoniano terá sobre o sistema, quando ele for modificado para depender do tempo.

Como $S_z^{(T)}$ comuta com o Hamiltoniano, tal como mostrado no apêndice A, a magnetização definida em (2.0.4) deve ser uma quantidade conservada. Se o estado inicial estiver na base dos operadores $S_z^{(i)} = \frac{1}{2}\sigma_z^{(i)}$, então:

$$m = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{2} \quad (2.0.11)$$

em que n_{\uparrow} é o número de partículas com *spin up* e n_{\downarrow} é o número de partículas com *spin down*.

A magnetização e a fidelidade são observáveis que permitem o acompanhamento da evolução temporal do sistema, que pode ser calculada exatamente através da solução em (2.0.2). Entretanto, devido à grande variabilidade de potenciais que podem ser incluídos no Hamiltoniano, também se faz necessário uma forma de se obter uma evolução temporal numérica para o sistema, visto que, dependendo do potencial incluído, o sistema pode não apresentar solução exata. Por isso neste trabalho também foi utilizado o método numérico de Crank-Nicolson. Com isso se terá a disposição duas formas de se encontrar a evolução temporal do sistema e, através da comparação entre essas evoluções, a qualidade da solução encontrada poderá ser determinada através da análise do erro entre os dois métodos. Também por conveniência, o tempo inicial usado ao longo desse TCC foi $t_0 = 0$.

2.1 DINÂMICA DO SISTEMA PARA 2 PARTÍCULAS

Esta Seção é o primeiro teste de todo o maquinário teórico desenvolvido nas Seções anteriores. Aqui está sendo tratada a dinâmica do sistema livre de potencial externo para duas partículas com *spin* 1/2, ou seja o espaço de Hilbert será de dimensão $D = 4$, sendo resultado da potenciação da dimensão espaço interno de *spin* d de cada partícula com o número de partículas do sistema N :

$$D = d^N \Rightarrow D = 2^2 = 4 \quad (2.1.1)$$

Por causa do tamanho pequeno do espaço a ser tratado nesta Seção, a solução exata será determinada toda manualmente, a fim de dar uma ideia dos cálculos realizados nas outras Seções.

Para se determinar o Hamiltoniano H , primeiramente deve-se determinar os seus constituintes, ou seja, as matrizes de Pauli para duas partículas. Utilizando (1.0.2), as matrizes de Pauli são definidas como:

$$\begin{aligned} \sigma_x^{(1)} = \sigma_x \otimes I_2 \Rightarrow \sigma_x^{(1)} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \sigma_x^{(2)} = I_2 \otimes \sigma_x \Rightarrow \sigma_x^{(2)} &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_y^{(1)} = \sigma_y \otimes I_2 \Rightarrow \sigma_y^{(1)} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{bmatrix} & \sigma_y^{(2)} = I_2 \otimes \sigma_y \Rightarrow \sigma_y^{(2)} &= \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_z^{(1)} = \sigma_z \otimes I_2 \Rightarrow \sigma_z^{(1)} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} & \sigma_z^{(2)} = I_2 \otimes \sigma_z \Rightarrow \sigma_z^{(2)} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

em que o subscrito na matriz identidade indica sua dimensão. Desse modo:

$$\begin{aligned} \sigma_x^{(1)} \sigma_x^{(2)} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \sigma_y^{(1)} \sigma_y^{(2)} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \sigma_z^{(1)} \sigma_z^{(2)} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Com isso, o Hamiltoniano de Heisenberg homogêneo para duas partículas é, de acordo (2.0.1):

$$H_s = J \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.1.2)$$

Agora, a base do espaço de Hilbert deve ser determinada. Ela é composta por quatro estados, sendo eles resultado do produto tensorial dos estados que representam as possíveis projeções $m_z^{(k)}$ de S_z para cada sítio. Numa notação compacta, atribui-se uma seta a cada valor $m_z^{(k)}$ de forma que, neste caso, $|m_z^{(k)}\rangle = |1/2\rangle \Rightarrow$

$|m_z^{(k)}\rangle = |\uparrow\rangle$ e $|m_z^{(k)}\rangle = |-1/2\rangle \Rightarrow |m_z^{(k)}\rangle = |\downarrow\rangle$. Com essa convenção, a base pode ser expressa como:

$$\{|m_z^{(1)}, m_z^{(2)}\rangle\} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\} \quad (2.1.3)$$

com cada estado determinado como:

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & |\downarrow\downarrow\rangle &= |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ |\uparrow\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & |\downarrow\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

O próximo passo seria a projeção do Hamiltoniano sobre os estados da base escolhida mas neste caso, assim como no resto deste trabalho, tanto H_s quanto a base estão escritos com relação aos autoestados de $S_z^{(k)}$; portanto, essa projeção só se faz necessária caso deseje-se reduzir o tamanho do espaço de Hilbert para um subespaço da base. Como H_s comuta com $S_z^{(T)}$, um subespaço que sempre existe é o subespaço dos estados que preservam a magnetização total definida no estado inicial. Isso já pode ser constatado diretamente de (2.1.2) pois o Hamiltoniano resultante é uma matriz diagonal por blocos. Essa redução é muito útil para cálculos em sistemas maiores, visto que a dimensão do espaço de Hilbert do sistema, de acordo com (2.1.1) escala exponencialmente com o número de partículas.

O efeito da escolha do estado inicial $|\Psi_0\rangle = |\Psi(t=0)\rangle$ sobre o subespaço projetado será melhor visto na próxima seção em que, com três partículas, a dinâmica do sistema será estudada tomando como exemplo duas configurações de *spin* inicial diferentes: a primeira de *spins* alternados, $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$, e a segunda com o último spin invertido em relação aos demais $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$. No caso desta seção, para duas partículas, ambas se reduzem a mesma escolha de configuração inicial: $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$.

A etapa seguinte no cálculo exato da dinâmica do sistema é a diagonalização do Hamiltoniano de Heisenberg projetado. Como a dimensão do sistema ainda é pequena o Hamiltoniano completo pode ser diagonalizado. Calculando seus autovalores, como H_s é bloco-diagonal:

$$|H - E_j I| = \left| \begin{bmatrix} -J - E_j & J \\ J & -J - E_j \end{bmatrix} \right| \left| \begin{bmatrix} -E_j & 0 \\ 0 & -E_j \end{bmatrix} \right| = [(J + E_j)^2 - J^2] E_j^2 \quad (2.1.4)$$

Forçando o determinante a ser 0, o seguinte conjunto de equações é obtido:

$$\begin{cases} E_j^2 = 0 \\ (J + E_j)^2 - J^2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} E_1 = 0 \\ E_2 = 0 \\ E_3 = 0 \\ E_4 = -2J \end{cases} \quad (2.1.5)$$

A partir da diagonalização, pode-se perceber que este Hamiltoniano tem somente dois valores de energia distintos, $E_1 = 0$ triplamente degenerado e $E_4 = -2J$. Para se encontrar os autoestados do Hamiltoniano, é só

tomar a equação de autovetores:

$$(H - E_j I) |\epsilon_j\rangle = \hat{0} \quad (2.1.6)$$

sendo:

$$|\epsilon_j\rangle = \begin{bmatrix} \epsilon_{j,1} \\ \epsilon_{j,2} \\ \epsilon_{j,3} \\ \epsilon_{j,4} \end{bmatrix}; \langle \epsilon_j | \epsilon_j \rangle = 1 \quad (2.1.7)$$

Dessa forma, para $E_4 = -2J$:

$$\begin{bmatrix} 2J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J & J & 0 \\ 0 & J & J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{4,1} \\ \epsilon_{4,2} \\ \epsilon_{4,3} \\ \epsilon_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} 2J\epsilon_{4,1} = 0 \\ J\epsilon_{4,2} + J\epsilon_{4,3} = 0 \\ J\epsilon_{4,2} + J\epsilon_{4,3} = 0 \\ 2J\epsilon_{4,4} = 0 \end{cases} \quad (2.1.8)$$

Resolvendo o sistema em (2.1.8), encontra-se:

$$|\epsilon_4\rangle = \epsilon_{4,2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} = \epsilon_{4,2} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.1.9)$$

A normalização de $|\epsilon_4\rangle$ exige que $\epsilon_{4,2} = \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2}}$, em que φ é uma fase que pode ser tomada arbitrariamente como 0. Aplicando esse procedimento com o outro autovalor de energia, a base de autoestados de H_S pode ser encontrada, correspondendo aos estados:

$$\{|\epsilon_1\rangle, |\epsilon_2\rangle, |\epsilon_3\rangle, |\epsilon_4\rangle\} = \left\{ |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \right\} \quad (2.1.10)$$

Por fim (2.0.2) pode ser aplicada ao estado inicial com os coeficientes $c_j = \langle \epsilon_j | \uparrow\downarrow \rangle$. Com isso:

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\epsilon_3\rangle + e^{2iJt} |\epsilon_4\rangle \right) \quad (2.1.11)$$

Escrevendo esse resultado novamente na base de $S_z^{(k)}$:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{iJt} (\cos(Jt) |\uparrow\downarrow\rangle - i \sin(Jt) |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.1.12)$$

Com esse resultado, o cálculo da fidelidade, de acordo com (2.0.3) se dá de forma quase direta:

$$F(t) = \left| \langle \uparrow\downarrow | e^{iJt} (\cos(Jt) |\uparrow\downarrow\rangle - i \sin(Jt) |\downarrow\uparrow\rangle) \right|^2 \Rightarrow F(t) = \left| e^{iJt} \cos(Jt) \right|^2 \Rightarrow F(t) = [\cos(Jt)]^2 \quad (2.1.13)$$

Analisando superficialmente esse resultado poderia se ter dúvida se haveria ou não um pico na transformada de Fourier da fidelidade em $\omega = E_3 - E_4 = 2J$, como dito no início do capítulo, mas o resultado obtido está perfeitamente de acordo com essa previsão pois ele pode ser reescrito através de uma identidade trigonométrica

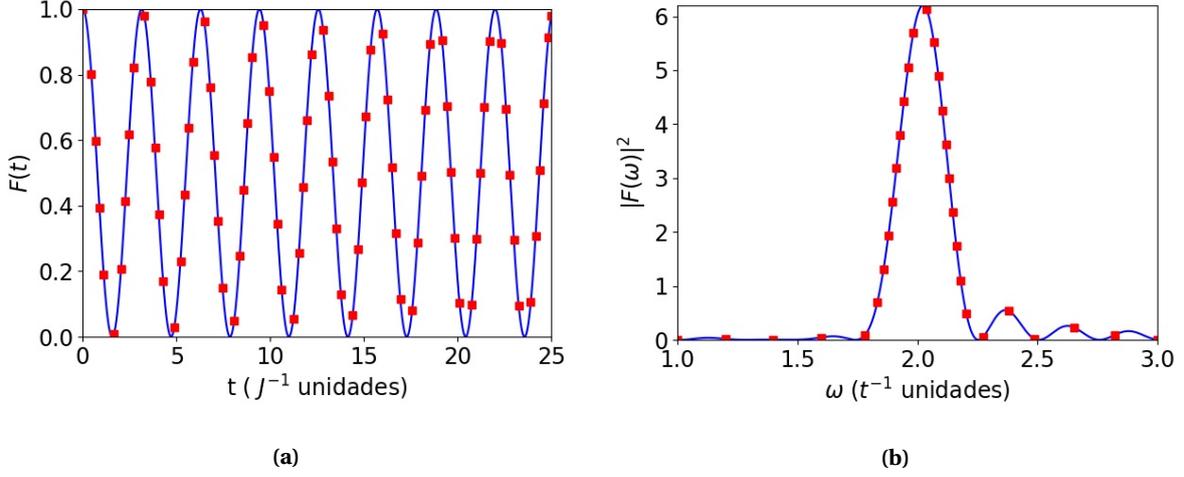


Figura 2.1: Fidelidade do sistema $F(t) = |\langle \Psi_0 | \Psi(t) \rangle|^2$ para duas partículas na configuração inicial $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$ como função do tempo (Figura (a)) e o módulo quadrado de sua transformada de Fourier (Figura (b)). Tanto o resultado teórico quanto o numérico tornam evidente a expressão calculada em (2.1.13). Pode-se constatar na Figura (b) o pico na transformada de Fourier de $F(t)$ no ponto $\omega = E_3 - E_4 = 2J$ confirmando a interpretação dada a $F(t)$ no início do Capítulo. Como a unidade de tempo está como o inverso da unidade de J , esse pico cai exatamente sobre o ponto $\omega = 2$ no gráfico. A linha azul contínua nos dois gráficos são os resultados calculados pelo método exato e os quadrados vermelhos representam os resultados calculados com o método de Crank-Nicolson como descrito no Apêndice.

para:

$$[\cos(Jt)]^2 = \frac{1 + \cos(2Jt)}{2} \quad (2.1.14)$$

As Figuras 2.1a e 2.1b mostram a fidelidade e o módulo quadrado de sua transformada de Fourier em torno do ponto $\omega = 2J$ respectivamente, corroborando o que foi discutido até este momento. Essas figuras possibilitam a primeira oportunidade de comparação entre a solução exata discutida nesta seção e a solução obtida pelo método de Crank-Nicolson e mostram que as duas soluções para o sistema concordam entre si.

Calculando a magnetização do sistema de acordo com (2.0.4):

$$m(t) = e^{-iJt} (\cos(Jt)\langle\uparrow\downarrow| + i\text{sen}(Jt)\langle\downarrow\uparrow|) (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) (\cos(Jt)|\uparrow\downarrow\rangle - i\text{sen}(Jt)|\downarrow\uparrow\rangle) e^{iJt} \quad (2.1.15)$$

Essa equação pode ser dividida em duas partes $m(t) = m_1(t) + m_2(t)$ em que:

$$m_j(t) = (\cos(Jt)\langle\uparrow\downarrow| + i\text{sen}(Jt)\langle\downarrow\uparrow|) S_z^{(j)} (\cos(Jt)|\uparrow\downarrow\rangle - i\text{sen}(Jt)|\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.1.16)$$

Aplicando $S_z^{(j)}$ ao ket em $m_j(t)$, percebe-se que:

$$m_1(t) = (\cos(Jt)\langle\uparrow\downarrow| + i\text{sen}(Jt)\langle\downarrow\uparrow|) \frac{1}{2} (\cos(Jt)|\uparrow\downarrow\rangle + i\text{sen}(Jt)|\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.1.17)$$

$$m_2(t) = (\cos(Jt)\langle\uparrow\downarrow| + i\text{sen}(Jt)\langle\downarrow\uparrow|) \frac{1}{2} (-\cos(Jt)|\uparrow\downarrow\rangle - i\text{sen}(Jt)|\downarrow\uparrow\rangle) = -m_1(t) \quad (2.1.18)$$

Portanto, $m(t) = 0$ e é conservada ao longo do tempo. Este resultado, que pode ser visto na Figura 2.2 é consequência direta da relação de comutação entre H_s e $S_z^{(T)}$ corroborando a teoria desenvolvida no início do Capítulo e no Apêndice.

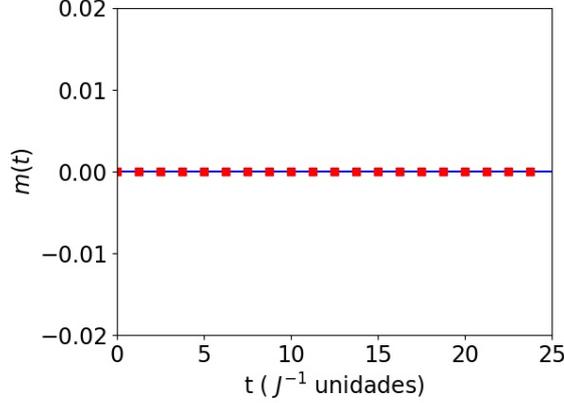


Figura 2.2: Magnetização total do sistema obtida pelos métodos exato (linha azul contínua) e de Crank-Nicolson (quadrados vermelhos) para duas partículas numa configuração inicial $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$. Este resultado vem diretamente de $[H_s, S_z^{(T)}] = \hat{0}$.

A seguir, a evolução temporal do sistema para três partículas será calculada nos mesmos moldes nos quais ela foi desenvolvida nesta seção. Entretanto, o tamanho do espaço de Hilbert neste caso já torna proibitivo uma obtenção manual da dinâmica da cadeia de forma que o sistema aqui desenvolvido assume um bom caráter instrutivo.

2.2 DINÂMICA DO SISTEMA PARA 3 E 9 PARTÍCULAS

Em se tratando de três partículas, a dimensão do espaço de Hilbert, de acordo com (2.1.1), torna-se $D = 2^3 = 8$, um aumento considerável em relação à Seção anterior. Felizmente, como $[H_s, S_z^{(T)}] = \hat{0}$, a evolução temporal do sistema pode ser calculada num subespaço que preserve $m(t=0)$ definida pelo estado inicial. Se esse estado estiver definido na base de autoestados das matrizes $S_z^{(k)}$, então o número de estados n nesse subespaço pode ser definido como a permutação de todos *spins* do estado inicial que gerem estados diferentes. Ou seja, se o número de partículas do sistema puder ser definido como $N = n_\uparrow + n_\downarrow$, haverá uma representação do subespaço em que a dinâmica do sistema vai ocorrer com uma dimensão que será:

$$n = \frac{N!}{n_\uparrow! n_\downarrow!} \quad (2.2.1)$$

Essa ideia pode ser generalizada para um estado inicial arbitrário ao escrevê-lo como uma combinação linear de estados na base de $S_z^{(k)}$ e tomar o subespaço final como o a união dos subespaços obtidos para cada estado presente na decomposição do estado inicial. Dessa forma a dinâmica do sistema pode ser dada por um Hamiltoniano H_p definido na representação de dimensão n ao invés da representação do espaço de Hilbert total. Dados os espinores componentes do subespaço presentes no espaço de Hilbert total $|\Psi_j\rangle$, os elementos de H_p , $H_{p;ij}$ serão definidos como:

$$H_{p;ij} = \langle \Psi_i | H_s | \Psi_j \rangle \quad (2.2.2)$$

sendo H_s o Hamiltoniano de Heisenberg não projetado. Assim como H_p terá n^2 elementos os espinores na representação do subespaço projetado também terão n elementos, cada um correspondendo à presença de um

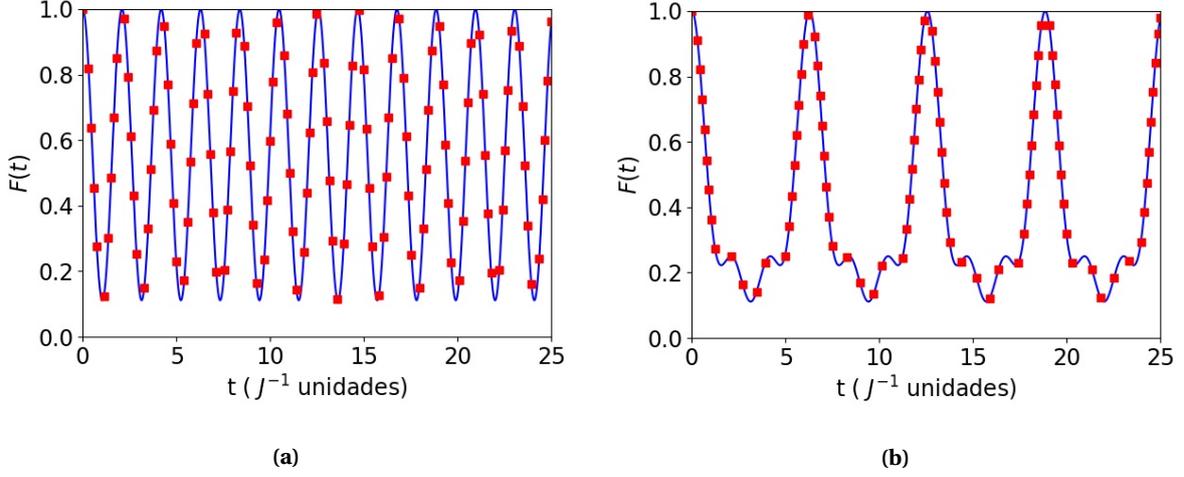


Figura 2.3: Fidelidade do sistema $F(t) = |\langle \Psi_0 | \Psi(t) \rangle|^2$ como função do tempo para 3 partículas nas configurações iniciais $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ (Figura (a)) e $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ (Figura (b)). A linha azul contínua nos dois gráficos é a fidelidade calculada pelo método exato e os quadrados vermelhos representam a fidelidade calculada com o método de Crank-Nicolson.

estado $|\Psi_j\rangle$.

Para três partículas as configurações de estados iniciais tomadas foram $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$, correspondendo a *spins* alternados, e $|\Psi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$, correspondendo ao *spin* final da cadeia anti-alinhado. Em ambos os casos como $n_\uparrow = 2$ e $n_\downarrow = 1$, a dimensão da representação do subespaço da evolução temporal do sistema é:

$$n = \frac{3!}{2!.1!} = 3 \quad (2.2.3)$$

que já representa uma redução considerável em relação ao tamanho do espaço de Hilbert total do sistema. De fato, como a composição dessas duas configurações iniciais em termos da quantidade de *spins up* e *spins down* é a mesma, pode-se até afirmar que elas estão no mesmo subespaço sendo, portanto, regidas pelo mesmo Hamiltoniano projetado.

Com base na solução exata (2.0.2) e no método de Crank-Nicolson, a fidelidade do sistema foi calculada e mostrada nas Figuras 2.3a e 2.3b para as duas configurações iniciais já citadas. Um olhar qualitativo sobre essas duas figuras já indica a presença de mais autoestados do Hamiltoniano na dinâmica apresentada pela configuração $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ do que na apresentada pela configuração $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$, pois, para se gerar uma oscilação sinusoidal na fidelidade, de acordo com (2.0.10) é necessária a contribuição de somente dois autoestados $|\epsilon_j\rangle$ e $|\epsilon_k\rangle$ do Hamiltoniano correspondendo a energias $E_j \neq E_k$. Como a projeção do Hamiltoniano de Heisenberg homogêneo (2.0.1) H_{sp} possui somente três autoenergias, pode-se dizer que a configuração $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ é uma combinação linear de todos os autoestados de H_{sp} .

Uma confirmação dessas observações pode ser obtida pela análise dos espectros de Fourier de $F(t)$ para essas duas configurações, mostrados nas Figuras 2.4a e 2.4b. Na Figura 2.4a, que representa $|F(\omega)|^2$ para a configuração inicial $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$, nota-se a presença de apenas um pico numa frequência $\omega \neq 0$ evidenciando que essa configuração é uma combinação linear de apenas dois autoestados do Hamiltoniano. Já na Figura 2.4b, que corresponde à configuração inicial $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$, há três picos em frequências não nulas. Isso só é possível se esse estado for uma combinação linear de pelo menos três autoestados não degenerados do Hamiltoniano. Nesse caso, haverá três energias diferentes entre si, E_j , $j \in \{1, 2, 3\}$ e as frequências ω_j mostradas na Figura

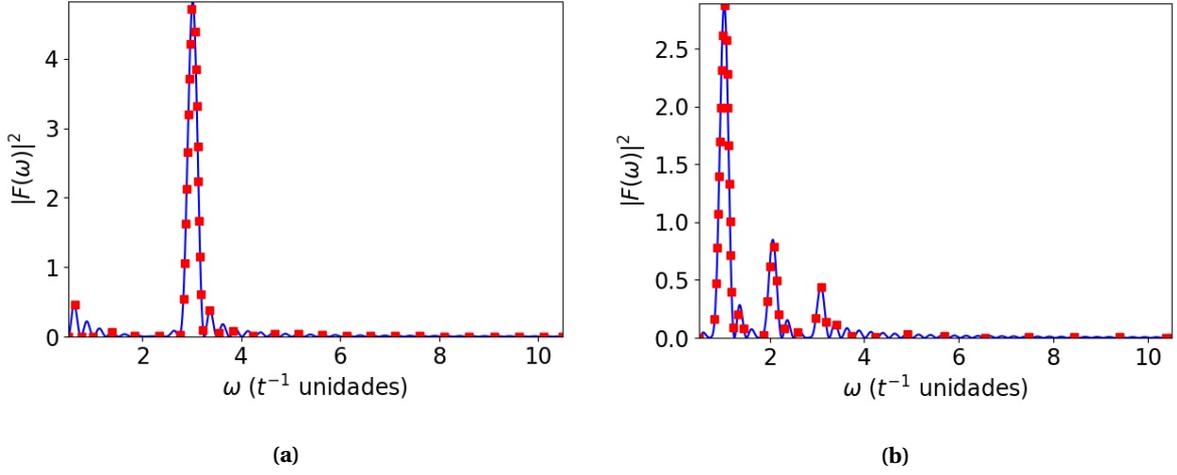


Figura 2.4: Módulos quadrados das transformadas de Fourier de $F(t)$ para as duas configurações iniciais de três partículas $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ que estão sendo estudadas nesta seção. A quantidade de picos em cada uma consegue fornecer a quantidade de autoestados do Hamiltoniano e, no caso da configuração $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ até determinar numericamente as autoenergias de H_{Sp} . Como nas Figuras anteriores neste Capítulo, a linha azul contínua corresponde a $|F(\omega)|^2$ calculada pelo método exato e os quadrados vermelhos correspondem ao método de Crank-Nicolson. Exclui-se o ponto $\omega = 0$ e suas redondezas pois lá sempre há um grande pico devido às contribuições quando $j = j'$ em (2.0.10). No caso do Hamiltoniano apresentar estados degenerados, também haverá contribuição em $F(\omega)$ em $\omega = 0$.

corresponderão a:

$$\omega_1 = |E_1 - E_2| \quad \omega_2 = |E_1 - E_3| \quad \omega_3 = |E_2 - E_3| \quad (2.2.4)$$

Como a dimensão do subespaço é $n = 3$, esse é o caso, e de (2.2.4) os autovalores de energia de H_{Sp} poderiam ser determinados numericamente sem a necessidade de diagonalizá-lo. Mas num subespaço maior, poderá não ser possível a resolução precisa de picos de correspondendo a energias diferentes de H_{Sp} . Esse aspecto fica mais evidente ao se aumentar o número de partículas.

Para 9 partículas, os subespaços para a configuração de *spins* alternados, agora denominada simplesmente por $|1\rangle = |\uparrow\downarrow\dots\rangle$, e para configuração do último *spin* antialinhado para baixo, denominada por $|2\rangle = |\uparrow\uparrow\dots\downarrow\rangle$, já são diferentes entre si. Inclusive, têm dimensões diferentes, sendo:

$$n_1 = \frac{9!}{5!.4!} = 126 \quad (2.2.5)$$

$$n_2 = \frac{9!}{8!.1!} = 9 \quad (2.2.6)$$

Os valores de n_1 e n_2 recém calculados mostram como a escolha do estado inicial pode impactar no tamanho do subespaço a ser considerado na dinâmica do sistema. Mesmo assim, esses números ainda são melhores que o tamanho do espaço de Hilbert completo para 9 partículas, $D = 2^9 = 512$. Generalizando para N partículas:

$$n_1 = \frac{N!}{\left(\frac{N+1}{2}\right)! \left(\frac{N-1}{2}\right)!}, N \text{ ímpar}; \quad n_1 = \frac{N!}{\left(\frac{N}{2}\right)!^2}, N \text{ par}$$

$$n_2 = \frac{N!}{(N-1)!} \Rightarrow n_2 = N$$

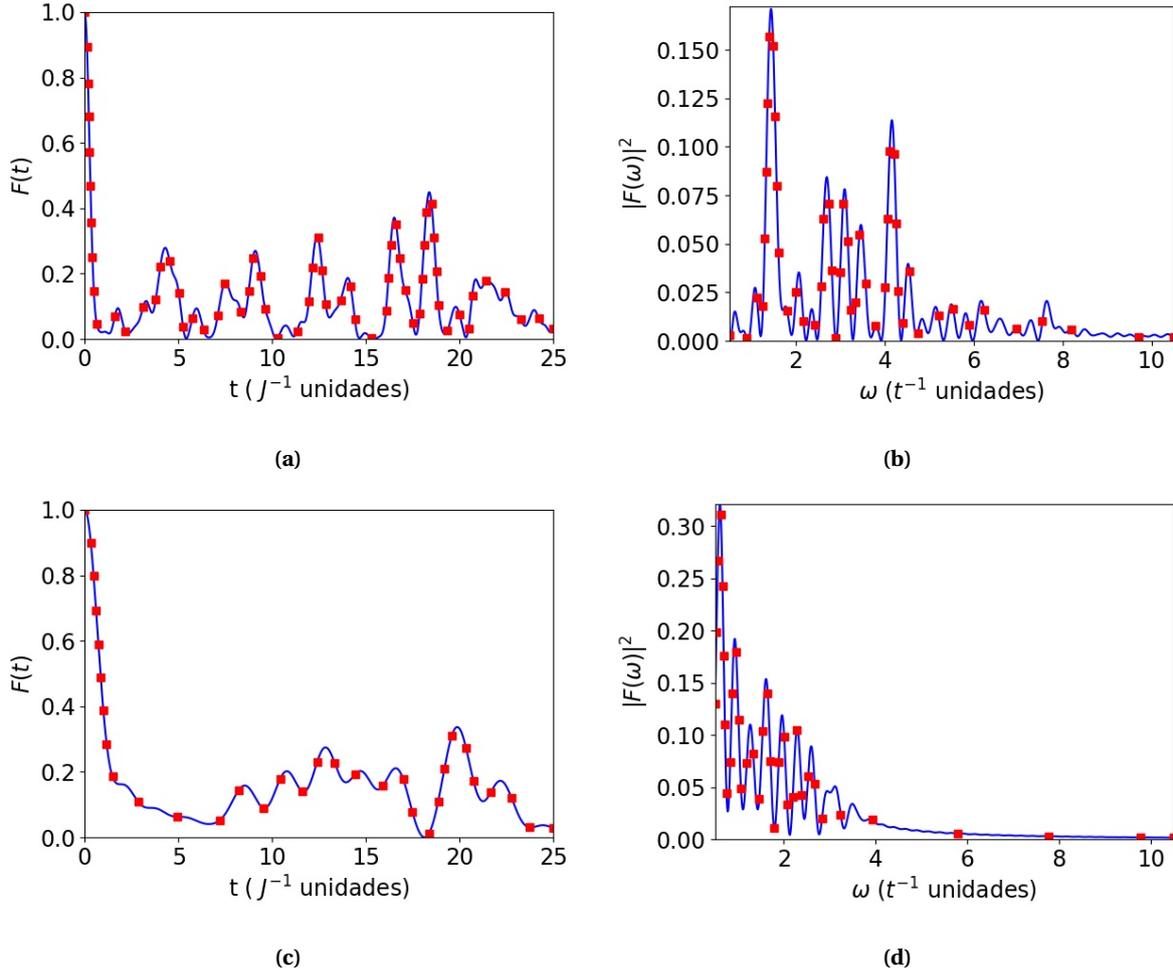


Figura 2.5: Fidelidade para as configurações iniciais $|1\rangle = |\uparrow\downarrow\dots\rangle$ e $|2\rangle = |\uparrow\uparrow\dots\downarrow\rangle$ (Figuras (a) e (c) respectivamente) de 9 partículas e os módulos quadrados de suas transformadas de Fourier (Figuras (b) e (d) respectivamente), evitando as redondezas de $\omega = 0$. Em todos os gráficos, a linha azul contínua representa os resultados obtidos com o método exato a partir de (2.0.2) e os quadrados vermelhos representam a solução obtida com o método de Crank-Nicolson. Em ambas as configurações, $F(t)$ já assume um comportamento mais complexo em relação ao caso de poucas partículas. Isso é refletido pela grande quantidade de picos nos $|F(\omega)|^2$. Devido à proximidade entre eles, problemas de resolução começam a aparecer. Também um problema de discernimento dos picos em relação ao ruído oriundo do procedimento numérico para o cálculo de $F(\omega)$ se torna evidente ao se comparar a amplitude do maior pico das figuras (b) e (d) com os picos nas Figuras 2.4 e 2.1b. Esses dois fatores tornam necessário um refinamento cada vez maior do procedimento de integração numérica à medida que N aumenta, o que torna a obtenção de $F(\omega)$ cada vez menos vantajosa.

As Figuras 2.5a e 2.5c mostram a fidelidade em função do tempo para as configurações iniciais $|1\rangle$ e $|2\rangle$. Em ambos os casos, pode se constatar uma maior complexidade em sua dinâmica indicando que vários autoestados de H_{sp} contribuem para a evolução temporal do sistema. No entanto, os picos em $|F(\omega)|^2$, mostrados para ambas as configurações nas Figuras 2.5b e 2.5d, começam a ficar muito próximos uns dos outros de modo que não podem ser mais utilizados com a mesma exatidão para se determinar numericamente as energias de H_{sp} . Soma-se a esse problema a questão da indeterminação do número de energias que podem estar gerando esses picos. Como já visto no caso de três partículas, a escolha da configuração inicial do sistema influencia a quantidade de picos em $F(\omega)$. Se essa configuração não for uma combinação linear de todas as autoenergias

de H_{sp} , haverá menos picos na transformada de Fourier da fidelidade de forma que a determinação das autoenergias de H_{sp} através de expressões como (2.2.4) leva a um sistema indeterminado. Junto a isso, se H_{sp} tiver pelo menos três autovalores de energia igualmente espaçados $E_j = E_0 + j\delta$, $j \in \mathbb{N}$, haverá uma sobreposição de picos em $F(\omega)$, pois $|E_j - E_{j+1}| = \delta$. Isso também levará a uma indeterminação no sistema de equações para se obter as energias de H_{sp} .

Um terceiro problema com a análise de dos picos em $|F(\omega)|^2$ está relacionado à sua amplitude à medida que N aumenta. Uma comparação das Figuras 2.5b e 2.5d com as Figuras 2.4 e 2.1b revela uma diminuição gradual na amplitude dos picos em $|F(\omega)|^2$ com o aumento no número de partículas. Como $F(\omega)$ é obtida por um processo de integração numérica truncada até um certo tempo muito grande, sua obtenção gera um ruído, que pode ser constatado claramente como as “ondulações” depois do pico em $\omega = 2$ na Figura 2.1b. Dessa forma, se N for muito grande, os picos devidos às energias de H_{sp} se confundirão com o próprio ruído em $|F(\omega)|^2$ sendo impossível discerni-los. Coerência com (2.0.10) mostra que um refinamento do método de integração mitigaria tanto o problema de resolução quanto o problema da amplitude dos picos. No entanto tais refinamentos só podem ser feitos até certo limite prático, de forma que a obtenção de informações a respeito do sistema a partir de $|F(\omega)|^2$ é cada vez mais comprometida à medida que N cresce.

Apesar dessas limitações, a fidelidade ainda mostra-se uma ferramenta útil para o acompanhamento da compatibilidade dos métodos exato e numérico usados para se solucionar o sistema, tanto é que ainda é usada no próximo capítulo na descrição do pulso de rotação. Entretanto, para o tratamento do potencial J_α oscilante ela será substituída por outro observável de maior interesse prático. A magnetização para os casos mostrados nessa seção ainda é constante ao longo do tempo, pois a comutação de H_s com $S_z^{(T)}$ é independente do número de partículas, como mostrado no Apêndice. Além dessa comutação possibilitar a divisão do espaço de Hilbert em subespaços, algo usado extensivamente ao longo deste capítulo e deste TCC, pode-se mostrar, usando (2.0.11), que, para as configurações |1) e |2):

$$m_1 = \frac{1}{2} \tag{2.2.7}$$

$$m_2 = \frac{N}{2} - 1 \tag{2.2.8}$$

Até agora a magnetização em si assumiu um papel mais secundário servindo mais como a expressão de uma propriedade de H_s fundamental ao estudo da dinâmica do sistema. Entretanto, no próximo capítulo, com o pulso π , ela assumirá em si mais importância, apresentando uma dinâmica própria. Isso representará uma violação da relação de comutação de H_s com $S_z^{(T)}$, mas mesmo assim, ainda haverá formas exatas e numéricas de se obter uma dinâmica satisfatória para o sistema.

Capítulo 3

Introduzindo Driving Externo em H_S

No Capítulo anterior o Hamiltoniano de Heisenberg foi discutido para os casos de muitas e poucas partículas e métodos para se obter a dinâmica do sistema foram propostos e testados. Entretanto, até agora, somente foi discutida a dinâmica do sistema não perturbado, ou seja, livre para evoluir no tempo por conta própria. A única interação externa do sistema com o meio a sua volta se dá justamente no início de sua dinâmica, quando o estado inicial é definido. Para as aplicações práticas, potenciais externos irão interagir com o sistema modificando seu comportamento no tempo. Dessa forma, H_S será alterado de forma a adquirir uma dependência temporal, mas ainda assim poderá ser escrito como a soma de uma parte dependente do tempo com uma parte independente do tempo $H(t) = H_0 + V(t)$.

Em ambos os casos estudados neste trabalho, $V(t)$ é periódico. Para a resolução numérica desse problema, foi usado o método de Crank-Nicolson, que é baseado numa composição das soluções numéricas implícita e explícita da equação de Schrödinger como mostrado no Apêndice. Entretanto, o método exato, que é baseado na diagonalização exata do Hamiltoniano em questão deverá ser modificado justamente porque a introdução de um potencial dependente do tempo pode inviabilizar na maior parte dos casos a obtenção de uma solução exata para o sistema. Esse método vem da solução da equação de Schrödinger para um Hamiltoniano H independente do tempo ao se escrever $|\Psi(t)\rangle$ como:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \quad (3.0.1)$$

Inserindo essa decomposição na equação de Schrödinger, tem-se:

$$HU(t, t_0) = i\partial_t U(t, t_0) \quad (3.0.2)$$

Com a condição de que $U(t, t) = I \forall t$. Essa equação é solucionada iterativamente ao ser transformada numa equação integral. Assim, $U(t, t_0)$ é dado como o último termo de uma relação de recorrência infinita:

$$U_{n+1}(t, t_0) = I - iH \int_{t_0}^t U_n(t', t_0) dt' \quad (3.0.3)$$

A solução dessa equação por sua vez é:

$$U(t, t_0) = e^{-i \int_{t_0}^t H dt'} \Rightarrow U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)} \quad (3.0.4)$$

Para o caso de Hamiltonianos $H(t)$ dependentes do tempo, a relação de recorrência obtida de (3.0.2) torna-se:

$$U_{n+1}(t, t_0) = I - i \int_{t_0}^t H(t') U_n(t', t_0) dt' \quad (3.0.5)$$

O tratamento analítico para solução de tal relação de recorrência é um pouco mais complicado, mas uma forma fechada para (3.0.5) é capaz de ser encontrada como:

$$U(t, t_0) = T \left[e^{-i \int_{t_0}^t H(t') dt'} \right] \quad (3.0.6)$$

em que $T[A, B]$ indica o produto ordenado no tempo de operadores [35]. Apesar de aparentemente simples, o tratamento de (3.0.6) é desafiador para maior parte dos Hamiltonianos de forma que uma solução analítica alternativa para (3.0.2) se faz necessária. Devido à periodicidade dos potenciais de *driving* externos estudados neste trabalho, o método de Floquet, exposto no Apêndice, se faz uma ferramenta indispensável para a continuidade deste estudo.

Nas próximas seções deste Capítulo, serão estudados potenciais externos acrescentados ao Hamiltoniano de Heisenberg H_s apresentado no Capítulo anterior e na Introdução. Em ambos os casos aqui estudados um termo de anisotropia relacionado a interações de tipo Ising modulado por um parâmetro adimensional Δ será adicionado ao Hamiltoniano. Esse acréscimo é necessário pois se revelará uma peça chave para o fenômeno do cristal temporal nos sistemas estudados, como ficará evidente na Seção 3.2. Quando submetida a um potencial periódico no tempo, a cadeia de *spins* tem a chance de contribuir para uma possível descrição desta fase da matéria. Da mesma forma que cristais espaciais representam uma quebra de simetria espacial, os cristais temporais surgem como uma quebra de simetria temporal e ocorrem, assim como seus “primos” espaciais como uma fase diferente da matéria. Disso, vem sua primeira característica, rigidez, ou seja, a configuração de cristal temporal consegue resistir a uma certa quantidade de desordem no sistema. A caracterização do cristal vem justamente de sua periodicidade, e no caso dos cristais temporais, não poderia ser diferente. Portanto para ser classificado como cristal temporal, o sistema deve apresentar uma frequência de resposta que seja um múltiplo inteiro do período do potencial externo aplicado a ele. Por fim, da mesma forma que um cristal espacial se repete várias vezes no espaço, um cristal temporal deve ser capaz de se repetir muitas vezes no tempo, ou seja, ele não pode espontaneamente se dissipar, sendo persistente [30].

No potencial J_α oscilante, estudado para um número par de partículas, o coeficiente central da cadeia $J_\alpha = J_{N/2}$ é colocado num regime oscilatório periódico. A partir desse ponto, o transporte de *spin* ao longo dessa cadeia é estudado num dos subespaços já vistos no Capítulo anterior em que o problema da impureza pode ser investigado [6]. Esse potencial é interessante de ser analisado no contexto de computação quântica em que se deseja executar um controle para que o sistema assuma um determinado estado em determinado momento. Estudos de transporte de estados quânticos já foram conduzidos em que os coeficientes J do Hamiltoniano de Heisenberg são alterados realizando um controle estático e até já há um estudo em que esses coeficientes variam adiabaticamente [6] [26]. No entanto, controle dinâmico na cadeia de *spin* ainda é algo relativamente novo e ainda há poucos trabalhos nesse sentido.

Já no potencial do pulso de rotação, num certo intervalo de tempo T determinado, um pulso é aplicado ao longo da cadeia de forma de girar os spins de todos os sítios num certo ângulo. Um caso particular é o pulso π que “gira” os *spins* da cadeia em π radianos. Esse potencial se relaciona com o fenômeno de cristais temporais pois foi com esse potencial que esse fenômeno foi observado experimentalmente pela primeira

vez [28]. Nessa observação foi encontrado um regime em que a dinâmica da magnetização do sistema se mantinha, caracterizando um comportamento de cristal temporal para o sistema. O estudo de tais sistemas pode parecer uma trivialidade, mas especula-se que o comportamento de cristais temporais pode ser usado em computação quântica como forma de se implementar uma memória quântica robusta, assim como pode representar uma nova fase da matéria fora do equilíbrio.

3.1 POTENCIAL J_α OSCILANTE

O potencial J_α oscilante é uma modificação de H_s para o estudo do transporte de *spin*. No contexto desse potencial, o comportamento do sistema é estudado num subespaço com um *spin* antialinhado em relação aos demais, ou seja, no mesmo subespaço ao qual pertence a configuração $|2\rangle$ mostrada na Seção 2.2. Nesse contexto, esse *spin* antialinhado é chamado de impureza e o objetivo deste estudo é determinar o seu comportamento ao longo da cadeia. Como já mostrado no início do capítulo, um termo de anisotropia Δ , que pode ser definido arbitrariamente tendo-se em vista que $H(t)$ deve continuar a ser hermitiano, é introduzido a H_s e o termo J_α central da cadeia é posto num regime oscilatório. Com isso, o Hamiltoniano aqui estudado assume a forma:

$$H(t) = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i(t) \left[\frac{1}{2} \left(I - \boldsymbol{\sigma}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(i+1)} \right) + \Delta \left(I + \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(i+1)} \right) \right] \quad (3.1.1)$$

com a variável $J_i(t)$ definida por:

$$J_i(t) = \begin{cases} J_0, & i \neq \alpha \\ J(t), & i = \alpha \end{cases} \quad (3.1.2)$$

No caso deste trabalho, o foco foi o comportamento da impureza com a variação do coeficiente central. Dessa forma, para haver tal coeficiente, o número de partículas envolvidas deve ser par, correspondendo ao coeficiente central $\alpha = \frac{N}{2}$. O potencial de *driving* escolhido foi:

$$J(t) = J_0 \frac{1 - \cos(\omega_D t)}{2} \quad (3.1.3)$$

em que ω_D é a frequência do *driving*, relacionada com o período $T = \frac{2\pi}{\omega_D}$ do Hamiltoniano, que pode ser definida livremente. O sistema aqui estudado é uma cadeia de 4 partículas. Com isso a dimensão do espaço de Hilbert agora se torna $D = 16$. No entanto, o observável escolhido para o monitoramento da dinâmica do sistema foi a probabilidade de encontrar a impureza nas extremidades da cadeia:

$$P(t) = |\langle \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow | \Psi(t) \rangle|^2 + |\langle \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow | \Psi(t) \rangle|^2 \quad (3.1.4)$$

Escrevendo o estado inicial $|\Psi_0\rangle = |\Psi(0)\rangle$ explicitamente, $P(t)$ é dada por:

$$P(t) = |\langle \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow | U(t, 0) | \Psi_0 \rangle|^2 + |\langle \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow | U(t, 0) | \Psi_0 \rangle|^2 \quad (3.1.5)$$

Como para cada projeção em $P(t)$ há um estado no subespaço de $|2\rangle$, esse observável só será afetado pelas componentes de $|\Psi(t)\rangle$ que estiverem nesse subespaço. Junto a isso, já que $H(t)$ ainda comuta com $S_z^{(T)}$ como mostrado no Apêndice, se $|\Psi(0)\rangle$ for definida inteiramente no subespaço de $|2\rangle$, a dinâmica do sistema ocorrerá somente nesse subespaço. Tendo em vista essas considerações, o sistema foi iniciado no estado fundamental de $H_p(0)$, o que permite que a análise de sua dinâmica ocorra no subespaço de $|2\rangle$ com uma representação de

dimensão $n = 4$.

Nas Figuras 3.1, foram mostrados os resultados para a dinâmica do sistema no subespaço de $|2\rangle$ para diferentes valores de ω_D e Δ . Essas Figuras mostram o primeiro teste do método de Floquet neste trabalho, que ficou em concordância com o método de Crank-Nicolson. Pode-se notar que nas Figuras 3.1g e 3.1h começa a ocorrer uma resposta sub-harmônica em $P(t)$. Para explorar melhor esse comportamento, o espectro de potência $S(\omega_R)$ de $P(t)$ foi calculado, sendo:

$$S(\omega_R) = \left| \int_0^\infty P(t) e^{-i\omega_R t} dt \right|^2 \quad (3.1.6)$$

Pode-se dividir $P(t)$ a partir de (3.1.4) em duas partes $P_1(t) = |\langle \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow | \Psi(t) \rangle|^2$ e $P_2(t) = |\langle \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow | \Psi(t) \rangle|^2$, de forma que:

$$S(\omega_R) = \left| \int_0^\infty P_1(t) e^{-i\omega_R t} dt + \int_0^\infty P_2(t) e^{-i\omega_R t} dt \right|^2 \Rightarrow S(\omega_R) = |\tilde{P}_1(\omega_R) + \tilde{P}_2(\omega_R)|^2 \quad (3.1.7)$$

Decompondo $|\Psi(t)\rangle$ na base de Floquet, $P_1(t)$ pode ser reescrita para:

$$P_1(t) = \left| \sum_{j=1}^m c_j e^{-i\epsilon_j t} \langle \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow | \Phi_j(t) \rangle \right|^2 \Rightarrow P_1(t) = \sum_{j=1}^m \sum_{j'=1}^m c_j c_{j'}^* e^{-i\Delta\epsilon_{jj'} t} \langle \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow | \Phi_j(t) \rangle \langle \Phi_{j'}(t) | \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \rangle \quad (3.1.8)$$

em que $\Delta\epsilon_{jj'} = \epsilon_j - \epsilon_{j'}$. O estado $|\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow\rangle$ também pode ser escrito na base dos estados de Floquet como:

$$|\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow\rangle = \sum_{j=1}^m a_j(t) |\Phi_j(t)\rangle \quad (3.1.9)$$

em que $a_j(t) = \langle \Phi_j(t) | \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \rangle$. Pode-se perceber que, como $|\Phi_j(t)\rangle$ é periódica de período T , $a_j(t)$ também o é. Com essa decomposição, (3.1.8) pode ser expressa como:

$$P_1(t) = \sum_{j=1}^m \sum_{j'=1}^m \sum_{k=1}^m \sum_{k'=1}^m c_j c_{j'}^* a_k(t)^* a_{k'}(t) e^{-i\Delta\epsilon_{jj'} t} \langle \Phi_k(t) | \Phi_j(t) \rangle \langle \Phi_{j'}(t) | \Phi_{k'}(t) \rangle \quad (3.1.10)$$

Mas como $\{|\Phi_j(t)\rangle\}$ é uma base ortonormal, $P_1(t)$ pode ser simplificada para:

$$P_1(t) = \sum_{j=1}^m \sum_{j'=1}^m c_j c_{j'}^* a_j(t)^* a_{j'}(t) e^{-i\Delta\epsilon_{jj'} t} \quad (3.1.11)$$

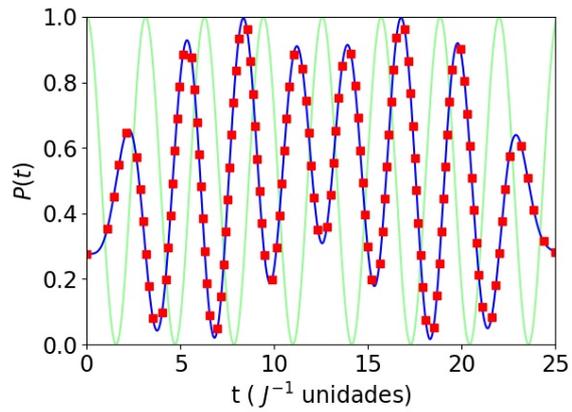
Fazendo a transformação de $P_1(t)$, tem-se:

$$\tilde{P}_1(\omega_R) = \sum_{j=1}^m \sum_{j'=1}^m c_j c_{j'}^* \int_0^\infty a_j(t)^* a_{j'}(t) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t} dt \Rightarrow \tilde{P}_1(\omega_R) = \sum_{j=1}^m \sum_{j'=1}^m c_j c_{j'}^* I_{jj'} \quad (3.1.12)$$

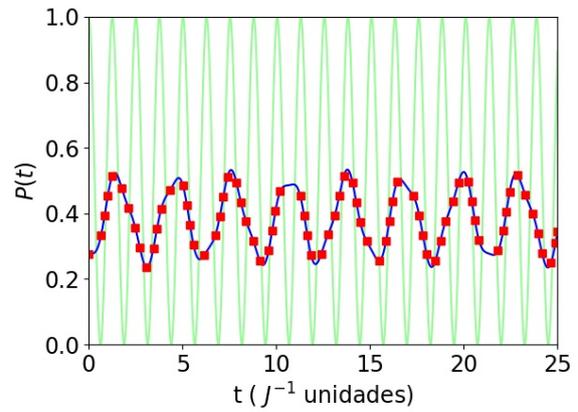
As integrais em (3.1.12) podem ser individualmente reescritas ao se aproveitar da periodicidade dos coeficientes $a_j(t)$. Seja $f_{jj'}(t) = a_j(t)^* a_{j'}(t)$, então as integrais em (3.1.12) podem ser reescritas para:

$$I_{jj'} = \int_0^\infty f_{jj'}(t) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t} dt \Rightarrow I_{jj'} = \int_0^T f_{jj'}(t) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t} dt + \int_T^\infty f_{jj'}(t) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t} dt \quad (3.1.13)$$

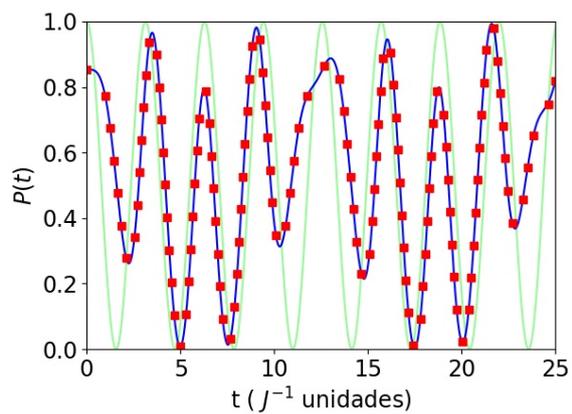
$$I_{jj'} = \int_0^T f_{jj'}(t) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t} dt + \int_0^\infty f_{jj'}(t' + T) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})(t' + T)} dt' \quad (3.1.14)$$



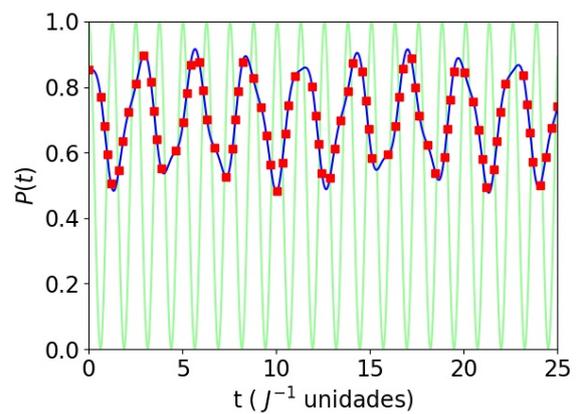
(a) $\omega_D = 2, \Delta = 0,5.$



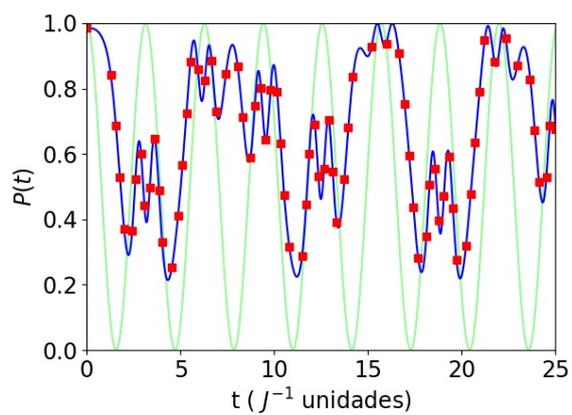
(b) $\omega_D = 5, \Delta = 0,5.$



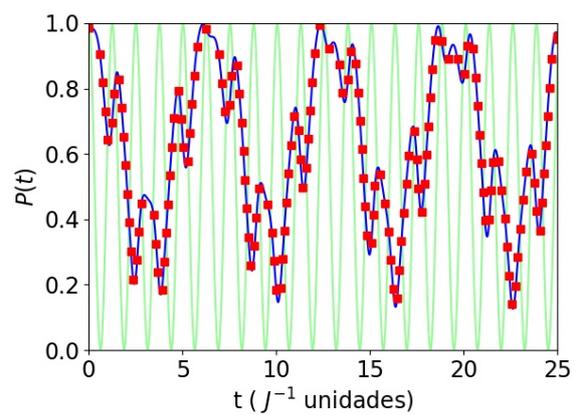
(c) $\omega_D = 2, \Delta = 2.$



(d) $\omega_D = 5, \Delta = 2.$



(e) $\omega_D = 2, \Delta = 5.$



(f) $\omega_D = 5, \Delta = 5.$

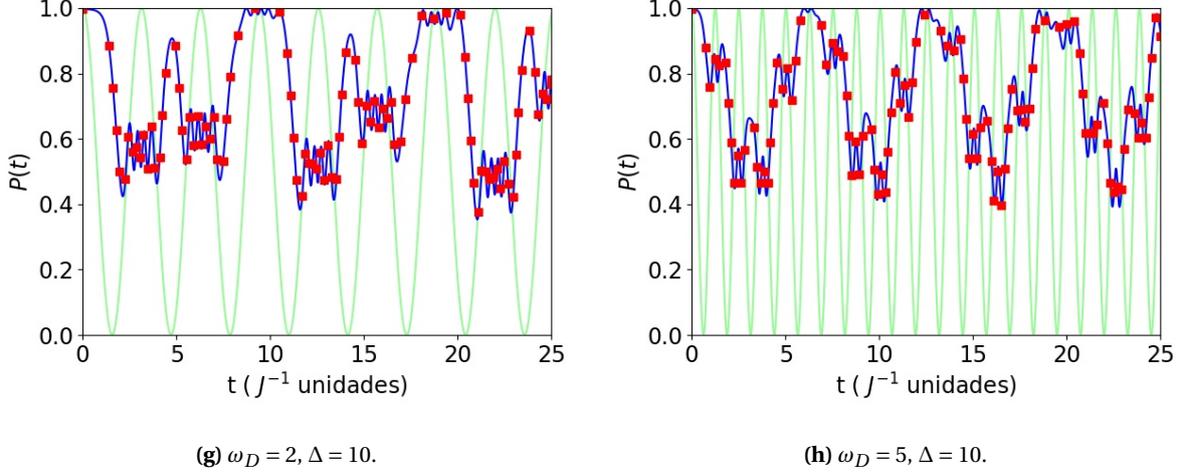


Figura 3.1: Probabilidades $P(t)$ para o sistema, iniciado no estado fundamental do Hamiltoniano projetado $H_p(t)$, no subespaço da configuração $|2\rangle$ para 4 partículas sob regimes de ω_D , em unidades de J , e Δ . A linha azul contínua é o resultado da dinâmica do sistema usando o método de Floquet e os quadrados vermelhos são os mesmos resultados, porém empregando o método de Crank-Nicolson. A curva verde ao fundo dos gráficos é o termo $J_{N/2}(t)$ em $H(t)$. Pode-se observar que, à medida que Δ aumenta, $P(t)$ começa a oscilar num sub-harmônico de ω_D em determinadas regiões (Figuras (g) e (h)).

$$I_{jj'} = \int_0^T f_{jj'}(t) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t} dt + e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})T} \int_0^\infty f_{jj'}(t') e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t'} dt' \quad (3.1.15)$$

No entanto, o último termo no lado direito de (3.1.15) é a própria $I_{jj'}$, Com isso:

$$I_{jj'} = \frac{1}{1 - e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})T}} \int_0^T f_{jj'}(t) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t} dt \quad (3.1.16)$$

Procedimento análogo ao feito aqui para se obter $\tilde{P}_1(\omega_R)$ pode ser realizado para o cálculo de $\tilde{P}_2(\omega_R)$. Combinando esses resultados o espectro de potência pode ser expresso por:

$$S(\omega_R) = \left| \sum_{j=1}^m \sum_{j'=1}^m c_j c_{j'}^* \frac{A_{jj'} + B_{jj'}}{1 - e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})T}} \right|^2 \quad (3.1.17)$$

com:

$$A_{jj'} = \int_0^T a_j(t)^* a_{j'}(t) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t} dt \text{ e } B_{jj'} = \int_0^T b_j(t)^* b_{j'}(t) e^{-i(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'})t} dt \quad (3.1.18)$$

Sendo que, da mesma forma que $a_j(t) = \langle \Phi_j(t) | \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \rangle$, $b_j(t) = \langle \Phi_j(t) | \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \rangle$.

A partir (3.1.17) o comportamento $P(t)$ com frequências sub-harmônicas fica evidente. As frequências ω_R que apresentam picos em $S(\omega_R)$ são as que fazem algum dos seus denominadores se anularem. Essa condição implica que:

$$(\omega_R + \Delta\epsilon_{jj'}) T = 2k\pi, \quad k \in \mathbb{Z} \quad (3.1.19)$$

Como $T = \frac{2\pi}{\omega_D}$, (3.1.19) é equivalente a:

$$\omega_R = k\omega_D - \Delta\epsilon_{jj'} \quad (3.1.20)$$

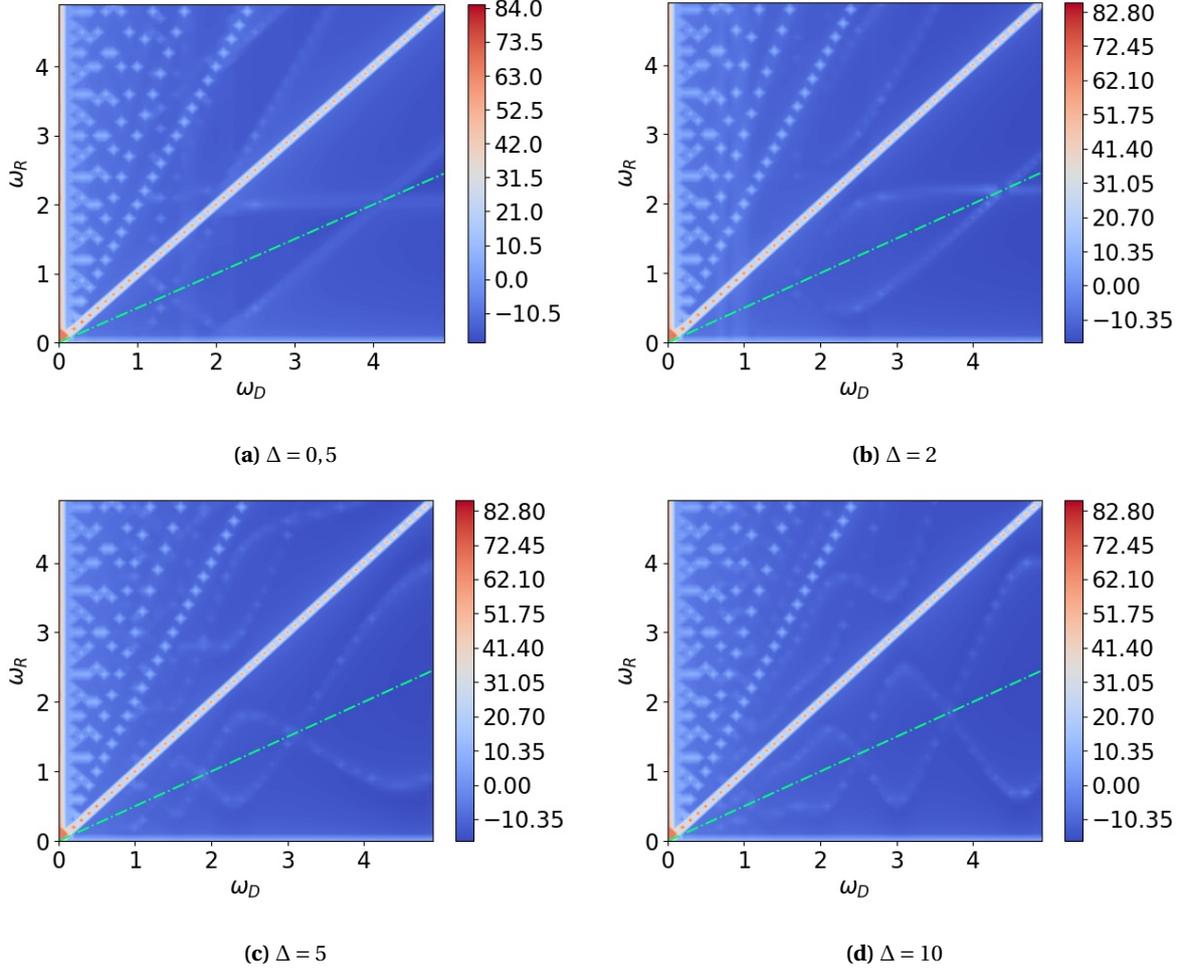


Figura 3.2: Logaritmo natural de $S(\omega_R)$ em função das frequências ω_R e ω_D em unidades de J para diferentes valores de Δ . As retas começando a partir da origem tornam evidente o comportamento em (3.1.20) para quando $\Delta\epsilon_{jj'} = 0$. Picos em $S(\omega_R)$ em posições correspondendo a linhas curvas nos gráficos indicam uma dinâmica própria dos valores de $\Delta\epsilon_{jj'}$ em relação a ω_D , visto que (3.1.20) descreve apenas retas para valores constantes de $\Delta\epsilon_{jj'}$. As linhas tracejadas verdes nos gráficos indicam a reta $\omega_R = \frac{\omega_D}{2}$, uma frequência característica de cristais temporais.

Esse resultado é mais geral do que parece. Ele é decorrência da periodicidade da base de Floquet que pode ser usada para descrever o sistema e irá ocorrer para o espectro de potência de qualquer observável da forma¹

$$\mathcal{A} = \sum_i |\langle \Psi_i | \Psi(t) \rangle|^2 \quad (3.1.21)$$

sendo $|\Psi_i\rangle$ um espinor constante no tempo arbitrário.

As figuras 3.2 mostram o logaritmo natural de $S(\omega_R)$ para os diferentes valores do parâmetro de anisotropia Δ estudados. A análise recém feita descreve a maior parte do comportamento apresentado pelas Figuras 3.2, no entanto, se fosse considerado $\Delta\epsilon_{jj'}$ como fixo para todas as ω_D , (3.1.20) não seria capaz de gerar linhas curvas como pode ser constatado nas Figuras. Portanto, há uma variação de $\Delta\epsilon_{jj'}$ com ω_D que não é explicitamente

¹Essa conclusão pode ser diretamente verificada ao se constatar que a substituição dos estados sobre os quais $|\Psi(t)\rangle$ está sendo projetada em (3.1.4) por qualquer outro estado constante não muda em nada o raciocínio desenvolvido a partir de (3.1.8).

mostrada em (3.1.20) sendo resultado de uma dinâmica intrínseca ao potencial. Essa dinâmica faz com que, para determinados valores de ω_D , haja picos em $S(\omega_R)$ correspondendo a uma frequência de resposta $\omega_R = \frac{\omega_D}{2}$ como mostrado pelas linhas verdes pontilhadas nas Figuras 3.2. Ou seja, nesses casos o período de resposta do sistema é um múltiplo inteiro do período do *driving*, abrindo margem à indagação de se sistema poderia ser um cristal temporal. A próxima seção trata também de outro potencial de *driving* capaz de transformar o sistema em cristal temporal. De fato uma das primeiras realizações experimentais de cristais temporais veio do estudo de sistemas semelhantes ao estudado na próxima seção [28].

3.2 PULSO DE ROTAÇÃO

O pulso de rotação é um potencial $V(t)$ adicionado ao Hamiltoniano que realiza uma rotação periódica dos *spins* do sistema num ângulo θ_i determinado e pode ser implementado com as matrizes de Pauli $\sigma_x^{(i)}$ para cada sítio. Para que a rotação seja aplicada instantaneamente num instante $t_n = nT$, sendo T o período do pulso, $V(t)$ deve ser definido por²:

$$V(t) = \left[\sum_{i=1}^N \theta_i S_x^{(i)} \right] \sum_{n=n_0}^{\infty} \delta(t - nT) \Rightarrow V(t) = \left[\sum_{i=1}^N \frac{\theta_i}{2} \sigma_x^{(i)} \right] \sum_{n=n_0}^{\infty} \delta(t - nT) \quad (3.2.1)$$

em que n_0 denota o início da aplicação dos pulsos no domínio temporal considerado, portanto, $n_0 = \lceil \frac{t_0}{T} \rceil$. No caso deste trabalho, os pulsos são aplicados desde o início da dinâmica do sistema, de forma que $n_0 = 0$ e o período escolhido foi $T = 0,786$ unidades de J^{-1} , correspondendo a uma frequência de *driving* $\omega_D = 7,99$ unidades de J , já que $\omega_D = \frac{2\pi}{T}$. Como pode ser visto, esse potencial é descrito pelo produto de uma matriz de rotação R constante independente no tempo por uma soma de deltas de Dirac que implementam sua periodicidade. Somando $V(t)$ ao Hamiltoniano de Heisenberg homogêneo e anisotrópico por interações de Ising, seguindo o trabalho de [31], a dinâmica do sistema será regida pelo operador $H(t)$ dado por:

$$H(t) = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2} \left[I - \sigma^{(i)} \cdot \sigma^{(i+1)} \right] + \Delta \left[I + \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(i+1)} \right] \right\} + \left[\sum_{i=1}^N \frac{\theta_i}{2} \sigma_x^{(i)} \right] \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - nT) \quad (3.2.2)$$

$$H(t) = H_0 + R \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - nT) \quad (3.2.3)$$

Pode se notar o produto da parte estática de $H(t)$ por mais um fator de global de $\frac{1}{2}$ se ela for comparada com os Hamiltonianos estudados nas Seções anteriores. Esse fator extra ocorre para melhor conectar no Hamiltoniano descrito aqui em termos das matrizes de Pauli com uma descrição em termos dos operadores de *spin*. Como os Hamiltonianos estudados anteriormente somente diferem dessa descrição por um fator multiplicativo, os resultados apresentados neste trabalho até este momento divergem da descrição do sistema com operadores de *spin* apenas por um fator de escala.

Apesar da dependência temporal, há uma solução exata para esse sistema. Num intervalo de tempo $[t', t]$ que não contenha nenhum pico resultante das deltas de Dirac, o operador evolução temporal é dado por (3.0.4) levando-se em conta apenas H_0 e sua aplicação a algum estado $|\Psi\rangle$ da rede leva a (2.0.2). No entanto, quando há a presença de algum instante t_m que corresponda a um pico nessas deltas, o operador evolução temporal

²A princípio, a forma mais geral desse potencial também envolve um deslocamento de fase nas deltas de Dirac, mas os efeitos desse deslocamento são triviais como pode ser constatado na expressão final para o operador evolução temporal obtido em (3.2.5).

deve ser dado pela relação de recorrência (3.0.5). Tomando um intervalo de tempo que contenha somente um pico, $W \equiv]t_m - \tau, t_m + \tau[$, essa recorrência pode ser expressa como:

$$U_{n+1}(t_m + \tau, t_m - \tau) = I - i \int_{t_m - \tau}^{t_m + \tau} H_0 U_n(t, t_m - \tau) dt + i R U_n(t_m, t_m - \tau) \quad (3.2.4)$$

O valor de τ pode ser arbitrariamente pequeno e, à medida que diminui, a contribuição de H_0 para a evolução temporal do sistema diminui cada vez mais. No limite, somente o termo com a matriz R contribui para o operador evolução temporal e essa relação de recorrência pode ser resolvida para:

$$U(t_m, t_m) = e^{-iR} \quad (3.2.5)$$

Combinando os resultados obtidos para intervalos de tempo sem e com a aplicação de R , o efeito do produto ordenado no tempo mostrado em (3.0.6) pode ser apreciado, no sentido de que ele orienta como as diferentes partes de U devem ser colocadas juntas para gerar a evolução temporal do sistema. Entretanto, o resultado obtido em (3.2.5) mostra que o modelo teórico utilizado pode ainda ser refinado já que ele viola a condição de que $U(t, t) = I \forall t$. Apesar disso, o limite:

$$\lim_{t' \rightarrow t} (U(t, t')) = I \quad (3.2.6)$$

para qualquer tempo, mesmo os que levem a algum pico em $H(t)$.

A partir de sua decomposição em autovalores e autovetores, a aplicação do operador em (3.2.5) num estado $|\Psi\rangle$ do sistema pode ser dado de forma semelhante a (2.0.2) e o método exato para a dinâmica do sistema pode ser adaptado. Nesta seção, o sistema foi iniciado na configuração $|\Psi_0\rangle = |1\rangle$ de *spins* alternados e sua dinâmica para o caso de 5 partículas foi monitorada através de sua fidelidade e magnetização. O primeiro caso estudado foi o pulso π , em que $\theta_i = \pi$ radianos para todos os sítios e com $\Delta = 0$. O efeito desse pulso é uma inversão dos *spins* da rede que pode ser facilmente verificado pela fidelidade do sistema na Figura 3.3a. Ao serem “girados”, os espinos do sistema passam a evoluir no tempo num subespaço V de magnetização oposta à magnetização do estado inicial criando regiões em que $F(t)$ é identicamente nula. Como há uma correspondência biunívoca entre os elementos do subespaço de $|\Psi_0\rangle$ e esse subespaço, quando os espinos são girados novamente, sua dinâmica continua ocorrendo como se nenhuma rotação tivesse sido aplicada, explicando o comportamento de $F(t)$.

Esse efeito também fica visível na magnetização do sistema, mostrada na Figura 3.3c, que fica oscilando entre os valores de $\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$ causando um pico no módulo quadrado de sua transformada de Fourier na metade da frequência do pulso de rotação, como destacado na Figura 3.3e. Ao se fazer uma rotação num ângulo $\theta_i = \pi - \varphi$, o comportamento da fidelidade fica mais complexo, como mostrado na Figura 3.3b, com o sistema nem sempre sendo levado a um subespaço ortogonal ao estado inicial. Para φ pequeno, como no caso deste TCC, em que $\varphi = 0,1$ radianos, o pulso faz surgir um batimento na magnetização do sistema, como mostrado na Figura 3.3d, causando uma divisão de picos na transformada de Fourier de $m(t)$, como seu módulo quadrado é capaz de mostrar na Figura 3.3f.

Incrivelmente, esse batimento em $m(t)$ pode ser corrigido ao se introduzir as interações de Ising no Hamiltoniano. Ao se definir $\Delta = 10$, as Figuras 3.4 mostram que a fidelidade do sistema oscila praticamente entre o estado inicial e subespaços ortogonais a ele e que a magnetização do sistema volta a oscilar praticamente sem batimentos apesar de $\varphi \neq 0$. Isso pode ser visto claramente no módulo quadrado da transformada de Fourier de $m(t)$ na Figura 3.4c que apresenta somente um pico. Esse resultado mostra um trancamento no período

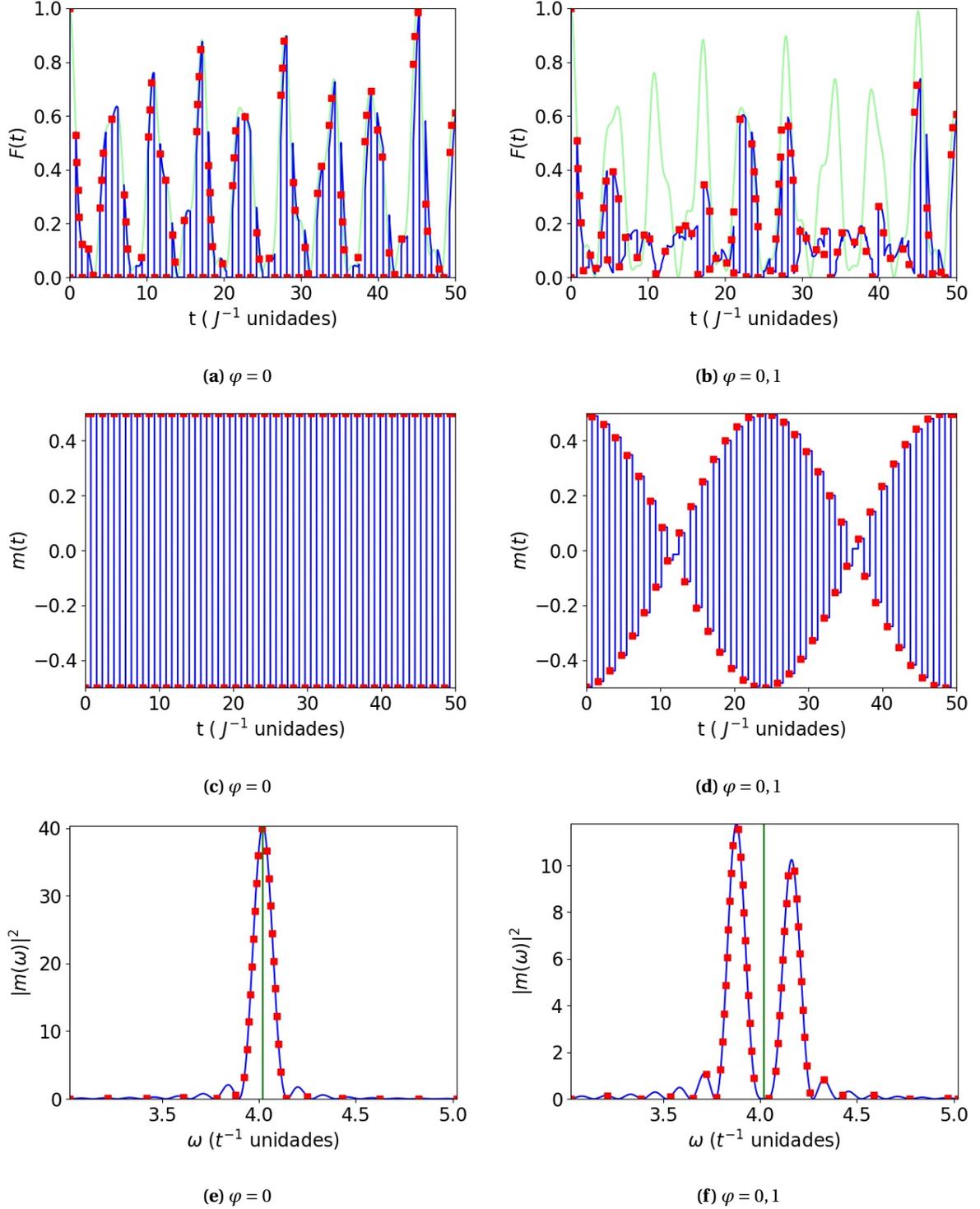


Figura 3.3: Fidelidade $F(t) = |\langle \Psi_0 | \Psi(t) \rangle|^2$ (Figuras (a) e (b)), magnetização $m(t) = \langle \Psi(t) | S_z^{(T)} | \Psi(t) \rangle$ (Figuras (c) e (d)) e $|m(\omega)|^2$ (Figuras (e) e (f)) do sistema para uma configuração inicial $|\Psi_0\rangle = |1\rangle$ de 5 partículas de *spins* alternados. O sistema foi analisado inicialmente com $\Delta = 0$ e os pulsos de rotação em ângulos de $\pi - \varphi$ radianos foram aplicados ao sistema. Nas Figuras (a) e (b), a linha verde ao fundo é o resultado para $F(t)$ na ausência do pulso de rotação e nas Figuras (e) e (f) a linha verde marca o ponto $\omega = \frac{\omega_D}{2}$. O batimento na magnetização com $\varphi \neq 0$ fica claro ao se constatar a presença de dois picos em torno dessa frequência na Figura (f). Os resultados mostrados nas curvas azuis foram obtidos com o método exato adaptado e os quadrados vermelhos são os resultados obtidos com o método de Crank-Nicolson.

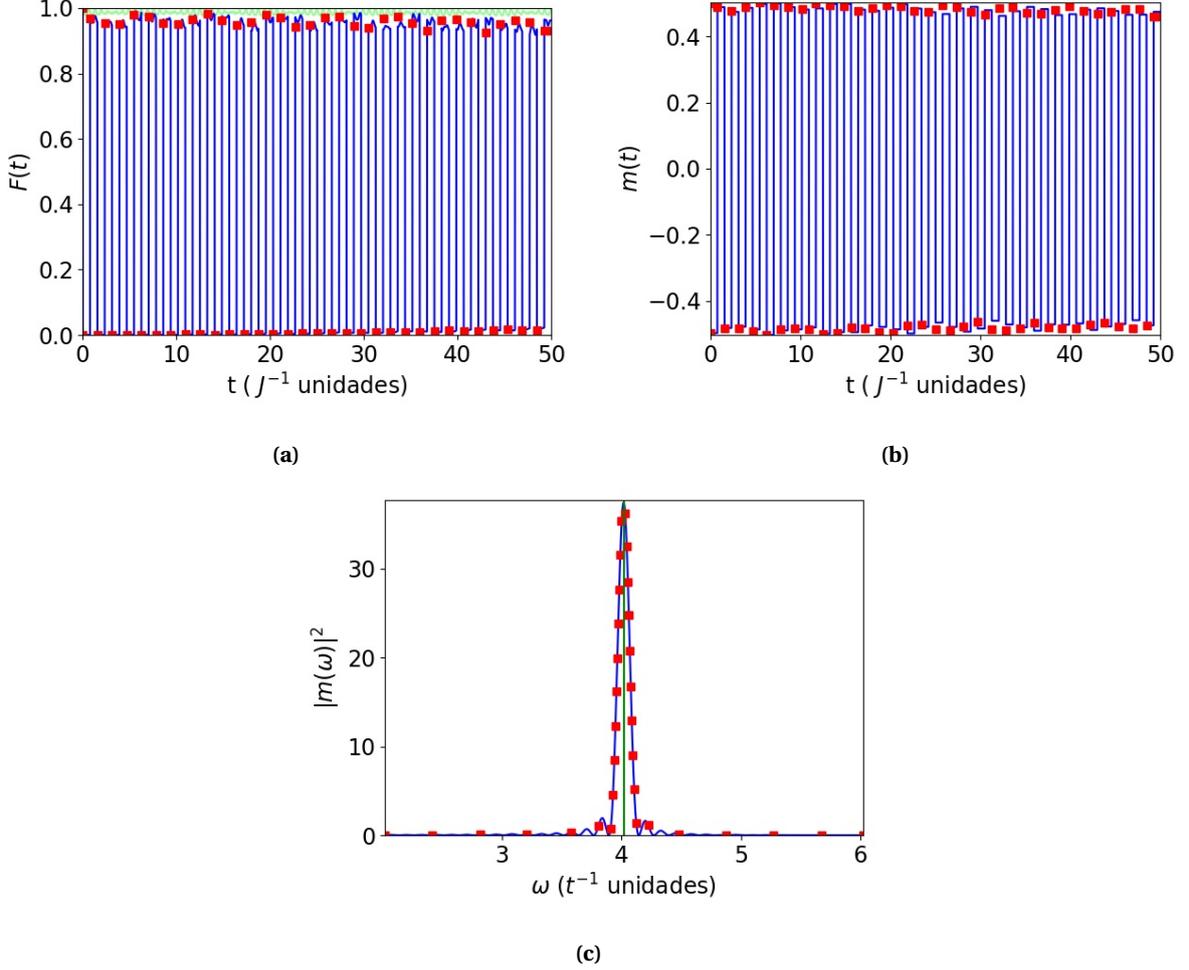


Figura 3.4: Fidelidade $F(t) = |\langle \Psi_0 | \Psi(t) \rangle|^2$ (Figura (a)), magnetização $m(t) = \langle \Psi(t) | S_z^{(T)} | \Psi(t) \rangle$ (Figura (b)) do sistema e sua transformada de Fourier (Figura (c)) para uma configuração inicial $|\Psi_0\rangle = |1\rangle$ de 5 partículas de *spins* alternados submetidos a um pulso de rotação em $\pi - \varphi$ radianos com $\varphi = 0, 1$. A presença de interações de Ising em $H(t)$ acaba compensando o batimento na magnetização introduzido por φ , como fica claro em $|m(\omega)|^2$, caracterizando um comportamento de cristal temporal para o sistema. A linha verde ao fundo da Figura (a) é a fidelidade do sistema sem a presença do pulso de rotação e a linha verde na Figura (c) marca o ponto em que $\omega = \frac{\omega_D}{2}$. Os resultados mostrados nas curvas azuis foram obtidos com o método exato adaptado e os quadrados vermelhos são os resultados obtidos com o método de Crank-Nicolson.

de resposta da magnetização do sistema frente ao pulso de rotação. Tal trancamento rígido com o dobro do período do pulso representa uma quebra da simetria de translação temporal do sistema, confirmando que ele se encontra na fase de cristal temporal [30]. Se comparado com os resultados da Seção anterior, não se pode concluir definitivamente que o sistema submetido ao protocolo de potencial J_α oscilante apresentou um regime de cristal temporal porque a robustez da frequência de resposta do sistema $\omega_R = \frac{\omega_D}{2}$ não foi demonstrada. Para isso a implementação de um desvio do protocolo do potencial oscilante deveria ser definida, o que ainda é uma questão em aberto, diferentemente do desvio φ do ângulo de π radianos definido para o pulso de rotação tratado nesta Seção.

Capítulo 4

Conclusões

Neste trabalho um estudo da dinâmica do modelo de Heisenberg homogêneo e isotrópico foi feito em diferentes situações. Foram definidas no Capítulo 2 as quantidades físicas usadas para caracterizar o sistema: fidelidade $F(t)$ e magnetização $m(t)$. Com isso o seu comportamento foi estudado num cenário de poucas e de muitas partículas para se entender como estas propriedades escalam com o tamanho do sistema em particular. A representação reduzida possível por causa da relação de comutação do Hamiltoniano de Heisenberg H_s com a projeção do *spin* total do sistema na direção z $S_z^{(T)}$ é valiosa na generalização dos estudos de H_s para um cenário de mais partículas, pois para determinadas escolhas para o estado inicial do sistema, pode se evitar o aumento exponencial do espaço de Hilbert do sistema com o número de partículas.

O estudo da fidelidade foi útil como uma preparação para a análise da probabilidade de se encontrar uma impureza nas bordas do sistema $P(t)$ quando o potencial J_α oscilante foi analisado no Capítulo 3. Observáveis como a $F(t)$ são importantes em estudos de computação quântica pois fornecem uma visualização fácil de se o sistema encontra-se num determinado estado quântico desejado; no entanto, a sua relação com o Hamiltoniano torna-se cada vez mais complexa à medida que o tamanho do sistema cresce. Isso foi bem mostrado nos módulos quadrados de sua transformada de Fourier $|F(\omega)|^2$, mostrados nas Figuras 2.1b, 2.4, 2.5b e 2.5d, em que três problemas no reconhecimento dos picos de $|F(\omega)|^2$ com as energias da cadeia de *spin* foram identificados. Dois desses problemas dizem respeito ao limite de resolução dos picos e ao seu discernimento de ruídos oriundos da integração numérica usada para se obter $F(\omega)$. Apesar desses problemas poderem ser teoricamente contornados com um refinamento do método numérico de integração, haverá um limite experimental de resolução e discernimento para uma observação direta desses picos que não poderá ser contornado. O terceiro problema se refere justamente à natureza desses picos, pois, como eles são resultado de uma subtração de energias, eles podem se sobrepor mesmo para energias não degeneradas.

Após esse estudo preliminar, dependência temporal periódica e anisotropia foram introduzidas no Hamiltoniano no Capítulo 3. O primeiro caso tratado nesse Capítulo foi o potencial J_α central oscilante no Hamiltoniano de Heisenberg de quatro partículas com uma anisotropia ligada a interações do tipo Ising. No estudo da impureza, o observável $P(t)$ definido em (3.1.4) foi introduzido para o estudo de como essa impureza se desloca na cadeia ao longo do tempo. À medida que o parâmetro de anisotropia Δ crescia, uma resposta sub-harmônica se tornava mais evidente mesmo para diferentes frequências do potencial de *driving* escolhido como visto nas Figuras 3.1.

Esse comportamento motivou a investigação do espectro de potência de $P(t)$, $S(\omega_R)$, que encontrou uma

relação simples aplicável a ele, descrita em (3.1.20), válida para todos os observáveis semelhantes a $P(t)$ como descrito em (3.1.21). Esse resultado foi uma validação da teoria de Floquet para o tratamento desse tipo de Hamiltonianos pois ela forneceu o fundamento básico para obtê-lo. (3.1.20) também revelou uma dinâmica intrínseca nas quasienergias de Floquet para o sistema que se tornava cada vez mais evidente à medida que a anisotropia no Hamiltoniano se tornava mais dominante, como mostrado nas Figuras 3.2.

Após o estudo do potencial J_α oscilante, a atenção deste trabalho se voltou ao pulso de rotação com uma motivação de reproduzir o fenômeno de cristais temporais. Junto com o termo de anisotropia, foi acrescentado um pulso ao Hamiltoniano de Heisenberg de cinco partículas que primeiramente girava os *spins* do sistema num ângulo de π radianos. Isso representa uma violação da relação de comutação de H_s com $S_z^{(T)}$, o que provocou uma dinâmica na magnetização do sistema. Nesse caso, essa dinâmica é uma oscilação com o dobro do período do *driving* como mostrado na Figura 3.3c. Quando esse pulso foi feito com um pequeno desvio φ do ângulo de π radianos, foi constatado que para grandes valores de Δ , o batimento introduzido na magnetização, mostrado na Figura 3.3d pela imperfeição retornava a uma oscilação simples, caracterizando a fase de cristal temporal sem a necessidade da introdução de desordem ou de interações de muitos corpos, na linha de pensamento de [31].

Os próximos passos a serem tomados a partir deste trabalho podem incluir a extensão das observações feitas no Capítulo 3 para o caso de muitas partículas. A generalização do pulso de rotação não apresenta problemas conceituais, entretanto apresenta um problema de implementação, visto que o Hamiltoniano do sistema não comuta mais com $S_z^{(T)}$ forçando o uso de todo o espaço de Hilbert para a descrição do sistema. Já a generalização do potencial J_α oscilante já levanta mais discussões teóricas, visto que uma aplicação rigorosa da definição de $J_i(t)$ em (3.1.2) pode não garantir uma manutenção escalável das propriedades do sistema investigadas na Seção 3.1.

Há ainda outra possibilidade de ampliação dos tópicos investigados neste TCC, motivada pelos experimentos recentes realizados pelo grupo do Professor L. Fallani [36]. Ela consiste em aumentar o espaço interno dos constituintes da cadeia de *spin* e estudar sistemas com simetria $SU(n)$. Essas duas possibilidades de generalização vistas neste Capítulo, foram escolhidas justamente por se tratarem de extensões naturais e inéditas dos temas aqui tratados podendo ser assuntos de futuros trabalhos.

Apêndice A

Material Complementar

A.1 A RELAÇÃO DE COMUTAÇÃO DE $S_z^{(T)}$ COM H_s

Nesta seção será estudada a relação de comutação dos Hamiltonianos estudados ao longo deste TCC com o operador *spin* total na direção z , definido no Capítulo 2 como:

$$S_z^{(T)} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_z^{(i)} \quad (\text{A.1.1})$$

Começando pelo Hamiltoniano H_s não perturbado apresentado no Capítulo 2 por (2.0.1) mas para um caso inomogêneo, o comutador $C = [H_s, S_z^{(T)}]$ será¹:

$$C = H_s S_z^{(T)} - S_z^{(T)} H_s \quad (\text{A.1.2})$$

$$C = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{k=1}^N J_j \left\{ \left[\sigma_x^{(j)} \sigma_x^{(j+1)} \sigma_z^{(k)} - \sigma_z^{(k)} \sigma_x^{(j)} \sigma_x^{(j+1)} \right] + \left[\sigma_y^{(j)} \sigma_y^{(j+1)} \sigma_z^{(k)} - \sigma_z^{(k)} \sigma_y^{(j)} \sigma_y^{(j+1)} \right] + \dots \right. \\ \left. \dots + \left[\sigma_z^{(j)} \sigma_z^{(j+1)} \sigma_z^{(k)} - \sigma_z^{(k)} \sigma_z^{(j)} \sigma_z^{(j+1)} \right] \right\} \quad (\text{A.1.3})$$

$$C = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{k=1}^N J_j \left\{ \left[\sigma_x^{(j)} \sigma_x^{(j+1)}, \sigma_z^{(k)} \right] + \left[\sigma_y^{(j)} \sigma_y^{(j+1)}, \sigma_z^{(k)} \right] + \left[\sigma_z^{(j)} \sigma_z^{(j+1)}, \sigma_z^{(k)} \right] \right\} \quad (\text{A.1.4})$$

$$C = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{k=1}^N J_j \left\{ \sigma_x^{(j)} \left[\sigma_x^{(j+1)}, \sigma_z^{(k)} \right] + \left[\sigma_x^{(j)}, \sigma_z^{(k)} \right] \sigma_x^{(j+1)} + \sigma_y^{(j)} \left[\sigma_y^{(j+1)}, \sigma_z^{(k)} \right] + \dots \right. \\ \left. \dots + \left[\sigma_y^{(j)}, \sigma_z^{(k)} \right] \sigma_y^{(j+1)} + \sigma_z^{(j)} \left[\sigma_z^{(j+1)}, \sigma_z^{(k)} \right] + \left[\sigma_z^{(j)}, \sigma_z^{(k)} \right] \sigma_z^{(j+1)} \right\} \quad (\text{A.1.5})$$

Mas como $[\sigma_i^{(p)}, \sigma_j^{(q)}] = 2i\delta_{pq}\epsilon_{ijk}\sigma_k^{(p)}$, em que ϵ_{ijk} é o tensor de Levi-Civita, (A.1.5) pode ser reescrito para:

$$C = -\frac{i}{2} \sum_{j=1}^{N-1} J_j \left\{ \sigma_x^{(j)} \sigma_y^{(j+1)} + \sigma_y^{(j)} \sigma_x^{(j+1)} - \sigma_x^{(j)} \sigma_y^{(j+1)} - \sigma_y^{(j)} \sigma_x^{(j+1)} \right\} = \hat{0} \quad (\text{A.1.6})$$

¹A relação de comutação de $S_z^{(T)}$ com as identidades em (2.0.1) é trivial. Com isso pode se perceber que essa demonstração também é aplicável ao Hamiltoniano (1.0.1) apresentado na Introdução.

A demonstração dessa relação de comutação também é capaz de mostrar que se interações do tipo Ising forem acrescentadas, H_s continuaria comutando com $S_z^{(T)}$ pois elas acrescentariam termos que são dados por expressões idênticas às componentes na componente z de H_s . Com isso, essa expressão também demonstra que o Hamiltoniano dependente do tempo usado no tratamento do potencial J_α oscilante também comuta com $S_z^{(T)}$ para qualquer tempo, visto que a homogeneidade do Hamiltoniano não a afeta. De fato a única condição que H_s precisa atender para comutar com $S_z^{(T)}$ é ser isotrópico nas direções x e y , não necessariamente na direção z , compatível com modelos XXX ou XXZ . Como essa a relação de comutação entre as matrizes de Pauli vêm da invariância rotacional em três dimensões, a relação de comutação de $S_z^{(T)}$ com H_s continua válida mesmo para outros espaços de *spin*.

A partir dessas considerações, pode-se perceber que a relação de comutação de $H(t)$ com o operador $S_z^{(T)}$ para o pulso de rotação, dependerá somente do comutador entre $V(t)$, descrito no Capítulo 3, e $S_z^{(T)}$:

$$C(t) = V(t)S_z^{(T)} - S_z^{(T)}V(t) \Rightarrow C(t) = \frac{f(t)}{4} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \theta_j \left\{ \sigma_x^{(j)} \sigma_z^{(k)} - \sigma_z^{(k)} \sigma_x^{(j)} \right\} \quad (\text{A.1.7})$$

em que:

$$f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - nT) \quad (\text{A.1.8})$$

com T sendo o período do potencial de *driving*. Com isso e aplicando a relação de comutação entre as matrizes σ de diferentes sítios e direções, (A.1.7) se reduz a:

$$C(t) = \frac{f(t)}{4} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \theta_j \left[\sigma_x^{(j)}, \sigma_z^{(k)} \right] \Rightarrow C(t) = -\frac{if(t)}{4} \sum_{j=1}^N \theta_j \sigma_y^{(j)} \quad (\text{A.1.9})$$

Como esse comutador só não é nulo nos instantes $t = nT$, o padrão oscilante com pulsos quadrados na magnetização do sistema se justifica na Seção 3.2.

A.2 O MÉTODO DE CRANK-NICOLSON

Como já visto na Introdução, o método de Crank-Nicolson é um método numérico para se encontrar uma solução para a equação de Schrödinger. Contextos normais de sua aplicação incluem equações diferenciais no espaço e no tempo, como a resolução de equações de transmissão de calor [32], mostrada na proposição original desse método ou, mais recentemente, da equação ou de Gross-Pitaevskii [34]. Ainda assim, não é sem precedentes o uso desse método para a resolução de equações para equações diferenciais apenas temporais em espaços de Hilbert finitos como os trabalhados aqui neste TCC [33]. Adaptando de [37], a evolução temporal do sistema pode ser dada, por:

$$i\partial_t |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad (\text{A.2.1})$$

O primeiro ponto a ser abordado na solução dessa equação é a discretização da derivada temporal. Para o tempo discretizado como $t = t_0 + n\delta t$, a equação de Schrödinger associada se torna, adotando um método explícito de discretização:

$$i \frac{|\Psi\rangle_{n+1} - |\Psi\rangle_n}{\delta t} = H(t) |\Psi\rangle_n \quad (\text{A.2.2})$$

em que $|\Psi\rangle_n = |\Psi(t_0 + n\delta t)\rangle$. Dessa forma, isolando $|\Psi\rangle_{n+1}$:

$$|\Psi\rangle_{n+1} = (I - iH(t)\delta t)|\Psi\rangle_n \quad (\text{A.2.3})$$

Também podemos escrever $|\Psi\rangle_{n+1} = U(n+1, n)|\Psi\rangle_n$, ou seja, o operador evolução temporal encontrado é $U(n+1, n) = (I - iH(t)\delta t)$. Esse operador é unitário em primeira ordem, visto que:

$$U(n+1, n)^\dagger U(n+1, n) = (I + iH(t)\delta t)(I - iH(t)\delta t) \Rightarrow U(n+1, n)^\dagger U(n+1, n) = I + [H(t)]^2 \delta t^2 \quad (\text{A.2.4})$$

$$U(n+1, n)^\dagger U(n+1, n) = I + \vartheta(\delta t^2) \quad (\text{A.2.5})$$

Entretanto a evolução temporal obtida com esse operador é instável para qualquer $\delta t > 0$ que se tome. Isso pode ser visto ao se calcular os autovalores de $U(n+1, n)$ em (A.2.3), que são:

$$\lambda_j(t) = 1 - iE_j(t)\delta t \Rightarrow \lambda_j(t) \approx T \left[e^{-i \int_t^{t+\delta t} E_j(t) dt} \right] \quad (\text{A.2.6})$$

Esses autovalores seriam a aproximação em primeira ordem do operador evolução temporal obtido com a série de Dyson e, devido a sua estrutura, devem ter norma unitária. Impor essa condição aos autovalores $\lambda_j(t)$ irá impor uma restrição a δt de tal forma que:

$$1 + E_j(t)^2 \delta t^2 = 1 \Rightarrow \delta t^2 = 0 \quad (\text{A.2.7})$$

Ou seja, para qualquer que seja o passo temporal tomado, a norma da solução não é preservada e como $|\lambda_j|^2 \geq 1$, a solução tende a divergir.

Uma forma de contornar esse problema, seria usar um método implícito de se obter a solução de (A.2.1), aplicando o Hamiltoniano também a $|\Psi\rangle_{n+1}$:

$$i \frac{|\Psi\rangle_{n+1} - |\Psi\rangle_n}{\delta t} = H(t) |\Psi\rangle_{n+1} \quad (\text{A.2.8})$$

Isolando para $|\Psi\rangle_{n+1}$, obtém-se:

$$|\Psi\rangle_{n+1} = (I + iH(t)\delta t)^{-1} |\Psi\rangle_n \quad (\text{A.2.9})$$

Nesse caso, os autovalores do operador evolução temporal são:

$$\lambda_j(t) = \frac{1}{1 + iE_j(t)\delta t} \Rightarrow \lambda_j(t) \approx T \left[e^{-i \int_t^{t+\delta t} E_j(t) dt} \right] \quad (\text{A.2.10})$$

Apesar de ainda haver o mesmo problema de antes com a norma da solução, com essa abordagem, a solução tende a 0 ao invés de divergir.

O método de Crank-Nicolson representa um refinamento dessas duas abordagens para a solução de (A.2.1) ao combiná-las tomando o lado direito como uma média das aproximações explícita e implícita.

$$i \frac{|\Psi\rangle_{n+1} - |\Psi\rangle_n}{\delta t} = \frac{H(t)}{2} (|\Psi\rangle_n + |\Psi\rangle_{n+1}) \quad (\text{A.2.11})$$

Isolando $|\Psi\rangle_{n+1}$, $U(n+1, n)$ fica:

$$U(n+1, n) = \left(I + \frac{iH(t)\delta t}{2} \right)^{-1} \left(I - \frac{iH(t)\delta t}{2} \right) \quad (\text{A.2.12})$$

com autovalores

$$\lambda_j(t) = \frac{1 - \frac{iE_j(t)\delta t}{2}}{1 + \frac{iE_j(t)\delta t}{2}} \Rightarrow \lambda_j(t) \approx T \left[e^{-i \int_t^{t+\delta t} E_j(t) dt} \right] \quad (\text{A.2.13})$$

ainda como aproximações de primeira ordem dos autovalores de $U(n+1, n)$ obtido com a série de Dyson. Mas dessa vez:

$$|\lambda_j(t)|^2 = \frac{1 + \frac{[E_j(t)]^2 \delta t^2}{4}}{1 + \frac{[E_j(t)]^2 \delta t^2}{4}} \Rightarrow |\lambda_j(t)|^2 = 1 \quad (\text{A.2.14})$$

Portanto ao se combinar uma abordagem explícita com uma abordagem implícita, o método de Crank-Nicolson fornece uma solução numérica para a equação de Schrödinger dependente do tempo usando apenas aproximações de primeira ordem no tempo, e ainda consegue preservar a norma da solução.

A.3 O MÉTODO DE FLOQUET

O método de Floquet é um *ansatz* para se encontrar uma solução exata para a equação de Schrödinger dado um Hamiltoniano periódico dependente do tempo de período T . Ele é baseado no teorema de Floquet [38] [39], que fornece uma base dependente do tempo na qual a solução do sistema pode ser expressa. Dessa forma, se $H(t+T) = H(t)$ for uma matriz quadrada de dimensão m , $|\Psi(t)\rangle$ pode ser escrita como [29]:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^m c_j e^{-i\epsilon_j t} |\Phi_j(t)\rangle \quad (\text{A.3.1})$$

em que $|\Phi_j(t+T)\rangle = |\Phi_j(t)\rangle$. Em (A.3.1), $\{|\Phi_j(t)\rangle\}$ constitui uma base ortonormal para o sistema, ϵ_j são as chamadas quasienergias do sistema e $c_j = \langle \Phi_j(0) | \Psi(0) \rangle$. Os expoentes na exponencial em (A.3.1) também são tradicionalmente chamados de modos de Floquet. Inserindo (A.3.1) na equação de Schrödinger, um análogo à equação de Schrödinger independente do tempo surge:

$$(-i\partial_t + H(t))|\Psi(t)\rangle = \epsilon_j |\Psi(t)\rangle \Rightarrow \mathcal{H}(t)|\Psi(t)\rangle = \epsilon_j |\Psi(t)\rangle \quad (\text{A.3.2})$$

Portanto, apesar de ϵ_j não ser uma autoenergia de $H(t)$, ela ainda se relaciona com a evolução temporal do sistema por ser os autovalores de $\mathcal{H}(t)$. Apesar de providenciar maior semelhança com as equações espaciais obtidas da equação de Schrödinger, a resolução de (A.3.2) pode ainda ser difícil de ser obtida analiticamente, de forma que uma solução numérica se faz necessária. Entretanto, por causa da periodicidade da base, (A.3.2) só precisa ser resolvida ao longo de um período para se encontrar soluções para qualquer tempo, sendo uma grande vantagem em relação a um método numérico direto.

A solução de (A.3.2) pode ser obtida ao se observar o efeito da aplicação do operador evolução temporal $U(t+T, t)$ no intervalo de um período sobre um dos elementos da base de (A.3.1):

$$U(t+T, t) |\Phi_\alpha(t)\rangle = e^{-i\epsilon_\alpha(t+T)} |\Phi_\alpha(t+T)\rangle \quad (\text{A.3.3})$$

Mas como $|\Phi_\alpha(t)\rangle$ é periódica de período T , então $|\Phi_\alpha(t)\rangle$ é autoestado do operador evolução temporal sobre um período de autovalor $\mu_j = e^{-i\epsilon_j(t+T)}$. Dessa forma, a partir do operador $U(T,0)$ as quasienergias ϵ_j podem ser determinadas por:

$$\epsilon_j = i \frac{\arg(\mu_j)}{T} \quad (\text{A.3.4})$$

e a diagonalização de $U(t+T, t)$ ao longo de um período fornece a base dependente do tempo a ser usada em (A.3.1) para a obtenção da solução num tempo arbitrário.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Prestes Tonel, *Propriedades Algébricas de um modelo t-J integrável com impurezas*, 1999.
- [2] P. Fendley, *Modern Statistical Mechanics*, <http://users.ox.ac.uk/~phys1116/book.html>, 2018.
- [3] D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson international edition, Pearson Prentice Hall, 2005.
- [4] H. Bethe, *Zeitschrift für Physik* **71**, 205 (1931).
- [5] O. V. Marchukov, A. G. Volosniev, M. Valiente, D. Petrosyan, and N. T. Zinner, *Nature Communications* **7**, 1 (2016).
- [6] M. Iversen, R. E. Barfknecht, A. Foerster, and N. T. Zinner, *arXiv e-prints*, arXiv:1903.10538 (2019).
- [7] D. Porras and J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 207901 (2004).
- [8] R. Blatt and C. F. Roos, *Nature Physics* **8**, 277 (2012).
- [9] A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga, and B. Hillebrands, *Nature Physics* **11**, 453 (2015).
- [10] A. V. Chumak, A. A. Serga, and B. Hillebrands, *Nature Communications* **5**, 4700 (2014).
- [11] S. J. Blundell and F. L. Pratt, *Journal of Physics: Condensed Matter* **16**, R771 (2004).
- [12] E. A. Zwanenburg et al., *Reviews of Modern Physics* **85**, 961 (2013).
- [13] M. Mourigal et al., *Nature Physics* **9**, 435 (2013).
- [14] S. Sahling et al., *Nature Physics* **11**, 255 (2015).
- [15] R. Fazio and H. van der Zant, *Physics Reports* **355**, 235 (2001).
- [16] P. Gambardella et al., *Nature* **416**, 301 (2002).
- [17] C. F. Hirjibehedin, C. P. Lutz, and A. J. Heinrich, *Science* **312**, 1021 (2006).
- [18] A. A. Khajetoorians et al., *Nature Physics* **8**, 497 (2012).
- [19] A. A. Khajetoorians, J. Wiebe, B. Chilian, and R. Wiesendanger, *Science* **332**, 1062 (2011).
- [20] J. S. Caux, F. Essler, and U. Löw, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **68**, 1 (2003).
- [21] O. Breunig et al., *Science Advances* **3**, 1 (2017).

- [22] N. E. Palaiodimopoulos, I. Brouzos, N. Georgoulea, F. K. Diakonou, and P. A. Kalozoumis, *Physical Review A* **99**, 1 (2019).
- [23] R. E. Barfknecht, A. Foerster, and N. T. Zinner, *Physical Review A* **95**, 1 (2017).
- [24] R. E. Barfknecht, A. Foerster, and N. T. Zinner, *New Journal of Physics* **20**, 0 (2018).
- [25] S. Bose, *Contemporary Physics* **48**, 13 (2007).
- [26] D. Petrosyan, G. M. Nikolopoulos, and P. Lambropoulos, *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics* **81**, 1 (2010).
- [27] S. Pal, N. Nishad, T. S. Mahesh, and G. J. Sreejith, *Physical Review Letters* **120**, 180602 (2018).
- [28] J. Zhang et al., *Nature* **543**, 217 (2017).
- [29] M. Holthaus, A. Eckardt, and E. Anisimovas, *New J. Phys* **17**, 93039 (2015).
- [30] N. Y. Yao, A. C. Potter, I. D. Potirniche, and A. Vishwanath, *Physical Review Letters* **118**, 030401 (2017).
- [31] R. E. Barfknecht, S. E. Rasmussen, A. Foerster, and N. T. Zinner, *Physical Review B* **99**, 1 (2019).
- [32] J. Crank and P. Nicolson, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **43**, 50 (1947).
- [33] M. Murphy, S. Montangero, V. Giovannetti, and T. Calarco, *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics* **82** (2010).
- [34] P. Muruganandam and S. K. Adhikari, *Computer Physics Communications* **180**, 1888 (2009).
- [35] J. J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 2 edition, 2017.
- [36] G. Pagano et al., *Nature Physics* **10**, 198 (2014).
- [37] S. E. Koonin and D. Meredith, *Computational Physics (FORTRAN Version); Disk Enclosed*, Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., Boston, MA, USA, 1st edition, 1990.
- [38] G. Floquet, *Annales Scientifiques de l'É.N.S.* **12**, 47 (1883).
- [39] G. Teschl, *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems*, Graduate studies in mathematics, American Mathematical Soc., 2012.