

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Rafael Bentes de Sales

**Testando os limites do atalho para a adiabaticidade da
ação mínima**

São Carlos

2024

Rafael Bentes de Sales

**Testando os limites do atalho para a adiabaticidade da
ação mínima**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Programa de Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Krissia Zawadzki

**São Carlos
2024**

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

RESUMO

DE SALES, R. B. **Testando os limites do atalho para a adiabaticidade da ação mínima.** 2024. 21p. Trabalho de conclusão de curso - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2024.

O problema de construir campos externos de controle para suprimir erros na computação quântica é, essencialmente, similar ao realizado em máquinas térmicas quânticas para garantir que processos adiabáticos possam ser executados em tempos finitos. Os chamados atalhos para a adiabaticidade (shortcuts-to-adiabaticity - STA), uma classe especializada de controles quânticos, são projetados para suprimir transições indesejadas que impedem os estágios adiabáticos de um ciclo termodinâmico de serem ideais. Uma dificuldade em construir esses controles externos para sistemas de muitos corpos, particularmente na criticalidade, é o fechamento dos gaps espectrais. Uma proposta recente de obter o controle ao minimizar a ação adiabática mostrou resultados promissores para os modelos de Landau-Zener e Ising com campo transversal. Este projeto pretende estender essa abordagem para outros modelos. Focando na fidelidade do estado final desejado, comparamos a precisão do STA da mínima ação com controles paramétricos simples definidos a priori e analisamos o desempenho termodinâmico em termos da distribuição de trabalho.

Palavras-chave: Controle quântico. Fases críticas. Termodinâmica Quântica.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	4
2	ADIABATICIDADE E CONTROLE QUÂNTICO	6
2.1	Condição de adiabaticidade	7
2.2	Força contra-diabática	8
2.3	O atalho para a adiabaticidade da ação mínima	8
2.4	Figuras de mérito	9
3	MODELOS DE MATÉRIA CONDENSADA	10
3.1	Modelo de Landau-Zener	10
3.2	Modelo de Ising de campo transversal	10
3.3	Cadeia de Kitaev	11
4	RESULTADOS	13
5	CONCLUSÃO	20
	REFERÊNCIAS	21

1 INTRODUÇÃO

No contexto do intenso desenvolvimento tecnológico atual, a miniaturização de tecnologias clássicas alcançou escalas suficientemente pequenas para que efeitos quânticos tornem-se relevantes. Avanços nas últimas décadas levaram ao advento da segunda revolução quântica (1), impulsionada pela demanda por novas tecnologias quânticas com vantagens em processamento e sensoriamento de informação. Em processamento, destaca-se a computação quântica, cuja vantagem já foi demonstrada em alguns algoritmos. No entanto, um empecilho enfrentado na implementação de algoritmos quânticos efetivamente vantajosos está relacionado à limitação nas escalas de tempo para a sua execução. Interações indesejadas com o ambiente impactam a duração da estabilidade de bits quânticos – os qubits –, levando ao fenômeno de decoerência em tempos curtos. No estágio atual, circuitos mais complexos tornam-se experimentalmente irrealizáveis.

Dessa forma, surge a necessidade de formas de contornar a decoerência. Uma estratégia para minimizar o efeito do ambiente externo é diminuir a temperatura. Porém, existe um limite inferior para o qual o resfriamento ainda não blindava completamente os qubits de decoerência. Ao ser alcançado, é necessário aplicar ferramentas de controle. Esses controles são utilizados para levar um estado quântico em outro específico a um tempo finito desejado. No caso da computação quântica, a ideia é assegurar que a informação quântica codificada em um estado quântico genérico, que nada mais é do que uma mistura estatística descrita pela matriz de densidade ρ , não seja corrompida. Na prática, a corrupção acontece quando as populações – os elementos diagonais de ρ – mudam devido a transições internas entre níveis energéticos do sistema mediadas pela interação indesejada com o ambiente. A cada uma das possíveis mudanças de população, existem formas diferentes de controle quântico. Neste trabalho, iremos nos ater a controlar mudanças internas de população, ou seja, impedir transições eletrônicas.

Manter um qubit no estado desejado se traduz em realizar um processo de forma adiabática. Daí, surge uma conexão entre a computação quântica e a termodinâmica quântica: evitar a decoerência gerada pelo contato com o ambiente externo se traduz em otimizar, com base em custo energético, a dinâmica de um sistema aberto. Assim, os controles quânticos surgem como alternativa para realizar a dinâmica em tempo finito, evitando ao máximo transições indesejadas.

Sabe-se que correlações em sistemas quânticos são um recurso valioso e relevante para a extração de trabalho (2), o que inspirou diversos estudos de máquinas térmicas baseadas em modelos de muitos corpos como fluido de trabalho (*working mediums*). Porém, apesar de aumentar a energia extraída, utilizar sistemas de muitos corpos acarreta em um aumento exponencial do tempo necessário para atingir a adiabaticidade, pois ele escala

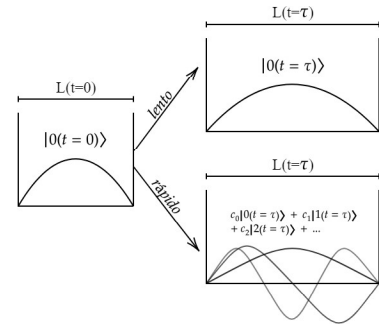
com o tamanho do sistema (3). Esse efeito é ainda mais acentuado na presença de fases críticas, características nesses modelos. De acordo com o teorema adiabático, no ponto crítico, o fechamento do gap faria com o que processo fosse mais lento ainda. Isso indica novamente a indispensabilidade do uso de controles quânticos adiabáticos, chamados de atalhos para a adiabaticidade (*shortcuts to adiabaticity - STA* (4)). Existem diversas propostas destes métodos de controle quântico que almejam garantir a adiabaticidade sob determinadas condições, e uma proposta muito promissora, objeto de estudo deste trabalho, é a do atalho para a adiabaticidade da ação mínima (*minimal action shortcut to adiabaticity-MA-STA*, (5)).

Para o estudo desse STA, serão utilizados três modelos de matéria condensada. Dois deles foram estudados na referência original (5) e tiveram seus resultados reproduzidos e estendidos: os modelos de Landau-Zener e de Ising de campo transversal. O terceiro é a cadeia de Kitaev (6), que possui fases de interesse da computação quântica e ainda não teve a dinâmica sob o MA-STA testada.

2 ADIABATICIDADE E CONTROLE QUÂNTICO

Teorema adiabático: Dado um autoestado inicial $|n(0)\rangle$ de um Hamiltoniano $H(t=0)$, se a taxa de variação $\dot{H}(t)$ for suficientemente pequena, após a evolução temporal o sistema terminará no autoestado correspondente $|n(\tau)\rangle$ de $H(t=\tau)$ (figura 1). O tempo suficientemente lento, chamado de tempo adiabático, é uma escala para a dinâmica e pode ser estimado como $\tau_a \approx 1/\omega_{min}$, em que ω_{min} é a frequência associada ao menor gap de energia partindo do nível n . Por outro lado, uma dinâmica rápida resulta em transições para outros níveis, tão mais prováveis quanto menor o gap associado.

Figura 1 – A escala de tempo altera o resultado final da dinâmica.



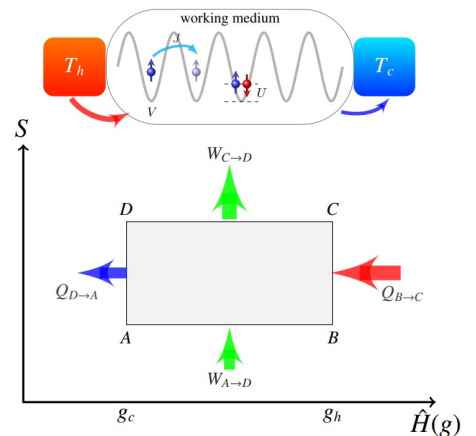
Fonte: Autoria própria

Uma aplicação importante do teorema adiabático em termodinâmica quântica são ciclos para implementar máquinas térmicas *quantum heat engines (QHE)* (7). Um bom exemplo é o *Ciclo de Otto* (figura 2), composto de dois processos adiabáticos e duas termalizações.

A extração de trabalho é implementada por meio de parâmetros de controle que modificam o Hamiltoniano $H(t)$, levando $\rho(t=0)$ em $\rho(t=\tau)$. Quando o sistema está isolado esta evolução é feita de forma unitária, mas considerando interações com o ambiente ou banho térmico, podem ocorrer trocas energéticas e de partículas. Para estudar essas trocas, vale a conservação de energia $dU = dQ + dW$, onde, na termodinâmica quântica a variação de energia interna dada por $dU = d_t[H(t), \rho(t)]$ é decomposta em calor $dQ = H[d_t\rho]$ e trabalho $dW = [d_tH]\rho$.

Observe que, conforme já mencionado, o calor é associado à mudança das populações de $\rho(t)$. Quanto ao trabalho, para quantificar sua extração de (ou injeção em), é preciso estudar a dinâmica energética induzida por $H(t)$ entre 0 e τ , pois, nesse intervalo, o sistema passa por transições entre todos seus autoestados. A contribuição de cada transição é proporcional à população inicial p_n^0 dos autoestados $|\psi_n\rangle$ de $H(t=0)$

Figura 2 – Ciclo de Otto.



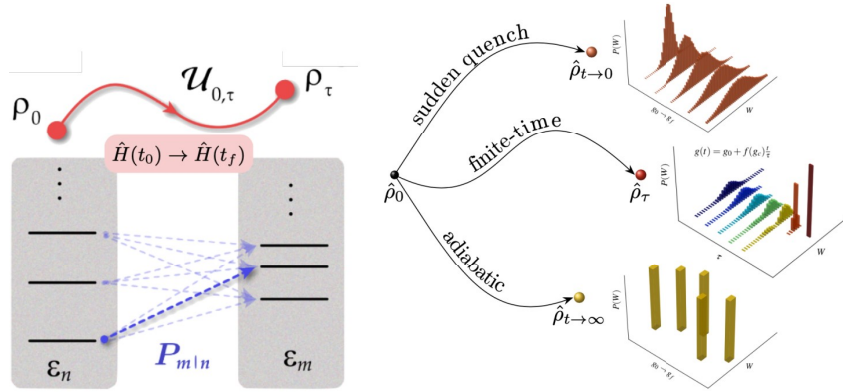
Fonte: ZAWADZKI

(aqui, serão respectivos ao estado de Gibbs à temperatura T) e à probabilidade condicional $p_{m \leftarrow n}^\tau = |\langle \phi_m | U(\tau) | \psi_n \rangle|^2$ de o estado evoluído colapsar em um autoestado $|\phi_m\rangle$ de $H(t = \tau)$, onde $U(t) = \mathcal{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H(t')}$ é o operador de evolução total. Assim, para obter o trabalho médio $\langle W \rangle$ e suas flutuações é necessário utilizar a estatística da distribuição de trabalho:

$$P(\omega) = \sum_{n,m} p_n^0 p_{m \leftarrow n}^\tau \delta(\omega - (E_m - E_n)). \quad (2.1)$$

Esta distribuição possui picos localizados nas frequências de transição entre os níveis de energia final E_n e inicial E_m . A dinâmica adiabática é caracterizada por picos isolados, e a não adiabática por gaussianas devido a excitações para níveis próximos. Aqui, cabe comentar que este protocolo de medição de trabalho, chamado de *two-point measurement* (medição de dois pontos), não captura a contribuição energética associada a coerências na base de energias, assim, ele só pode ser utilizado quando o estado inicial é um estado de equilíbrio.

Figura 3 – O possível trabalho extraído depende das transições entre os autoestados dos Hamiltonianos inicial e final. Mudanças súbitas ou lentas o suficiente resultam em $P(\omega)$ descritas respectivamente como uma Gaussiana ou deltas. A tempo finito, os formatos de $P(\omega)$ são mais complexos (8).



Fonte: ZAWAZDKI (8)

2.1 Condição de adiabaticidade

Em termodinâmica quântica, garantir a adiabaticidade consiste em evitar transições indesejadas entre níveis energéticos. Matematicamente, isso é visto ao estudarmos a evolução de um estado $|\psi(t)\rangle$ com a equação de Schrödinger dependente do tempo (2.2):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle. \quad (2.2)$$

Para um instante t fixo, "congelado" no tempo, é válida a equação de Schrödinger independente do tempo (2.3) para autoestados $|\psi_n(t)\rangle$:

$$H(t) |\psi_n(t)\rangle = E_n(t) |\psi_n(t)\rangle. \quad (2.3)$$

A partir da combinação linear $|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\psi_n(t)\rangle$, constrói-se um Ansatz para $|\psi(t)\rangle$, onde $C_m(t)E_m(t) = i\hbar \left(\dot{C}_m(t) + C_m(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle + \sum_{n \neq m} C_n(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle \right)$. Variações temporais do estado contidas no primeiro e segundo termos estão associadas a trabalho, enquanto transições entre estados diferentes, embutidas no terceiro, relacionam-se com calor. Uma dinâmica adiabática exige que estes últimos se anulem, assim, os coeficientes são dados por $C_m(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt' - \int_0^t \langle \psi_m(t') | \dot{\psi}_m(t') \rangle dt'\right\}$. Portanto, na dinâmica adiabática, os autoestados evoluídos somente ganham fases. O termo $-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt'$ é chamado de fase dinâmica e o termo $-\int_0^t \langle \psi_m(t') | \dot{\psi}_m(t') \rangle dt'$ é uma fase geométrica chamada de fase de Barry, que pode ser observada experimentalmente. Além disso, da equação independente do tempo (2.3), notando que, para $m \neq n$:

$$\langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle = \frac{\langle \psi_m(t) | \dot{H}(t) | \psi_n(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}, \quad (2.4)$$

temos que a adiabaticidade pode ser garantida se a evolução temporal for lenta o suficiente ($\dot{H}(t) \rightarrow 0$) ou se o gap entre os níveis n e m for grande o suficiente ($E_n(t) - E_m(t) \rightarrow \infty$).

2.2 Força contra-diabática

A discussão anterior sugere que a adição de um termo extra proporcional a $\langle \psi(m(t')) | \psi(n(t')) \rangle$ no Hamiltoniano original permite anular transições não-adiabáticas. Dado $H(t)$ e seus autoestados instantâneos, deseja-se encontrar $\tilde{H}(t)$ tal que $|\psi_n(t)\rangle = U(t) |\psi_n(0)\rangle = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' - \int_0^t \langle \psi_n(t') | \dot{\psi}_n(t') \rangle dt'\right\} |\psi_n(0)\rangle$. Deve-se, então, resolver a equação $\tilde{H}(t)U(t) = i\hbar \partial_t (U(t))$ para o operador de evolução temporal, cuja forma deve ser $U(t) = \sum_n |\psi_n(t)\rangle \langle \psi_n(0)|$. Assim, encontra-se que $\tilde{H}(t) = H(t) + H_{CD}(t)$, onde:

$$H_{CD}(t) = i\hbar \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} \frac{|\psi_m(t)\rangle \langle \psi_m(t) | \dot{H}(t) | \psi_n(t) \rangle \langle \psi_n(t) |}{E_n(t) - E_m(t)} \quad (2.5)$$

é chamado de força contra-diabática (*counter-diabatic drive*).

No entanto, esse STA não é praticável, pois sua construção depende da obtenção do espectro inteiro de $H(t)$. Para sistemas de poucos corpos e estáticos esse procedimento pode ser realizável, mas para sistemas correlacionados de muitos corpos com dependência temporal a solução pode se tornar muito complicada e impraticável experimentalmente. Como mencionado, sistemas críticos apresentam fechamento de gap, gerando divergências no controle. Tentativas de contornar essas dificuldades inspiraram STA's específicos para sistemas correlacionados com fases críticas. Destacaremos a seguir um deles.

2.3 O atalho para a adiabaticidade da ação mínima

O atalho para a adiabaticidade da ação mínima (5), ou *minimal action shortcut to adiabaticity* (MA-STA), é um protocolo baseado na minimização da ação adiabática:

$$S = \int_0^\tau dt \frac{\hbar^2 \|\partial_t H(t)\|^2}{\Gamma^4(t)}, \quad (2.6)$$

em analogia à minimização da ação clássica, sendo τ a duração do protocolo, $\|\cdot\|$ a norma de Frobenius e $\Gamma(t)$ o gap relevante de energia. Em uma transição de fase controlada por $H(t)$, este gap é a diferença de energia entre os estados fundamental e primeiro excitado.

É interessante notar que, conforme já apontado, o tempo mínimo para uma dinâmica ser adiabática escala com o tamanho do sistema, seu perfil de variação e com o inverso dos gaps de energia. A ação adiabática escala com exatamente os mesmos parâmetros.

Após definida a ação adiabática para um dado sistema de interesse, realiza-se o processo de minimização variacional, por meio das equações de Euler-Lagrange, em relação a algum parâmetro $g(t)$ do hamiltoniano que possa ser controlado. Neste trabalho, esse parâmetro representa caminhos possíveis que levam o estado fundamental inicial $|\psi_0(t=0)\rangle$ ao final $|\phi_0(t=\tau)\rangle$, e a minimização ($\delta S/\delta g = 0$) encontra o perfil de rampa $g_{STA}(t)$ que melhor aproxima a dinâmica da adiabaticidade, ou seja, nesse protocolo de controle, ao invés de interferir no tamanho dos gaps ($\Delta \rightarrow \infty$), interfere-se no perfil da rampa ($\partial_t H(t) \rightarrow 0$ perto da criticalidade) para obter $H(g_{STA}, t)$ aproximadamente adiabático.

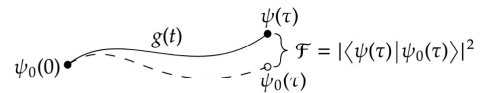
A vantagem desse método é que, ao contrário do protocolo da força contra-adiabática, não é necessário conhecer todo o espectro do hamiltoniano. Ao estimar razoavelmente o gap mais relevante, consegue-se obter um controle efetivo que, a depender das condições experimentais alcançáveis no dado problema, pode ser suficiente. Naturalmente, transições entre o estado fundamental e outros estados podem ocorrer, ainda mais se o tempo de evolução total τ for muito curto. Assim, espera-se que a estimativa do gap seja menos efetiva para obter controle quanto maior o sistema utilizado e menor τ .

2.4 Figuras de mérito

A fidelidade $\mathcal{F} = |\langle \psi(\tau) | \phi_0(\tau) \rangle|^2$ será a figura de mérito utilizada para medir a qualidade de um protocolo, e é dada pela sobreposição do estado final evoluído $|\psi(\tau)\rangle$ com o estado final desejado, $|\phi_0(\tau)\rangle$. A performance do MA-STA em cada modelo será comparada com a performance de uma rampa linear (LR) $g_l(t) = g_0 + (g_\tau - g_0)t/\tau$, comumente utilizada para controle quântico. Também será estudada a dinâmica energética dos protocolos através da distribuição de trabalho, visando entender melhor de que forma a adiabaticidade é induzida.

Além da fidelidade, também exploraremos a distribuição de trabalho $P(W)$, complementando os resultados do artigo original.

Figura 4 – Distância entre $\psi(\tau)$ e $\phi_0(\tau)$ sob $g(t)$.



Fonte: Autoria própria

3 MODELOS DE MATÉRIA CONDENSADA

3.1 Modelo de Landau-Zener

O modelo de Landau-Zener (LZ) descreve, basicamente, um qubit – um sistema de dois níveis, o fundamental, $|0\rangle$, e o excitado $|1\rangle$ – com um gap de energia controlado no tempo. Seu Hamiltoniano é:

$$H_{LZ} = \Delta\sigma^x + g(t)\sigma^z, \quad (3.1)$$

onde Δ é o gap de energia fixo entre os níveis, $g(t)$ um campo externo controlado no tempo, e $\sigma^{x,y,z}$ são as matrizes de Pauli.

Este modelo pode ser facilmente diagonalizado, resultando em autoestados que são combinações lineares de $|0\rangle$ e $|1\rangle$, com autovalores $E_{\pm} = \pm\sqrt{\Delta^2 + g^2(t)}$.

3.2 Modelo de Ising de campo transverso

O modelo de Ising quântico descreve spins interagindo. Uma versão paradigmática desse modelo, o Ising no campo transverso (TFIM - *transverse field Ising model*) descreve uma cadeia de N spins com interações entre primeiros vizinhos na direção z e um campo transverso $g(t)$ na direção x :

$$H_{TFIM} = \sum_{j=1}^N \left[-J\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - g(t)\sigma_j^x \right], \quad (3.2)$$

onde J é a unidade de energia.

No zero absoluto, este sistema apresenta uma fase ordenada para $g(t) < J$ e torna-se paramagnético para $g(t) > J$. Assim, $g(t) = J$ é a transição de fase de interesse. Sob condições periódicas de contorno, os sítios final $j = N$ e inicial $j = 1$ se conectam e há simetria translacional.

A solução exata deste Hamiltoniano é menos trivial, mas pode ser obtida por meio da *transformação de Jordan-Wigner*, que mapeia o Hamiltoniano original em um sistema de férmions sem spin por meio das relações $\sigma_j^x = K_j(c_j + c_j^\dagger)$, $\sigma_j^y = iK_j(c_j - c_j^\dagger)$ e $\sigma_j^z = 2c_j^\dagger c_j - 1$, em que c_j^\dagger/c_j são operadores de criação/destruição de férmion no sítio j e $K_j = \prod_{i<j}(1 - 2c_i^\dagger c_i)$, chamada de *Jordan-Wigner string*, assegura a relação de anticomutação exigida pelos férmions. Aqui, o spin para cima $|\uparrow\rangle$ é mapeado na presença de um férmion $|1\rangle$ e o spin para baixo $|\downarrow\rangle$ na ausência $|0\rangle$.

A vantagem desta transformação é que um sistema de partículas interagentes é trocado por um sistema de partículas não-interagentes. A desvantagem é que o problema torna-se não-local devido à presença de férmions. No entanto, no caso de Hamiltonianos quadráticos em operadores fermiônicos, a não-localidade é contornada pois o termo K_j

deixa de ser não-local quando elevado ao quadrado. Assim, o sistema de N spins pode ser mapeado em subespaços de momento k sob as seguintes condições de contorno:

$$k = \begin{cases} N \text{ par:} & \pm(2l+1)\pi/N, \quad l = 0, 1, \dots, N/2 - 1, \\ N \text{ ímpar:} & 0, \pm 2l\pi/N, \pi, \quad l = 1, \dots, N/2 - 1. \end{cases} \quad (3.3)$$

Por simplicidade consideraremos, sem perda de generalidade, N par, pois este mapeamento resulta em $N/2$ subespaços de momentos $\pm k$, simétricos em torno da origem. Cada um desses subespaços se traduz em um modelo de Landau-Zener facilmente diagonalizável. Em cada subespaço, as quasi-energias de momento são $\varepsilon_k^\pm = \pm 2J\sqrt{(g(t)/J)^2 + 1} - 2\cos k \cdot g(t)/J$, respectivas aos autoestados $|\varepsilon_k^\pm\rangle$ obtidos por meio de transformações de Bogoliubov. O estado fundamental é, então:

$$E_0 = \sum_{l=0}^{N/2-1} -2J\sqrt{(g(t)/J)^2 + 1} - 2\cos((2l+1)\pi/N) \cdot g(t)/J, \quad (3.4)$$

$$|0\rangle = |\varepsilon_{\pi/N}^-\rangle \otimes |\varepsilon_{3\pi/N}^-\rangle \otimes \dots \otimes |\varepsilon_{(N/2-1)\pi/N}^-\rangle. \quad (3.5)$$

Os estados excitados podem ser construídos por meio das combinações de ε_k^\pm positivo ou negativo em cada subespaço, resultando em $2^{N/2}$ autoestados, sendo o primeiro excitado construindo levando $\varepsilon_{\pi/N}^- \rightarrow \varepsilon_{\pi/N}^+$. Note, no entanto, que o problema original possuía 2^N autoestados. Isso ocorre porque a paridade de N separa o Hamiltoniano em setores "desconectados", ou seja, $H_{TFIM} = H_{TFIM}^{par} \otimes H_{TFIM}^{ímpar}$, e cada setor possui $2^{N/2}$ autoestados. Portanto, apesar de possuir 2^N autoestados, somente $2^{N/2}$ são de fato acessíveis em cada cadeia, pois N é ou par ou ímpar – exceto no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, em que esta diferenciação não ocorre e os somatórios tornam-se integrais definidas.

3.3 Cadeia de Kitaev

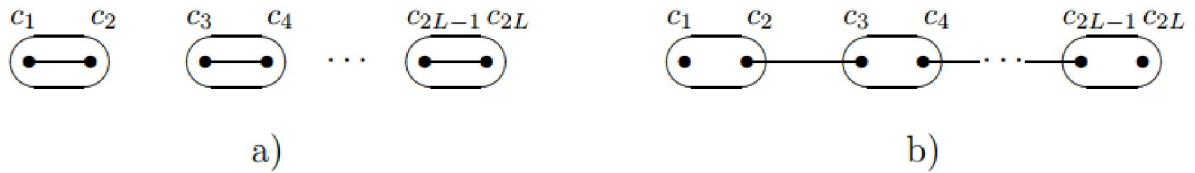
A cadeia de Kitaev (6) é um modelo unidimensional simples que descreve férmions sem spin (ou com spins iguais) com interações tight-binding e um termo supercondutor:

$$H_K = \sum_{j=1}^N \left[-\mu c_j^\dagger c_j - \omega (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) + (\Delta^* c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + \Delta c_{j+1} c_j) \right], \quad (3.6)$$

em que c_j^\dagger/c_j são operadores de criação/aniquilação fermiônicos no sítio j , μ é o potencial químico, ω a energia de hopping e $\Delta = |\Delta|e^{i\theta}$ o gap supercondutor com fase θ .

Kitaev propôs uma diagonalização por meio de *férmions de Majorana*, partículas cujo operador de criação é igual ao de aniquilação, dadas pelas transformações $c_{2j-1} = e^{i\frac{\theta}{2}}a_j + e^{-i\frac{\theta}{2}}a_j^\dagger$, $c_{2j} = -ie^{i\frac{\theta}{2}}a_j + ie^{-i\frac{\theta}{2}}a_j^\dagger$ para $j = 1, \dots, N$. Mostra-se que existem dois autoestados que satisfazem o estado fundamental dessa cadeia, associados a fases diferentes.

Figura 5 – Dois tipos de paridade.



Fonte: KITAEV (6)

Na figura 5, as formas circulares são os sítios, que possuem, cada um, dois operadores de Majorana. O arranjo desses modos determina a fase do sistema. Se os férmions de Majorana forem formados por pares do mesmo sítio (figura 5a), todos os modos estão ligados e o sistema possui paridade global bem definida. No entanto, se os férmions de Majorana forem formados por pares de sítios diferentes (figura 5b), um modo de Majorana não emparelhado sobra livre em cada extremidade da cadeia. Assim, a paridade global não é bem definida, ou seja, o sistema pode variar entre ter um número par ou ímpar de partículas mantendo a mesma configuração topológica. Isso significa, na prática, que os modos de Majorana de borda são protegidos contra perturbações locais, tornando esta fase muito promissora para a computação quântica.

A cadeia de Kitaev e os modos de Majorana não são o enfoque principal deste trabalho, mas são amplamente discutidos na academia. Aqui, nos satisfaz saber que a fase (a) da figura 5 leva o nome de fase trivial e ocorre quando $|\mu| > 2|\omega|$, enquanto a fase (b) leva o nome de fase topológica e ocorre quando $|\mu| < 2|\omega|$, ou seja, o ponto crítico ocorre em $|\mu| = 2|\omega|$. Além disso, aplicando o mesmo procedimento de diagonalização usado para o modelo de Ising (com exceção do uso de Jordan-Wigner), é possível calcular o *bulk spectrum* da cadeia de Kitaev, com N par e usando condições periódicas de contorno. Suas quasienergias $\varepsilon_k^\pm = \pm \sqrt{(\mu + 2\omega \cos k)^2 + 4|\Delta|^2 \sin^2 k}$ são associadas aos autoestados $|\varepsilon_k^\pm\rangle$. Analogamente, $k = (2l + 1)\pi/N$, $l = 0, 1, \dots, N/2 - 1$ e o estado fundamental é:

$$E_0 = \sum_{l=0}^{N/2-1} -\sqrt{(\mu + 2\omega \cos((2l + 1)\pi/N))^2 + 4|\Delta|^2 \sin^2((2l + 1)\pi/N)}, \quad (3.7)$$

$$|0\rangle = |\varepsilon_{\pi/N}^- \rangle \otimes |\varepsilon_{3\pi/N}^- \rangle \otimes \dots \otimes |\varepsilon_{(N/2-1)\pi/N}^- \rangle. \quad (3.8)$$

Os estados excitados podem ser construídos com o mesmo procedimento usado no modelo de Ising.

4 RESULTADOS

Os códigos utilizados estão no [GitHub.com/bebentinho/ma_sta_models](https://github.com/bebentinho/ma_sta_models) disponíveis para download. Em todos os resultados estão sendo utilizadas unidades tais que $\hbar = 1$ e estados iniciais de Gibbs $\rho_G = e^{H/kT}/Z$. Para aplicar o MA-STA nos modelos destacados no capítulo 3, é necessário estimar o gap de energia mais relevante Γ .

A solução exata do modelo Landau-Zener fornece Γ e a norma $d_t H_{LZ}(t)$:

$$\Gamma_{LZ} = E_+ - E_- = 2\sqrt{\Delta^2 + g^2(t)}, \quad (4.1)$$

$$d_t H_{LZ} = \dot{g}(t)\sigma^z; \|A\|_2 = \sqrt{\sum_i |\lambda_i|^2} \implies \|d_t H_{LZ}\| = \sqrt{2}\dot{g}(t). \quad (4.2)$$

Dessa forma, minimiza-se a ação adiabática resolvendo a equação de Euler-Lagrange:

$$S_{LZ} = \int_0^\tau dt \frac{\dot{g}^2}{8(\Delta^2 + g^2)^2}, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial S}{\partial g} - \frac{d}{dt} \frac{\partial S}{\partial \dot{g}} = 0 \xrightarrow{G(s)=g(s\tau)} \ddot{G}(s) = \frac{2G(s)\dot{G}^2(s)}{\Delta^2 + G^2(s)}. \quad (4.4)$$

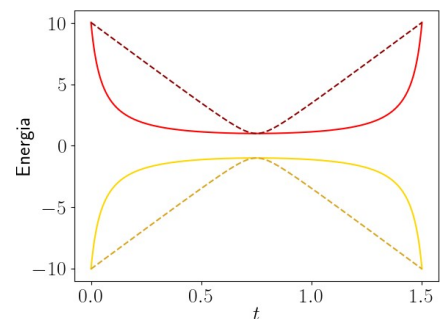
A equação acima possui solução analítica, obtida pelo software *Wolfram Mathematica* ao utilizar as condições de contorno $G(0) = g_0 = -G(1)$ e a substituição $s = t/\tau$:

$$g_{LZ}(t/\tau) = -\Delta \tan \left[(2t/\tau - 1) \tan^{-1}(g_0/\Delta) \right]. \quad (4.5)$$

Mostramos o protocolo $g_{LZ}(t)$ obtido em 4.5 na figura 7a e comparamos a fidelidade por ele produzida com a de uma rampa linear na figura 7b. O perfil de $g_{LZ}(t)$ condiz com a condição adiabática (equação 2.4): dinâmicas rápidas onde o gap é grande e lentas onde é pequeno. Note que o MA-STA alcança a adiabaticidade quase dez vezes mais rápido que a rampa linear. A linha pontilhada na figura 7b é a escala de tempo adiabático mínimo $\tau_a = \Delta^{-1}$. Além disso, levando em conta a fórmula de Landau-Zener para a probabilidade de transição de um sistema de dois níveis, tem-se que o estado do sistema pode ser escrito como $|\psi(t)\rangle = (1 - \exp[-\pi\Delta^2 t/(2|g_0|)]) |0(t)\rangle + \exp[-\pi\Delta^2 t/(2|g_0|)] |1(t)\rangle$, de forma que a fidelidade é bem descrita por $\mathcal{F}(t) = 1 - \exp[-\pi\Delta^2 t/(2|g_0|)]$, concordando com o observado no gráfico.

Note que o perfil de $g(t)$, na figura 7a, condiz com a condição adiabática (equação 2.4): nas regiões em que o gap é grande a dinâmica é rápida, mas nas regiões de gap

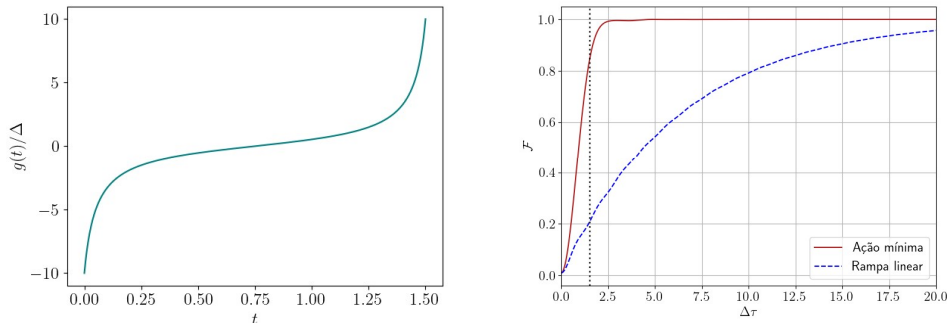
Figura 6 – Níveis fundamental (amarelo) e excitado (vermelho) do LZ.



Fonte: Autoria própria

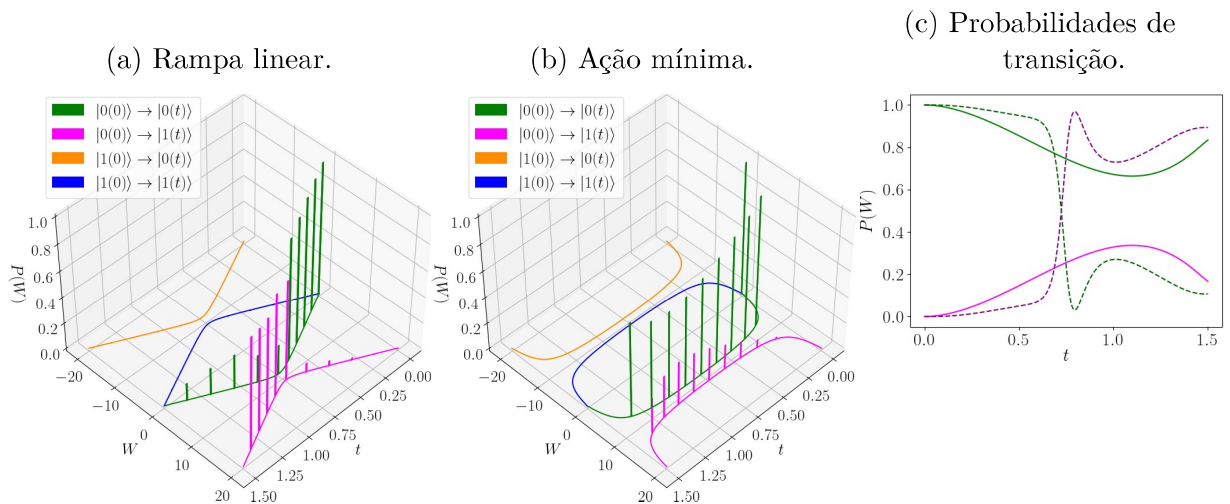
Figura 7 – Resultados exatos para o Landau-Zener para $T = 0.1$ e $g_0 = -10\Delta$.

- (a) Perfil de controle $g_{LZ}(t)$ que minimiza S_{LZ} em 4.3 no tempo adiabático $\tau_a = 1.5$. (b) Evolução das fidelidades com $g_{LZ}(t)$ (vermelho) e com uma rampa $g_l(t)$ (azul).



Fonte: Autoria própria

Figura 8 – Distribuição de trabalho $P(W)$ e probabilidades de transição para o modelo Landau-Zener comparando o MA-STA com a rampa linear. A transição do estado fundamental para o primeiro excitado é indicada pela cor verde e a do excitado para fundamental é rosa. $\tau = 1.5$, $\Delta = 1.0$.



Fonte: Autoria própria

pequeno, a dinâmica torna-se suficientemente lenta. A minimização da ação adiabática é uma forma de construir esse comportamento na região do gap relevante, como visto na figura 6. Para todos os gráficos de níveis de energia e probabilidades de transição, as linhas contínuas indicam o MA-STA e as tracejadas a rampa linear.

A evolução da distribuição de trabalho no tempo adiabático $\tau_a = 1.5$ é mostrada na figura 8. Observa-se que o MA-STA é muito mais efetivo na redução das transições para o estado excitado em tempos relativamente curtos em relação à duração do protocolo.

Seguindo para a análise do modelo de Ising (TFIM), primeiramente generaliza-se

a ação adiabática de hamiltonianos de partículas independentes:

$$S_I = \int_0^\tau dt \left[\frac{\alpha \dot{g} \gamma^2}{(g - \beta)^2 + \gamma^2} \right]^2, \quad (4.6)$$

em que β é um termo relacionado ao ponto de cruzamento evitado (*avoided crossing*, similar ao ponto crítico), γ é associado ao gap mínimo de energia e α é um termo constante. O termo γ^2 no numerador evita singularidades. Quando as condições iniciais são $G(0) = g_0$ e $G(1) = g_f$, a solução da equação de Euler-Lagrange é:

$$\ddot{G} = \frac{2(G - \beta)\dot{G}^2}{\beta^2 + \gamma^2 - 2\beta G + G^2}, \quad (4.7)$$

$$\implies G(s) = \beta + \gamma \tan \left((1 - s) \arctan \left(\frac{g_0 - \beta}{\gamma} \right) + s \arctan \left(\frac{g_f - \beta}{\gamma} \right) \right). \quad (4.8)$$

No caso do TFIM, o gap de energia entre estado fundamental e excitado do subespaço de menor momento é considerado o gap mais relevante de energia. Naturalmente, é esperado que o desempenho do MA-STA piore, pois os diferentes subespaços de momento são como diversos modelos de Landau-Zener com parâmetros diferentes (ditados pelo valor de k). Assim, em tempo suficiente, o método deve garantir a adiabaticidade no subespaço de menor momento, mas nos de momento superior não. Dessa forma, $\Gamma_{TFIM} = 4J\sqrt{(g(t)/J)^2 + 1 - 2\cos(\pi/N)g(t)/J}$, $\|\partial_t H_{TFIM}\| = 2\sqrt{2}\dot{g}(t)$ e:

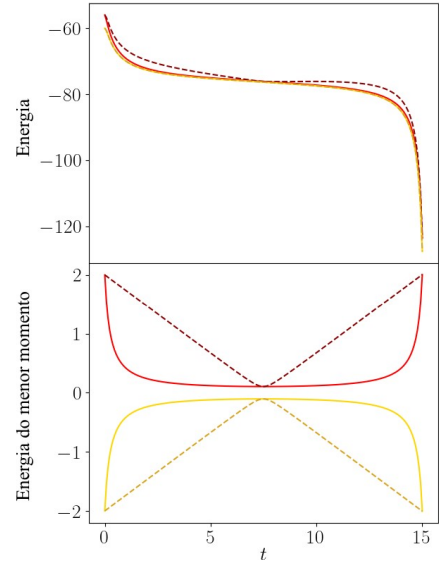
$$S_{TFIM} = \int_0^\tau dt \frac{\dot{g}^2}{32J^2[(g/J)^2 - 2g\cos(\pi/N) + 1]^2}, \quad (4.9)$$

$\alpha = [4\sqrt{2}\omega \sin^2(\pi/N)]^{-1}$; $\beta = \cos(\pi/N)$; $\gamma = \sin(\pi/N)$. Utilizamos $g_0 = 0$ e $g_f = 2$. Observe também que a estimativa de tempo adiabático $\tau_a = 1/[4J \sin(\pi/N)]$ associada ao subespaço de menor momento não é razoável para sistemas de muitos corpos. Assim, já que a maior distância possível entre dois spins é $N/2$ (considerando

que a distância entre dois spins vale 1 e que a cadeia está sob condições periódicas de contorno) e que a velocidade de grupo máxima alcançada na cadeia é $2J$ (9), cria-se uma escala de tempo estimada de $\tau_l = N/(4J)$, que será usada como aproximadamente um tempo característico de adiabaticidade. Na figura 10a mostramos a fidelidade para diferentes tamanhos de sistema. Naturalmente, sistemas maiores demandam mais tempo para alcançar a adiabaticidade, mas o MA-STA claramente se apresenta particularmente vantajoso a medida que N aumenta, mesmo sem considerar gaps de outras excitações.

Figura 9 – Energias em $\tau_l = 15$ do TFIM.

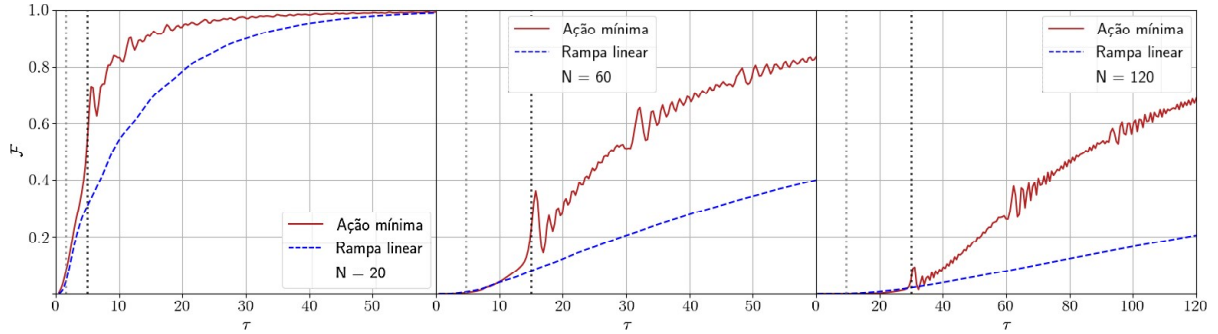
$N = 60, J = 1.0$ do estado fundamental (amarelo) e excitado (vermelho).



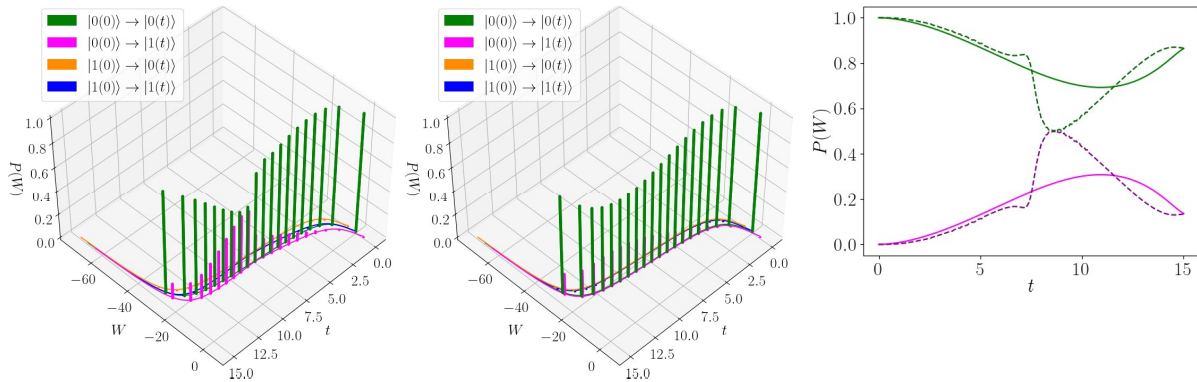
Fonte: Autoria própria

Figura 10 – Resultados para o TFIM com $T = 0.1$, $J = 1.0$. A transição do estado fundamental para o primeiro excitado é indicada pela cor verde e a do excitado para fundamental é rosa.

(a) Fidelidade do MA-STA (vermelho) e de uma rampa linear (azul) para $N = 20, 60, 120$. Perceba que $\tau_{max} = 120$ para $N = 120$.



(b) Rampa linear em $\tau_l = 15$, $N = 60$. (c) Ação mínima em $\tau_l = 15$, $N = 60$. (d) Probabilidades de transição em $\tau_l = 15$, $N = 60$.



Fonte: Autoria própria

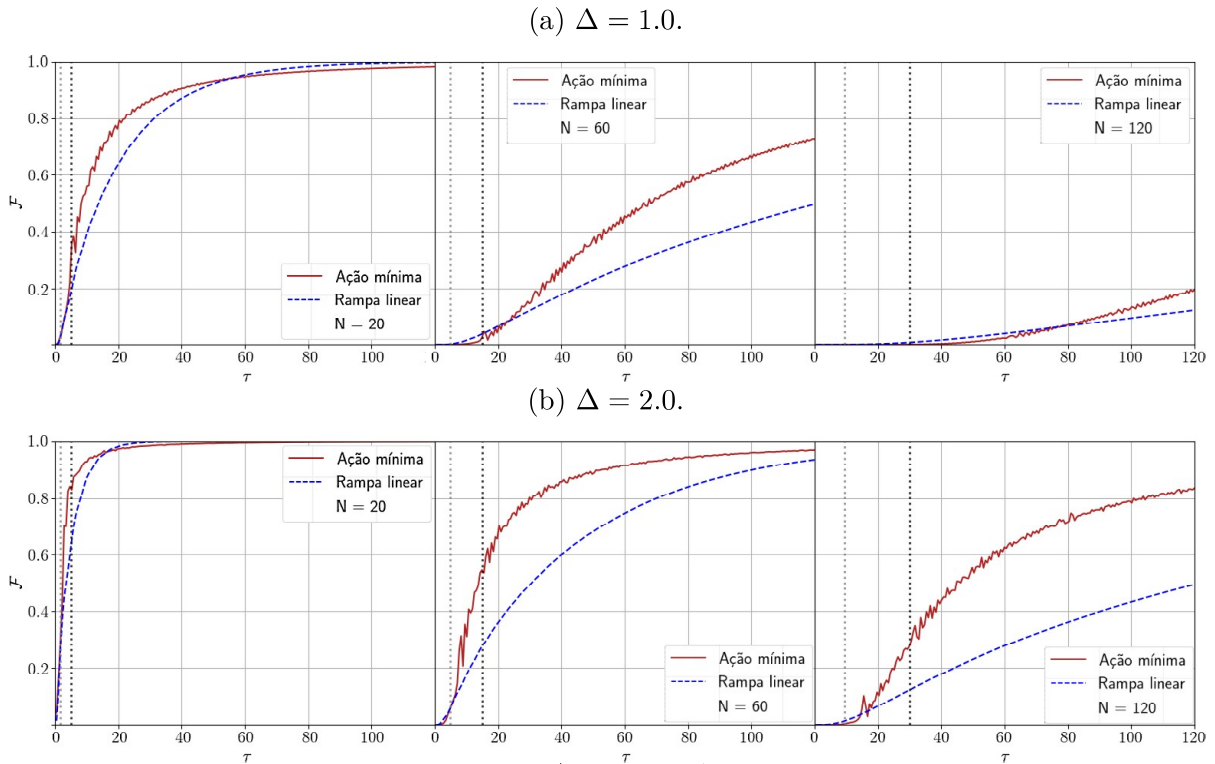
Embora a distribuição $P(W)$ completa da cadeia envolva $2^{n/2}$ autoestados, avaliar as transições entre o estado fundamental e o primeiro excitado é ilustrativo para a discussão do controle. Mostramos nos painéis 10b e 10c a evolução de $P(W)$ no tempo adiabático $\tau_l = 15$. Observe, na figura 9, o efeito do MA-STA nos níveis energéticos: o subespaço de menor momento possui comportamento muito parecido com o de Landau-Zener, conforme esperado dada a utilização das transformações de Jordan-Wigner.

Finalmente, discutiremos resultados inéditos para a performance do MA-STA na cadeia de Kitaev, que ainda não tinha sido explorada. Os parâmetros do modelo que podem ser controlados experimentalmente são o potencial químico μ e o gap supercondutor Δ . No entanto, a transição de fase não pode ser induzida ao variar temporalmente Δ , então a modelagem da ação adiabática deve ser considerando $\mu = g(t)$. Já que $\|\partial_t H_{Kitaev}\| = \sqrt{2}\dot{\mu}$, obtemos:

$$S_{Kitaev} = \int_0^\tau dt \frac{\dot{\mu}^2}{8((\mu + 2\omega \cos(\pi/N))^2 + 4|\Delta|^2 \sin^2(\pi/N))^2}, \quad (4.10)$$

$\alpha = (32|\Delta|^2 \sin^2(\pi/N))^{-1}$; $\beta = -2\omega \cos(\pi/N)$; $\gamma = 2|\Delta| \sin(\pi/N)$. Utilizamos as condições $g_0 = -5\omega$ e $g_f = \omega$ (dinâmica simétrica em relação ao ponto crítico) para obter nossos resultados.

Figura 11 – Fidelidade na dinâmica da cadeia de Kitaev comparando a rampa linear (vermelho) e o MA-STA (azul) a $T = 0.1$, $\omega = 1.0$.



Fonte: Autoria própria

Comparando a fidelidade – figura 11a – para diferentes tamanhos, observamos que o MA-STA torna-se vantajoso somente para cadeias maiores. Para $N = 120$, ambos protocolos mal chegam a 20% de fidelidade, mesmo a tempos bem longos. Porém, observe que no caso $N = 20$ a fidelidade da rampa ultrapassa a do MA-STA próximo a $\tau = 60$.

Perceba que no caso da cadeia de Kitaev o gap supercondutor é a distância entre as bandas de energia – tal qual era o gap do Landau-Zener. Aumentando o gap Δ espera-se facilitar a adiabaticidade. Para testar essa expectativa, comparamos o MA-STA para um gap maior. Na figura 11b, mostramos a fidelidade com $\Delta = 2$ para diferentes tamanhos, e destacamos o caso $N = 60$ em função do gap na figura 12. Já com $\Delta = 2$, notamos que sistemas grandes $N = 120$ conseguem atingir fidelidade próxima de 80%. Comparando os painéis (a) e (b) da figura 12, notamos que o MA-STA performa cada vez melhor com o aumento do gap, sendo sempre superior a rampa linear nas mesmas escalas de tempo.

Perceba que a superioridade do MA-STA parece ser condicionada pelo gap Δ , indicando que os métodos escalam com ele de forma diferente. Para estudar essa tendência, calculamos a fidelidade dos dois protocolos para diferentes valores de N , Δ e τ .

Figura 12 – Fidelidade *vs* Δ . Os tempos selecionados estão entre 0 e 60.

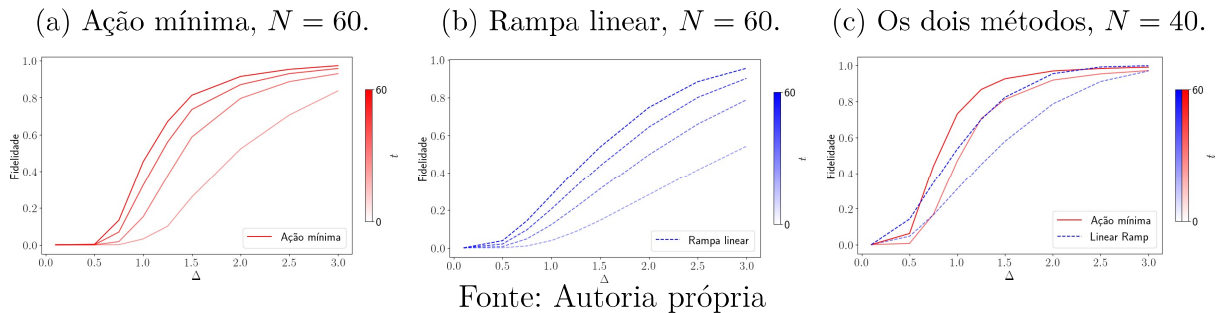
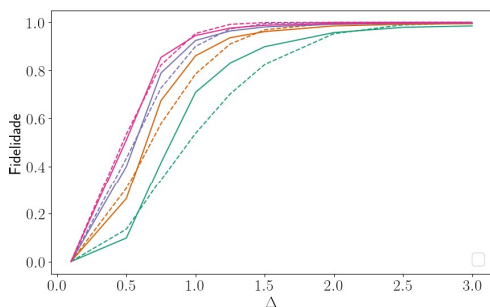
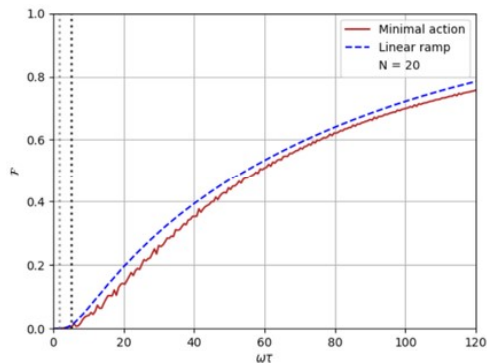


Figura 13 – Valores de \mathcal{F} :

- (a) *vs.* Δ , $N = 20$, $\tau = 15$ (verde), 30 (laranja), 45 (azul), 60 (rosa).



- (b) *vs.* τ , $N = 20$, $\Delta = 0.5$. MA-STA (vermelho) e LR (azul).



Fonte: Autoria própria

ções do estado fundamental para o primeiro excitado (figura 14). Porém, dado que mesmo assim a adiabaticidade não é garantida, temos a novidade para o Kitaev de que o gap associado ao subespaço de menor momento pode não ser o único relevante. Revisitando o resultado para gaps de outros subespaços:

$$\Gamma_k = 2\sqrt{(\mu + 2\omega \cos k)^2 + 4|\Delta|^2 \sin^2 k} \xrightarrow{\Delta \ll 1} \Gamma_k = 2(\mu + 2\omega \cos((2l+1)\pi/N)), \quad (4.11)$$

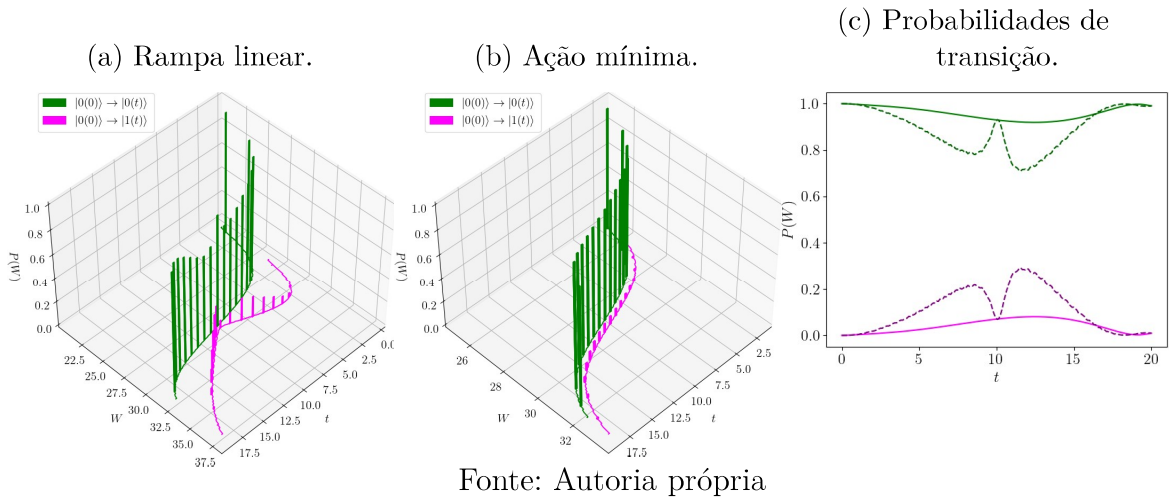
notamos que à medida que Δ diminui, gaps de subespaços de k diferentes tornam-se comparáveis. Analisando os níveis energéticos para $\Delta = 0.1$ (figura 15), percebe-se que a

No gráfico (c) da figura 12, observa-se, ao diminuir N , que para cada τ existe um intervalo de valores Δ em que o MA-STA é vantajoso, e analisando quando as linhas contínuas (mínima ação) são ultrapassadas pelas tracejadas (rampa linear) na figura 13a, podemos concluir que o tamanho deste regime de superioridade escala com N e com o inverso de τ .

Assim, dados N e τ fixos, existe um intervalo de valores de gap supercondutor $[\Delta_{min}, \Delta_{max}]$ que torna o uso do MA-STA vantajoso em relação a uma rampa linear. A existência desse intervalo indica que pode existir um valor Δ_{opt} que otimiza algum parâmetro de interesse – como por exemplo o trabalho extraído. A existência de um *par* ótimo, formado pelo perfil $\mu(t)$ que minimiza S_{Kitaev} e por um gap Δ_{opt} , pode ser interessante pois os dois parâmetros podem ser controlados experimentalmente.

Analisando a distribuição de trabalho reduzida e os níveis energéticos em situação de superioridade da rampa ($N = 20, \Delta = 0.5, \tau = 20$), o MA-STA performa muito melhor em evitar transi-

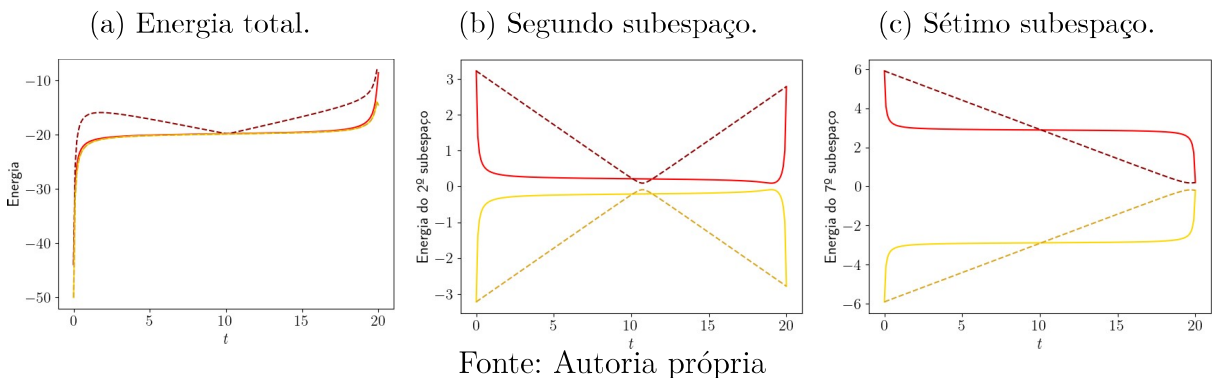
Figura 14 – Distribuição de trabalho da cadeia de Kitaev. $T = 0.1$, $\tau = 20$, $\omega = 1.0$, $\Delta = 0.1$. A transição do estado fundamental para o primeiro excitado é indicada pela cor verde e a do excitado para fundamental é rosa.



rampa linear só promove um fechamento de gap perto do ponto crítico, enquanto o MA-STA mantém os níveis próximos a dinâmica inteira. Conforme k aumenta, o ponto crítico se desloca relativamente, mas a forma do MA-STA não o acompanha. Na verdade, passa a ser observado o fechamento de gaps em pontos diferentes e casos em que derivadas muito altas são observadas justamente nos pontos críticos, como se observa no sétimo subespaço de momento. Se o gap supercondutor Δ fosse maior, além dos níveis apresentarem mais discrepância de relevância entre si, os fechamentos de gap deslocados nos subespaços de momento superiores contribuiriam menos para as transições indesejadas, tornando o desempenho do MA-STA melhor.

Por fim, observa-se nos gráficos de Kitaev que a escala de tempo estimada τ_l é acompanhada de picos de fidelidade pouco proeminentes, em contraste com os observados para o TFIM, ou seja, esta não parece ser uma escala de tempo característica do sistema evoluído sob $g_{STA}(t)$. Para modelos similares – quadráticos em operadores fermiônicos –, a clareza destes picos pode indicar se o método performa bem nele ou não.

Figura 15 – Energias de Kitaev do estado fundamental (amarelo) e excitado (vermelho) em espaços de momento. $\tau = 20$, $N = 20$, $\omega = 1.0$, $\Delta = 0.1$.



5 CONCLUSÃO

Neste trabalho, estudamos o protocolo de controle quântico da mínima ação MA-STA proposto na Ref. (5) e o aplicamos ineditamente para a cadeia de Kitaev. Reproduzimos os resultados para a fidelidade nos modelos de Landau-Zener (LZ) e na cadeia de Ising com campo transversal (TFIM), discutimos a distribuição de trabalho a baixas energias, importantes em transições de fase quânticas. Nossos resultados indicam que o MA-STA é de fato promissor e pode trazer vantagens consideráveis sem grandes esforços. Em relação à rampa linear, a fidelidade para o LZ é alta, diminuindo o tempo de dinâmica em quase uma ordem de grandeza, e considerável – melhor para cadeias maiores – para o TFIM, mostrando que a simples estimativa do gap relevante pode ser suficiente.

A contribuição autoral deste trabalho foi uma análise profunda do MA-STA para a cadeia de Kitaev. Obtivemos resultados inesperados: apesar de apresentar a evidente vantagem sobre a rampa em grande parte dos casos, em alguns a performance do MA-STA não foi tão boa. Vimos que os métodos escalam diferentemente com o tamanho do gap supercondutor, indicando que o MA-STA é superior à rampa somente para alguns intervalos de gaps, que é maior para cadeias maiores e menor para τ menor. Além disso, sob esse protocolo, a escala de tempo estimada τ_l não pareceu característica para a cadeia de Kitaev como para o modelo de Ising.

Assim, apesar de promissor, o MA-STA possui aparentes limitações. Uma proposta inicial para melhorá-lo seria considerar um controle de duas variáveis – em direções perpendiculares, aqui sendo o gap e o potencial químico – e minimizar a ação adiabática resolvendo a equação de Euler-Lagrange para duas variáveis. Essa abordagem se embasa na existência de um intervalo de valores vantajosos, o que sugere um par de valores ótimos. Outra abordagem possível seria a de considerar mais gaps de energia relevantes com outros setores, e minimizar uma ação total generalizada, ponderada pelas ações de cada subespaço. Considerando o resultado esperado, pesos que obedecem a uma distribuição gaussiana – de geometria regulada pelos parâmetros do sistema – parecem promissores.

Além disso, motivado pela referência (3), em que se mostrou que o tempo adiabático possui uma escalabilidade muito similar com a definição da ação adiabática, pode ser estudada uma reformulação que inclua a derivada de segunda ordem do hamiltoniano. Para tanto, seria utilizada uma equação de Euler-Lagrange generalizada para incluir mais uma ordem de derivada, o que pode trazer dificuldades de encontrar soluções analíticas.

Por fim, no futuro, convém estudar e testar esse método em modelos que não possuem solução analítica, mas cujo gap pode ser estimado, como o modelo de Hubbard, cadeias Ising desordenadas e suas variantes.

REFERÊNCIAS

- 1 DEUTSCH, I. H. Harnessing the power of the second quantum revolution. **PRX Quantum**, American Physical Society, v. 1, p. 020101, Nov 2020. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PRXQuantum.1.020101>.
- 2 SAPIENZA, F.; CERISOLA, F.; RONCAGLIA, A. J. Correlations as a resource in quantum thermodynamics. **Nature Communications**, Springer Science and Business Media LLC, v. 10, n. 1, jun. 2019. ISSN 2041-1723. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1038/s41467-019-10572-8>.
- 3 ALBASH, T.; LIDAR, D. A. Adiabatic quantum computation. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society (APS), v. 90, n. 1, jan. 2018. ISSN 1539-0756. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.90.015002>.
- 4 HARTMANN, A. *et al.* Many-body quantum heat engines with shortcuts to adiabaticity. **Physical Review Research**, American Physical Society (APS), v. 2, n. 2, maio 2020. ISSN 2643-1564. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.023145>.
- 5 KAZHYBEKOVA, A.; CAMPBELL, S.; KIELY, A. Minimal action control method in quantum critical models. **Journal of Physics Communications**, IOP Publishing, v. 6, n. 11, p. 113001, nov. 2022. ISSN 2399-6528. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1088/2399-6528/aca3fa>.
- 6 KITAEV, A. Y. Unpaired majorana fermions in quantum wires. **Physics-Uspekhi**, Uspekhi Fizicheskikh Nauk (UFN) Journal, v. 44, n. 10S, p. 131–136, out. 2001. ISSN 1468-4780. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1070/1063-7869/44/10S/S29>.
- 7 AREZZO, V. R.; ROSSINI, D.; PICCITTO, G. Many-body quantum heat engines based on free fermion systems. **Physical Review B**, American Physical Society (APS), v. 109, n. 22, jun. 2024. ISSN 2469-9969. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.109.224309>.
- 8 ZAWADZKI, K. *et al.* Non-gaussian work statistics at finite-time driving. **Physical Review A**, American Physical Society (APS), v. 107, n. 1, jan. 2023. ISSN 2469-9934. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.107.012209>.
- 9 NAJAFI, K.; RAJABPOUR, M. A. On the possibility of complete revivals after quantum quenches to a critical point. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 96, p. 014305, Jul 2017. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.014305>.