Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física "Gleb Wataghin"
Departamento de Física da Matéria Condensada
Grupo de Sistemas Dinâmicos

Tese de Doutorado

Aspectos Quânticos e Clássicos da Dinâmica de Emaranhamento em Sistemas Hamiltonianos

Renato Moreira Angelo

Orientadora: Profa. Dra. Kyoko Furuya
(IFGW - DFMC/UNICAMP)

Dissertação apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" para a obtenção do título de Doutor em Física.

Fevereiro de 2003

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA

BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

An43a

Angelo, Renato Moreira
Aspectos quânticos e clássicos da dinâmica de emaranhamento em sistemas hamiltonianos / Renato Moreira Angelo -- Campinas, SP : [s.n.], 2003.

Orientador: Kyoko Furuya.
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Caos quântico. 2. Sistemas não-lineares. 3. Entropia. 4. Ótica quântica. 5. Comportamento caótico em sistemas. 6. Sistemas hamiltonianos. I. Furuya, Kyoko. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

UNICAMP
PÓS GRADUAÇÃO
Instituto de Física Gleb Wataghin
C.P. 6165
CEP: 13083-970
Tel. (19) 788-5305
e-mail: secpos@ifi.unicamp.br

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **RENATO MOREIRA ANGELO – RA 930221** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 27 / 02 / 2003.

COMISSÃO JULGADORA:

Profa. Dra. Kyoko Furuya (Orientadora do Candidato)
DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Marcelo Aparecido Marchiolli – IFSC/USP

Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa – DF/UFSCAR

Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira – DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Marcus Aloízio Martinez de Aguiar – DFMC/IFGW/UNICAMP

Dedico este trabalho
à minha família.

"Ele não sabia, e, quando teimava
em pensar, as duas cousas se baralhavam,
se emaranhavam e a conclusão exata lhe fugia".

O triste fim de Policarpo Quaresma
Lima Barreto

Agradecimentos

Agradeço à Kyoko, orientadora e amiga, a preciosa orientação durante todos esses anos.

Meus agradecimentos a todos os professores do IFGW, representados na minha formação e memória, pela Kyoko e pelo Marcus, dois grandes exemplos de profissionais. Agradeço aos professores Maria Carolina Nemes (UFGM), Francisco Bosco (UFES), Sílvio Vitiello (IFGW) e Antônio V. Barranco (IFGW) as inúmeras discussões e colaborações ao longo desses anos. Agradeço também ao Zé Geraldo e à Sônia as várias discussões interessantes.

Agradeço de forma especial à Liliana e ao Gian por serem amigos-cientistas tão presentes. Certamente, boa parte deste trabalho não existiria sem eles.

Agradeço a todos os meus grandes amigos *exatóides* o companheirismo de todos os momentos. Em ordem aleatória: Fábio, Álvaro, Cabelo, Júlio Criginski, Júlio Garcia, Varlei, Wesley, Luís Gregório, Pablo, Carol, Roma, Fabinho, Caetano, Demétrio, Jeferson, Marcão, Vitor, Emerson, Ari, Fernando, Leandro, Rildo, Ricardo, Jesus, Kleber, Pedro, Manoel, Jereson.

Agradeço também aos meus amigos *artistas*, que me ajudaram a enxergar a vida em tons e semitons. Em ordem aleatória: Alberto, Cissa, Vânia, Fernando, Cláudia, Fátima, Max, Fábio, Carla, Antônio, Guilherme, Jack.

Agradeço ao Daniel a tradução do artigo de Paul Ehrenfest e a todos que contribuíram de alguma forma para este trabalho.

Um "obrigado" especial para o pessoal da biblioteca do IFGW.

Agradeço à minha família a confiança, o conforto e a paciência. Mil beijos à Tânia, minha metade normal e meu grande alicerce.

Agradeço à FAPESP todo o apoio financeiro.

Resumo

Neste trabalho estudamos a dinâmica de emaranhamento em sistemas Hamiltonianos bipartites nos contextos clássico e quântico. A pesquisa foi desenvolvida principalmente sobre a análise da entropia linear, considerada uma boa medida de emaranhamento no caso de estados globais puros. Na primeira etapa do trabalho, utilizamos o Modelo Jaynes-Cummings de N átomos (MJC-N) para estudar como a entropia linear, e consequentemente o emaranhamento, depende da condição inicial clássica, apresentando rápida descoerência quando esta condição é instável. Mostramos também que as oscilações na entropia linear podem ser entendidas segundo a simetria das trajetórias clássicas correspondentes, o que ocorre segundo o *efeito de borda* oriundo da finitude do espaço de fase do spin. Discutimos também o limite clássico singular do emaranhamento no MJC-N. Na segunda etapa, trabalhamos com o formalismo estatístico Liouvilliano, dentro do qual definimos uma medida apropriada para o *emaranhamento clássico*: a *entropia linear clássica*. Realizamos cálculos analíticos para sistemas integráveis lineares e não-lineares, mostrando as peculiaridades da medida clássica quando comparada à quântica. Particularmente interessante é o caso em que ocorre a *auto-interferência*, fenômeno sem análogo clássico. Para os sistemas integráveis, foi possível estudar inclusive o caso de estados iniciais não-clássicos, para os quais mostramos ser conveniente definir uma nova medida clássica mais "simétrica": o *grau de emaranhamento*. Continuando com as analogias entre a mecânica quântica e a mecânica clássica Liouvilliana, deduzimos por primeiros princípios uma *equação mestra clássica* para o tratamento de sistemas abertos clássicos. Como aplicação, resolvemos as equações mestras quântica e clássica para o caso de um reservatório de osciladores harmônicos à temperatura nula. Na última etapa do trabalho, definimos um operador Liouvilliano para a quantização *simetrizada e ordenada* de monômios clássicos. Como consequência, obtivemos fórmulas de ordenamento normal e anti-normal para operadores canonicamente conjugados que comutam com sua relação de comutação. Mostramos então que a quantização das equações de movimento clássicas produz equações de movimento quânticas que se aproximam do resultado exato na escala de tempo de Ehrenfest. Esta análise nos permite calcular analiticamente o tempo de Ehrenfest em sistemas integráveis.

Abstract

In this work we studied the entanglement dynamics in bipartite Hamiltonian systems within the quantum and classical frames. This research was developed mainly on the analysis of the linear entropy, which is considered an apropriated entanglement measure concerning to global pure states. In the first stage of the work, we used the Jaynes-Cummings Model with N atoms (JCM-N) to study how the linear entropy, an consequently the entanglement, depends on the choice of the classical initial condition, showing faster decoherence for the unstable ones. We also showed that the linear entropy oscillations can be understood through the analysis of the symmetry of the respective classical trajectories, which is allowed by the *border effect* arising from the limitation of the spin phase space. We also discussed the singular classical limit of the entanglement in the JCM-N. In the second stage, we worked with the Liouvillian statistical formalism, in which we defined an appropriate measure of the *classical entanglement*: the *classical linear entropy*. We realized analytical calculations for linear and non-linear integrable systems, pointing out the peculiarities of the classical measure compared to the quantum one. Particularly interesting is the case in which occurs the *self-interference*, a phenomenon with no classical analogue. For the integrable systems, it was also possible to study the case of non-classical initial states, for the which we defined a new convenient classical measure: the *entanglement degree*. Still in the context of the analogies between quantum and Liouvillian classical mechanics, we deduced by first principles a classical master equation for treating classical open systems. As an application, we solve the quantum and classical master equation for the case of a harmonic oscillator reservoir at null temperature. At the last stage of the work, we defined a Liouvillian operator to perform the quantization of a monomial in a *symmetrized and ordered* form. As a consequence, we obtained normal and anti-normal ordering formulas for canonically conjugated operators whose commutator is a c-number. Thus, we showed that the quantization of classical equations of motion produces quantum equations of motion that approximate the exact result in the Ehrenfest time scale. This simple analysis allows us to calculate analytically the Ehrenfest time for any integrable system.

Conteúdo

Introdução **5**

1 Caos e Descoerência **9**
1.1 O Modelo Jaynes-Cummings com N Átomos 10
1.1.1 Versão Quântica 10
1.1.2 Versão Clássica 10
1.1.3 Propriedade de Escala 11
1.1.4 Integrabilidade no MJC-N 12
1.2 Medindo o Emaranhamento 13
1.2.1 Entropia de von Neumann 13
1.2.2 Entropia Linear 14
1.3 Estados Iniciais "Clássicos" 15
1.4 Descoerência e Efeito de Borda no MJC-N 16
1.4.1 O Efeito de Borda 19
1.5 Recoerências Parciais e Órbitas Periódicas 21
1.5.1 Emaranhamento no Equilíbrio 25
1.6 Emaranhamento Médio 25
1.6.1 Simetria de Órbitas Periódicas 25
1.6.2 Taxa Média de Descoerência 27
1.6.3 Expoentes de Lypunov 29
1.7 O Limite Clássico da Entropia Linear 29
1.7.1 O Limite Singular 32

2 Dinâmica Liouvilliana **35**
2.1 Teorema de Liouville 35
2.2 Formalismo Clássico-Estatístico 36
2.2.1 Estados Iniciais Clássicos 39
2.2.2 Distribuições "Coerente" e de "Número" 40
2.3 Operadores Liouvillianos 41
2.3.1 Operador Deslocamento 41
2.3.2 Operador Dilatação 42
2.3.3 Operador Momento Angular 42
2.3.4 "Expansão Semiclássica" 43

3 Sistemas Integráveis Lineares **45**
3.1 Interação *Bilinear* . . . 45
3.1.1 Solução Clássica . . . 46
3.1.2 Entropia Linear Clássica . . . 47
3.1.3 Entropia Linear Quântica . . . 47
3.1.4 Entropia Linear Semiclássica . . . 48
3.1.5 Resultados . . . 48
3.2 Interação *RWA* . . . 51
3.2.1 Solução Quântica . . . 52
3.2.2 Solução Estatística . . . 58
3.2.3 Comparação entre as Entropias . . . 59

4 Sistemas Integráveis Não-Lineares **67**
4.1 Oscilador Quártico 1-D . . . 67
4.1.1 Solução Clássica . . . 69
4.1.2 Solução Quântica . . . 70
4.1.3 Solução Estatística . . . 72
4.1.4 Colapso e Ressurgimento . . . 73
4.1.5 Tempos de Quebra de Correspondência . . . 75
4.1.6 Distribuições de Probabilidade no Espaço de Fase . . . 76
4.2 Oscilador Quártico 2-D + Interação RWA . . . 78
4.2.1 Solução Clássica . . . 79
4.2.2 Solução Quântica . . . 80
4.2.3 Solução Estatística . . . 81
4.2.4 Entropia e Emaranhamento . . . 82
4.2.5 *Tempos de Recoerência e de Recorrência* . . . 83
4.2.6 Auto-Interferência . . . 83
4.2.7 Expoentes Clássicos e Taxas de Descoerência . . . 85
4.2.8 Emaranhamento Clássico?! . . . 87

5 Sistemas Abertos **89**
5.1 Dedução da Equação Mestra Clássica . . . 89
5.2 O "Gato Frio" com Dissipação . . . 95

6 Escala Temporal Clássica **99**
6.1 Operador de Quantização *Simétrica e Ordenada* . . . 99
6.1.1 Um exemplo simples . . . 101
6.2 Quantização na Escala Temporal Clássica . . . 102
6.2.1 Quantização de Funções Clássicas . . . 102
6.2.2 Limite Clássico Via Estados Coerentes . . . 105
6.2.3 Médias Gaussianas Clássicas . . . 106
6.2.4 Representações de Schrödinger e Heisenberg . . . 107
6.2.5 "Trajetória Quântica Coerente" . . . 108
6.3 Tempo de Ehrenfest . . . 109
6.3.1 O Sistema "kártico" N-dimensional . . . 110

7 Conclusões **115**

A Artigo de P. Ehrenfest **123**

B Desacoplamento de Exponenciais de Operadores Não-Comutativos **127**
B.1 Expansões Ordenadas 128
B.1.1 Técnica Matricial de Gilmore 128
B.1.2 Técnica de Transformação de Similaridade de Witschel 129
B.1.3 Técnica de Derivação de Parâmetros de Wilcox 130
B.2 Aplicação: Solução da Equação Mestra a $T = 0$ 131
B.2.1 Evolução Dissipativa do Gato de Schrödinger 133

C Variâncias de Estados Coerentes **135**
C.1 Cálculos Quânticos 135
C.2 Cálculos Estatísticos 136

Introdução

A formulação da mecânica quântica representou a quebra do determinismo, que dava ao homem, através das leis de Newton, o pleno conhecimento do passado e do futuro de qualquer corpo cuja posição e momento fossem conhecidos num determinado instante. Agora, o determinismo era restrito somente a uma distribuição de probabilidades com desvio médio sempre maior que a constante de Planck. A natureza nos impediu de conhecer em todos os detalhes a dinâmica de qualquer sistema.

Mais tarde, descobriu-se que mesmo na descrição clássica de alguns sistemas físicos a informação completa nos é negada na prática. De fato, dada a extrema sensibilidade dos sistemas caóticos às condições iniciais, qualquer incerteza é propagada exponencialmente no tempo, impedindo qualquer previsão a tempos suficientemente longos. Surgia então o estudo do *caos* em sistemas dinâmicos, um comportamento que de fato foi entendido como regra e não exceção. Essas são as duas grandes teorias sobre as quais se fundamenta e se orienta este trabalho, buscando entender ou explicar algumas questões interessantes referentes a ambas, a uma delas, ou mesmo à transição de uma para outra.

De início, imaginemos um sistema macroscópico, composto de um planeta que interage gravitacionalmente com suas várias luas. Por outro lado, seja um sistema microscópico, dado por um núcleo positivo que interage eletricamente com vários elétrons de sua vizinhança. Suponhamos que dispomos apenas de duas teorias para *prever o futuro* desses sistemas: a mecânica quântica e a mecânica clássica. E então, como proceder? Já sabemos que a mecânica clássica está para os sistemas macroscópicos[1] como a mecânica quântica está para os microscópicos. Mas será que podemos utilizar a mecânica clássica para descrever o sistema atômico? Ou ainda, podemos utilizar a mecânica quântica para descrever o sistema planetário?

Uma parte da resposta pode ser encontrada na maioria dos livros-textos de mecânica quântica. Lá encontraremos uma vasta gama de fenômenos que não podem ser descritos pela mecânica clássica, dentre eles o próprio sistema atômico que propusemos há pouco. De fato, a teoria clássica não encontra explicação geral satisfatória para fenômenos como o efeito fotoelétrico, a radiação de corpo negro, as linhas de emissão do átomo de hidrogênio, a difração e interferência de partículas materiais, o tunelamento, a emissão espontânea, a auto-interferência, o emaranhamento, colapsos e ressurgimentos, etc. Consideramos, portanto, que esta questão está adequadamente respondida, isto é, a mecânica clássica de Newton não pode ser aplicada ao mundo microscópico.

Mas e a outra parte da questão? A mecânica quântica poderia ser empregada na descrição do sistema planetário, sendo portanto "mais geral" que a teoria clássica, a exemplo do que ocorre com a teoria da relatividade restrita? Ou ainda, de forma mais contundente,

[1] Nesta tese não utilizaremos a relatividade geral em nenhum momento, de modo que a estaremos excluindo do quadro conceitual que utilizaremos.

temos alguma prova analítica da recuperação das equações de movimento clássicas a partir da matemática quântica? De certa forma, a resposta para estas questões veio através do *princípio da correspondência* de Bohr, segundo o qual a mecânica quântica deve reproduzir as previsões da mecânica clássica no limite macroscópico.

Entretanto, uma questão bastante fundamental emerge nesse contexto. Por um lado, temos a mecânica quântica, com dinâmica determinística, definida através de uma equação diferencial linear para vetores-estados, os quais trazem consigo o caráter probabilístico desta mecânica. De outro lado, temos uma mecânica completamente determinística, com estados definidos no espaço de fase a cada instante, mas descrito por equações diferenciais não-lineares, capazes de gerar um comportamento extremamente instável nas trajetórias do espaço de fase. Então, questiona-se: como conciliar cenários tão distintos? À medida que atingimos um regime suficientemente macroscópico, como veremos emergir o comportamento caótico não-linear a partir da dinâmica linear das equações quânticas? Existe caos na mecânica quântica? Como medí-lo? Questões como essas deram origem ao estudo do *caos quântico*, tópico que pretende entender como o caos se manifesta na mecânica quântica. As referências [1–6] englobam várias contribuições relevantes a esta área.

Em 1927, P. Ehrenfest deu uma relevante contribuição para o entendimento da relação entre as mecânicas quântica e clássica quando enunciou seu teorema num trabalho extremamente simples e igualmente importante [7] (ver apêndice A). Ehrenfest notou que a tempos curtos, o valor esperado da taxa de momento deve ser igual à força local clássica para estados suficientemente localizados e que permanecem localizados. Este teorema garante que os primeiros instantes da evolução quântica são regidos por equações clássicas. Desta forma, ficou estabelecido que o comportamento clássico da mecânica quântica deve ser evidente somente numa escala de tempo pequena - *escala de Ehrenfest* - depois da qual, ocorrerá a quebra do princípio da correspondência.

Uma vez estabelecido o tempo de quebra de correspondência e supondo que a mecânica quântica é a teoria mais geral (contendo a clássica), poderemos estimar por quanto tempo podemos utilizar a teoria clássica como boa aproximação. Na realidade estamos falando exatamente de um trabalho de Zurek e Paz intitulado "Why we don't need a quantum planetary dynamics?" [8], no qual eles apresentam uma estimativa do tempo de quebra de correspondência t_r para Hyperion, uma das luas de Saturno. Utilizando dados experimentais da missão Voyager 2, eles obtiveram algo como $t_r \approx 20$ anos, um tempo obviamente muito menor que a idade de Hyperion. De acordo com este resultado, Hyperion deveria ser descrita por um estado de superposição não-clássica, se comportando de forma extremamente quântica. Mas este certamente não é o caso. O comportamento de Hyperion é perfeitamente descrito por equações clássicas. Por que o tempo de quebra de correspondência é tão pequeno se o comportamento de Hyperion é clássico? A resposta é dada pela *descoerência*.

Uma das mais importantes propostas teóricas das últimas décadas foi o fenônemo da descoerência [9, 10]. O interesse nesse processo não nasceu entretanto na área do caos quântico. Sua importância, juntamente com a regra de *superseleção induzida pelo ambiente* foi primeiramente reconhecida no contexto da teoria de medida quântica [10–14]. *Descoerência* é o nome dado ao processo de perda de coerência (de fase) pelo sistema devido à interação com graus de liberdade externos ou internos que não podem ser controlados pelo observador e são chamados de "ambiente". Todos os sistemas macroscópicos estão suficientemente acoplados com o ambiente de forma a serem susceptíveis à descoerência, a qual elimina superposições verdadeiramente quânticas numa escala de tempo muito curta. Garante-se assim, a validade

do princípio da correspondência de Bohr.

Além de apontar para o papel da descoerência na transição entre os mundos quântico e clássico, Zurek também conjectura em seus trabalhos o papel da dinâmica clássica caótica no processo de descoerência. Em [15] por exemplo, argumenta como um sistema classicamente caótico em contato com o ambiente sofre descoerência de forma mais rápida do que no caso de um sistema classicamente regular. Em 1998, Furuya e colaboradores [16] deram uma outra contribuição para o entendimento do caos quântico, mostrando o papel de condições iniciais clássicas para o processo de descoerência num sistema Hamiltoniano bipartite fechado em regime misto ("soft chaos"). Neste caso, não havia reservatório, e a grandeza analisada - a entropia linear - era também uma medida do emaranhamento entre os subsistemas.

Atualmente, *emaranhamento* e *descoerência* são questões extremamente relevantes que permeiam áreas como a óptica quântica, com avanços teóricos e experimentais notáveis em tópicos interessantes como o teletransporte e a computação quântica. Ao mesmo tempo, são ingredientes fundamentais para o entendimento da transição entre a mecânica quântica e mecânica clássica, e por isso constituem os principais objetos de estudo desta tese.

Nesse contexto, estudamos a dinâmica de emaranhamento no modelo Jaynes-Cummings de N átomos (MJC-N), com ênfase no estudo das relações entre o comportamento da entropia linear e a simetria da trajetória clássica projetada no espaço de spin. O estudo é feito através de estados quânticos coerentes centrados sobre a trajetória clássica para a qual se deseja estudar o emaranhamento. O problema se torna interessante principalmente quando se estuda um sistema com análogo clássico caótico, ainda mais num regime misto. Assim pode-se evidenciar a dependência da entropia, e consequentemente do emaranhamento, com a condição inicial clássica. Nesse trabalho estudamos de forma geral condições iniciais especiais como órbitas periódicas e trajetórias regulares na vizinhança de uma separatriz do movimento, fazendo a comparação com resultados obtidos para trajetórias caóticas. Além disso, obtemos um comportamento médio para a descoerência através de uma média sobre as entropias calculadas para pontos distintos sobre a mesma trajetória clássica. Concluímos esta etapa do trabalho, estudando o limite clássico da entropia linear, que indica um crescimento do emaranhamento no limite de $J \to \infty$. O estudo da dinâmica de emaranhamento no MJC-N será apresentado de forma relativamente compacta no capítulo 1.

No capítulo 2, apresentaremos o ferramental teórico utilizado para o estudo da mecânica clássico-estatística, definida em termos da densidade clássica ρ, solução da equação de Liouville. Neste momento, definiremos a *entropia linear clássico-estatística*, uma quantidade clássica que pretende medir o emaranhamento de distribuições clássicas construídas inicialmente a partir de representações no espaço de fase para os estados iniciais quânticos. Desta forma, pode-se estudar e comparar as dinâmicas de emaranhamento quântica e clássica.

O estudo analítico de sistemas integráveis quadráticos com interação bilinear é apresentado no capítulo 3, onde mostramos resultados para a comparação entre as dinâmicas de emaranhamento quântica e clássica. O estudo é feito inclusive para estados não-clássicos, como os estados de Fock, para os quais mostrou-se mais adequada a definição do *grau de emaranhamento*, uma medida de emaranhamento simétrica apropriada para o caso de entropias parciais diferentes. Neste capítulo mostramos também as peculiaridades das nossas definições clássicas, procurando enfatizar o por quê das diferenças e similaridades com os resultados quânticos.

No capítulo 4, apresentamos a comparação quântico-clássica dentro de um sistema com interação quártica. No caso unidimensional, fazemos uma comparação entre valores espera-

dos e médias estatísticas. Os resultados analíticos deste caso elucidam uma série de pontos interessantes como por exemplo o comportamento de *colapso e ressurgimento* e as correções "semiclássicas" de ambos os formalismos sobre a dinâmica clássica. Para o sistema bidimensional, se torna particularmente interessante estudar a dinâmica de emaranhamento quântica e clássica, uma vez que o sistema quântico exibe um comportamento sem análogo clássico: a *auto-interferência*. Neste caso, as diferenças entre os formalismos se tornam acentuadas.

Ainda dentro do contexto das comparações entre os formalismos quântico e estatístico, deduzimos por primeiros princípios uma *equação mestra clássica*, para o tratamento de sistemas abertos. O resultado deste cálculo e um exemplo de aplicação e comparação com o resultado quântico no caso de reservatório *frio* ($T = 0$) é apresentado no capítulo 5.

Como último resultado do nosso trabalho, apresentamos um estudo preliminar do emprego de um operador Liouvilliano capaz de quantizar de forma simetrizada e ordenada monômios clássicos de variáveis canonicamente conjugadas. Uma das consequências diretas da proposta é a obtenção de regras de ordenamento normal e anti-normal que concordam com as propostas constantes da literatura. Utilizamos então este esquema para quantizar equações de movimento clássicas e mostramos que o resultado é idêntico ao cálculo exato do formalismo estatístico. Isso sugere que este tipo de quantização deve valer apenas em escalas temporais curtíssimas, em que a aproximação de campo médio para o centróide torna-se apropriada para a estimativa do tempo de Ehrenfest. Como aplicação da proposta, apresentamos o cálculo do tempo de Ehrenfest para um sistema de N osciladores acoplados com interação diagonal de ordem k. Os resultados, em concordância com a literatura, são apresentados no capítulo 6. Finalmente, no capítulo 7, apresentamos as conclusões e perspectivas de futuros trabalhos.

Capítulo 1

Caos e Descoerência

Nas últimas décadas, uma série de trabalhos de impacto [8–10,13–15,17] chamou a atenção da comunidade científica para o fenômeno da *descoerência*, o qual é o grande responsável pela garantia do princípio da correspondência.

Apesar deste fenômeno ter sido amplamente discutido do ponto de vista da interação de um sistema em contato com o meio ambiente (consultar referências citadas acima), é sabido que a descoerência também ocorrerá - mesmo que parcialmente - se utilizarmos um outro sistema finito[1] para o papel de "meio ambiente". Obviamente, nesta situação, devido à ausência do número infinito de graus de liberdade do reservatório, não podemos esperar que o processo seja sempre irreversível, com perda de energia[2] e coerência para o meio.

A motivação para nosso trabalho nasceu com a conjectura de Zurek e Paz [15], segundo a qual um sistema classicamente caótico sofre descoerência de forma muito mais rápida, quando em contato com o reservatório, que um sistema classicamente regular. Mais tarde, Furuya e colaboradores [16] mostraram que a descoerência em um dos graus de liberdade de um sistema bipartite, o spin-bóson, é *sensível* às condições iniciais clássicas. Outros dois trabalhos mostraram resultados semelhantes para um sistema bóson-bóson [20] e um sistema spin-spin [21].

Nesse contexto, nossa proposta inicial de trabalho foi o estudo da sensibilidade da descoerência às condições iniciais clássicas do modelo spin-bóson, levando agora em consideração, condições como órbitas periódicas e separatrizes do movimento. De forma geral, trata-se de conectar fenômenos quânticos (emaranhamento e descorência) a aspectos essencialmente clássicos (caos, regularidade, órbitas periódicas), o que de certa forma pode trazer alguma informação relevante para o estudo e entendimento do caos quântico.

Neste capítulo vamos apresentar os principais resultados obtidos no estudo do emaranhamento no modelo spin-bóson em função da dinâmica clássica subjacente. Discutiremos questões referentes às oscilações da entropia linear, o efeito de borda, a taxa média de descoerência do subsistema e o limite clássico singular do emaranhamento. Começamos com uma breve discussão sobre o modelo em suas versões quântica e clássica, apresentamos o ferramental conceitual utilizado no estudo e então seguimos com os resultados e discussões.

[1] Dizemos "finito" no sentido de ser composto por um número pequeno de graus de liberdade. Nesse caso, tal sistema estaria longe das condições de um reservatório.

[2] O processo irreversível de descoerência pode acontecer sem que haja perda de energia para o reservatório. De fato, é o que ocorre com sistemas que interagem com reservatórios modelados por termos do tipo "phase damping" [18]. Outro exemplo é o caso de um átomo de dois níveis interagindo "dispersivamente" com um campo eletromagnético monocromático (vide referência [19], com $\chi^{(3)} \to 0$ e $\delta \to \infty$).

1.1 O Modelo Jaynes-Cummings com N Átomos

1.1.1 Versão Quântica

O modelo de Jaynes-Cummings de N átomos (MJC-N), também conhecido como Modelo Spin-Bóson ou Modelo do Maser Caótico, consiste em uma descrição simplificada do modelo do Maser de Dicke [22] que descreve a interação quântica entre N átomos de dois níveis com um campo eletromagnético monocromático. Este modelo tem recebido extrema atenção nos últimos anos, principalmente devido ao aprimoramento das técnicas experimentais envolvendo cavidades ópticas de alta qualidade [23–27]. O Hamiltoniano quântico que representa este modelo é

$$\widehat{H} = \hbar\,\omega_0\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \epsilon\widehat{J}_z + \frac{G}{\sqrt{2J}}\left(\widehat{a}\widehat{J}_+ + \widehat{a}^\dagger\widehat{J}_-\right) + \frac{G'}{\sqrt{2J}}\left(\widehat{a}\widehat{J}_- + \widehat{a}^\dagger\widehat{J}_+\right), \tag{1.1}$$

no qual ω_0 é a frequência do campo eletromagnético compatível com a geometria da cavidade óptica, ϵ é a frequência da separação em energia dos níveis dos átomos incidentes, $\widehat{a}$ e $\widehat{a}^\dagger$ são os operadores bosônicos usuais e $\widehat{J}_z$ e $\widehat{J}_\pm$ são os operadores de spin do grupo $SU(2)$, sendo válidas as seguintes relações de comutação:

$$[\widehat{a},\widehat{a}^\dagger] = 1 \qquad \text{e} \qquad \left[\widehat{J}_i,\widehat{J}_j\right] = \imath\hbar\epsilon_{ijk}\widehat{J}_k. \tag{1.2}$$

O Hamiltoniano (1.1) pode ser usado para descrever a realidade física em que N átomos de dois níveis interagem com um campo eletromagnético monocromático, sendo o experimento realizado de tal forma que não haja interação direta entre os átomos. Nesse caso, os átomos de dois níveis, que podem ser descritos formalmente por matrizes de Pauli, simulam em conjunto o efeito de um spin efetivo de valor $J = N/2$.

1.1.2 Versão Clássica

O análogo clássico desse sistema, já bastante estudado (vide referências [28–34]), pode ser obtido através de uma representação em estados coerentes bosônicos e de spin, a qual produz a seguinte Hamiltoniana clássica:

$$\mathcal{H} = \epsilon\left(\frac{{p_1}^2+{q_1}^2}{2} - \hbar J\right) + \omega_0\left(\frac{{p_2}^2+{q_2}^2}{2}\right) + (G_+p_1p_2 + G_-q_1q_2)\sqrt{1-\frac{{p_1}^2+{q_1}^2}{4\hbar J}}, \tag{1.3}$$

sendo $G_\pm = G \pm G'$. As equações clássicas de movimento são dadas por

$$\dot{q_1} = \epsilon p_1 + G_+p_2\sqrt{1-\frac{{p_1}^2+{q_1}^2}{4\hbar J}} - \frac{p_1}{4\hbar J}\frac{(G_+p_1p_2+G_-q_1q_2)}{\sqrt{1-\frac{{p_1}^2+{q_1}^2}{4\hbar J}}}, \tag{1.4}$$

$$\dot{p_1} = -\epsilon q_1 - G_-q_2\sqrt{1-\frac{{p_1}^2+{q_1}^2}{4\hbar J}} + \frac{q_1}{4\hbar J}\frac{(G_+p_1p_2+G_-q_1q_2)}{\sqrt{1-\frac{{p_1}^2+{q_1}^2}{4\hbar J}}}, \tag{1.5}$$

$$\dot{q_2} = \epsilon p_2 + G_+p_1\sqrt{1-\frac{{p_1}^2+{q_1}^2}{4\hbar J}}, \tag{1.6}$$

$$\dot{p_2} = -\epsilon q_2 - G_-q_1\sqrt{1-\frac{{p_1}^2+{q_1}^2}{4\hbar J}}. \tag{1.7}$$

Há alguns pontos interessantes a serem destacados na dinâmica clássica.

Em primeiro lugar, apontamos o fato de que as variáveis com subíndice 1, que são as correpondentes clássicas do spin, têm sua dinâmica restrita a uma região finita do espaço de fase determinada exclusivamente pelo spin total J do sistema, isto é, q_1 e p_1 estarão sempre restritos à região do espaço de fase delimitada pela borda ${p_1}^2 + {q_1}^2 = 4\hbar J$. Esta é a condição clássica (expressa pela raiz quadrada contida na própria Hamiltoniana) oriunda da finitude do espaço de Hilbert do sistema quântico de spins.

Outro ponto interessante é o fato de que o subsistema representado pelas variáveis com subíndice 2 (análogo clássico do campo), fica sujeito a um potencial essencialmente harmônico quando o subsistema 1 se aproxima de sua borda clássica. Isso pode ser visto diretamente a partir das equações de movimento no limite de $\left({p_1}^2 + {q_1}^2\right) \to 4\hbar J$. Em contrapartida, neste limite, as variáveis clássicas de spin devem sofrer variações extremas, como é sugerido pela presença das raízes nos denominadores das equações de movimento.

Mas o ponto mais curioso talvez seja o fato de que ainda no modelo clássico sobrevivam constantes como $\hbar$, geralmente conectada com manifestações quânticas da natureza, ou J, que está conectada com o "tamanho" do spin total quântico. A seguir, faremos uma discussão mais detalhada sobre esse "problema" aparente.

1.1.3 Propriedade de Escala

A propriedade de escala do modelo, a qual foi verificada primeiramente de forma numérica, diz respeito ao seguinte fato. Sejam dois regimes dinâmicos distintos do MJC-N caracterizados pelos pares $(E, \hbar J)$ e $(\tilde{E}, \hbar\tilde{J})$, nos quais E e $\tilde{E}$ representam valores distintos da energia total e $\hbar J$ e $\hbar\tilde{J}$ representam valores distintos do momento angular total. Além disso, as frequências do sistema são as mesmas em qualquer dos dois regimes. Nesse caso, se os regimes forem tais que $E\tilde{J} = \tilde{E}J$, então podemos garantir que a relação

$$\frac{\mathbf{r}(t)}{\sqrt{\hbar J}} = \frac{\tilde{\mathbf{r}}(t)}{\sqrt{\hbar\tilde{J}}}, \tag{1.8}$$

será válida em qualquer instante t. Nesta equação, $\mathbf{r}(t) = \left(q_1(t), p_1(t), q_2(t), p_2(t)\right)$ denota o vetor clássico composto pelas equações de movimento do sistema. Esta propriedade de escala pode ser facilmente demonstrada utilizando-se a equação acima para transformar variáveis no Hamiltoniano clássico. Supondo então a validade de (1.8), mostra-se que

$$\begin{aligned}
\frac{\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p})}{\hbar J} &= \epsilon\left(\frac{{p_1}^2 + {q_1}^2}{2\hbar J} - 1\right) + \omega_0\left(\frac{{p_2}^2 + {q_2}^2}{2\hbar J}\right) + \left(\frac{G_+ p_1 p_2 + G_- q_1 q_2}{\hbar J}\right)\sqrt{1 - \frac{{p_1}^2 + {q_1}^2}{4\hbar J}} \\
&= \epsilon\left(\frac{\tilde{p}_1{}^2 + \tilde{q}_1{}^2}{2\hbar J}\frac{J}{\tilde{J}} - 1\right) + \omega_0\left(\frac{\tilde{p}_2{}^2 + \tilde{q}_2{}^2}{2\hbar J}\right)\frac{J}{\tilde{J}} + \left(\frac{G_+\tilde{p}_1\tilde{p}_2 + G_-\tilde{q}_1\tilde{q}_2}{\hbar J}\right)\frac{J}{\tilde{J}}\sqrt{1 - \frac{\tilde{p}_1{}^2 + \tilde{q}_1{}^2}{4\hbar J}\frac{J}{\tilde{J}}} \\
&= \epsilon\left(\frac{\tilde{p}_1{}^2 + \tilde{q}_1{}^2}{2\hbar\tilde{J}} - 1\right) + \omega_0\left(\frac{\tilde{p}_2{}^2 + \tilde{q}_2{}^2}{2\hbar\tilde{J}}\right) + \left(\frac{G_+\tilde{p}_1\tilde{p}_2 + G_-\tilde{q}_1\tilde{q}_2}{\hbar\tilde{J}}\right)\sqrt{1 - \frac{\tilde{p}_1{}^2 + \tilde{q}_1{}^2}{4\hbar\tilde{J}}}
\end{aligned}$$

$$\therefore \frac{\mathcal{H}(\mathbf{q},\mathbf{p})}{\hbar J} = \frac{\mathcal{H}(\tilde{\mathbf{q}},\tilde{\mathbf{p}})}{\hbar\tilde{J}}. \tag{1.9}$$

Também é interessante notar que as equações de Hamilton mantêm seu formato diante das transformações (1.8) e (1.9):

$$(\dot{q}_i, \dot{p}_i) = \left(\frac{\partial}{\partial p_i}, -\frac{\partial}{\partial q_1}\right) \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\dot{\tilde{q}}_i, \dot{\tilde{p}}_i\right) \sqrt{\frac{J}{\tilde{J}}} = \sqrt{\frac{\tilde{J}}{J}} \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{p}_i}, -\frac{\partial}{\partial \tilde{q}_1}\right) \left[\frac{J}{\tilde{J}} \mathcal{H}(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}})\right],$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\dot{\tilde{q}}_i, \dot{\tilde{p}}_i\right) = \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{p}_i}, -\frac{\partial}{\partial \tilde{q}_1}\right) \mathcal{H}(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}). \tag{1.10}$$

Essa "degenerescência" da dinâmica clássica em relação ao parâmetro $\frac{E}{\hbar J}$ é oriunda de seu processo de obtenção via estados coerentes. De fato, conforme foi demonstrado em [30], tal dinâmica pode ser obtida sem qualquer imposição do tipo $\hbar \to 0$ ou $J \to \infty$. Nesse sentido, dentro do contexto dos trabalhos [32,35–39], que apresentam um vetor tridimensional unitário como o spin clássico adequado, a Hamiltoniana (1.3) e toda a dinâmica gerada por ela, ainda não seriam "completamente" clássicos. De qualquer modo, a forma final clássica pode ser obtida facilmente com aplicação direta da prescrição[3] $\hbar \to 0$ e $J \to \infty$ com $\hbar\sqrt{J(J+1)} \cong \hbar J = 1$ sobre a Hamiltoniana (1.3):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{cl} &= \lim_{\substack{\hbar \to 0 \\ J \to \infty \\ \hbar J \to 1}} \mathcal{H} \\ &= \epsilon \left(\frac{{p_1}^2 + {q_1}^2}{2} - 1\right) + \omega_0 \left(\frac{{p_2}^2 + {q_2}^2}{2}\right) + (G_+ p_1 p_2 + G_- q_1 q_2) \sqrt{1 - \frac{{p_1}^2 + {q_1}^2}{4}}. \end{aligned} \tag{1.11}$$

1.1.4 Integrabilidade no MJC-N

O análogo clássico do MJC-N é um sistema não-integrável de dois graus de liberdade, que apresenta vários regimes de caos e regularidade em função de seus parâmetros de acoplamento $G_\pm = G \pm G'$, com $G, G' \geq 0$. Em [34] apresentamos o cálculo do volume caótico, isto é, uma estimativa da quantidade de regiões caóticas que preenchem o espaço de fase em cada regime dinâmico do sistema. Nesse cálculo fica claro que o sistema pode apresentar desde regimes completamente integráveis até regimes completamente ergódicos. Além do caso trivial em que $G = G' = 0$, o sistema é integrável também em outros dois regimes, para os quais são conhecidas as seguintes constantes de movimento (além de $\mathcal{H}$):

$$(G, G') = (\forall, 0) \qquad \to \qquad \mathcal{C}_+ = \left(\frac{{p_2}^2 + {q_2}^2}{2}\right) + \left(\frac{{p_1}^2 + {q_1}^2}{2} - \hbar J\right), \tag{1.12}$$

$$(G, G') = (0, \forall) \qquad \to \qquad \mathcal{C}_- = \left(\frac{{p_2}^2 + {q_2}^2}{2}\right) - \left(\frac{{p_1}^2 + {q_1}^2}{2} - \hbar J\right). \tag{1.13}$$

As constantes quânticas correspondentes são: $\widehat{\mathcal{C}}_\pm = \hbar \widehat{a}^\dagger \widehat{a} \pm \widehat{J}_z$. Neste trabalho entretanto, estaremos interessados principalmente no estudo dos regimes mistos, nos quais convivem caos e regularidade.

[3] Essa prescrição leva ao adensamento do espectro do spin e à localização do estado coerente generalizado para a álgebra correspondente.

1.2 Medindo o Emaranhamento

Como quantificar o emaranhamento? A medida de emaranhamento é única? Como diferenciar as correlações quânticas das clássicas? Todas essas são questões vitais para o avanço de áreas modernas como a computação quântica e teoria de correções de erros [40,41], ou para o entendimento de questões básicas relacionadas a não-localidade, desigualdades de Bell e purificação de estados quânticos [42–44].

Essas questões já foram respondidas para o caso de sistemas bipartites globalmente puros, pois nesses casos a entropia de von Neumann parcial é a medida "adequada" de emaranhamento, como é apontado no trabalho de Vedral e colaboradores [45]. Façamos então uma breve revisão sobre conceitos úteis referentes à entropia, assumindo daqui por diante que de fato a entropia de von Neumann é uma boa medida de emaranhamento.

1.2.1 Entropia de von Neumann

Em 1927, baseado em argumentos de Einstein (1914) e Szilard (1925), von Neumann define quanticamente sua entropia como uma generalização da expressão clássica de Boltzmann e Gibbs,

$$S(\widehat{\rho}) = -k_B Tr[\widehat{\rho}\ln\widehat{\rho}], \tag{1.14}$$

sendo $k_B = 1.38 \times 10^{-16}$ erg/K a constante de Boltzmann. Daqui por diante, seguindo o procedimento usual, faremos $k_B = 1$, o que corresponde a medir temperatura em ergs em vez de Kelvin, de modo que a entropia será uma quantidade adimensional.

Como é de conhecimento geral, a mecânica quântica está toda formulada em termos de *observáveis* e *estados*. Os observáveis, como posição, momento, momento angular, etc., são matematicamente descritos por operadores auto-adjuntos no espaço de Hilbert. Por outro lado, os estados - que em geral não são puros - são descritos por uma matriz densidade $\widehat{\rho}$, isto é, um operador Hermiteano, positivo-definido, com traço unitário. Nesse formalismo, o valor esperado de um observável $\widehat{A}$ no estado $\widehat{\rho}$ é dado por $\langle\widehat{A}\rangle = Tr[\widehat{\rho}\widehat{A}]$.

Agora é importante dizer que a entropia não é um observável, isto é, não existe um operador com a propriedade de que seu valor esperado em algum estado resulte na definição (1.14). Trata-se de uma função de estado que, segundo alguns autores [46], pode ser "corretamente" definida somente no referencial da mecânica quântica, no qual existe uma definição precisa para o conceito de "número de microestados" acessíveis ao sistema. Um exemplo simples pode ilustrar a precisão da definição quântica. Seja o estado $\widehat{\rho} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}|k\rangle\langle k|$ *totalmente* misturado, isto é, de máxima ignorância, em que todos os estados puros $|k\rangle\langle k|$ são igualmente prováveis. Nesse caso, a entropia de von Neumann será $S = \ln N$. Lembrando da célebre fórmula de Boltzmann $S = \ln W$ ($k_B = 1$), sendo W o número de microestados acessíveis, vemos que no análogo quântico, o conceito de "microestado" está dado diretamente pelo estado puro $|k\rangle\langle k|$. Fica claro então que a entropia de von Neumann é um medidor do número de estados puros acessíveis ao sistema. Assim, a entropia será nula somente no caso de um único estado puro, isto é, no caso em que o estado do sistema é totalmente conhecido, sem qualquer ignorância. Obviamente, ainda nesse caso, o carácter probabilístico da mecânica quântica ainda está presente, visto que cada estado puro tem sua incerteza associada.

Neste trabalho estaremos interessados na entropia como uma ferramenta adequada para se medir o emaranhamento num sistema bipartite. Seja então um estado globalmente puro $\widehat{\rho}_{12}$ de um sistema bipartite composto pelos subsistemas 1 e 2. Seguindo o procedimento

usual da mecânica quântica, podemos definir as subdinâmicas descritas por $\widehat{\rho}_1 = Tr_2[\widehat{\rho}_{12}]$ e $\widehat{\rho}_2 = Tr_1[\widehat{\rho}_{12}]$, e então definir a entropia de cada subsistema como $S(\widehat{\rho}_1)$ e $S(\widehat{\rho}_2)$, em acordo com (1.14). De forma ainda mais completa, devemos nos lembrar que a entropia será uma função do tempo, visto que o operador densidade também o é, de modo que podemos escrever a entropia do subsistema no formato

$$S_k(t) = -Tr_k[\widehat{\rho}_k(t)\ln\widehat{\rho}_k(t)], \tag{1.15}$$

sendo k o subíndice que se refere ao subsistema. Então, levando em conta a dependência temporal também para o sistema global, teremos

$$\begin{aligned} S(t) &= -Tr[\widehat{\rho}(t)\ln\widehat{\rho}(t)] = -Tr\left[\widehat{\mathcal{U}}(t)\widehat{\rho}(0)\widehat{\mathcal{U}}^{\dagger}(t)\ln\left\{\widehat{\mathcal{U}}(t)\widehat{\rho}(0)\widehat{\mathcal{U}}^{\dagger}(t)\right\}\right] \\ &= -Tr\left[\widehat{\mathcal{U}}(t)\widehat{\rho}(0)\widehat{\mathcal{U}}^{\dagger}(t)\widehat{\mathcal{U}}(t)\ln\{\widehat{\rho}(0)\}\widehat{\mathcal{U}}^{\dagger}(t)\right] \\ &= -Tr\left[\widehat{\rho}(0)\underbrace{\widehat{\mathcal{U}}^{\dagger}(t)\widehat{\mathcal{U}}(t)}_{\mathbf{1}}\ln\{\widehat{\rho}(0)\}\underbrace{\widehat{\mathcal{U}}^{\dagger}(t)\widehat{\mathcal{U}}(t)}_{\mathbf{1}}\right] \\ &= -Tr\left[\widehat{\rho}(0)\ln\widehat{\rho}(0)\right] = S(0), \end{aligned} \tag{1.16}$$

sendo $\widehat{\mathcal{U}}(t) = e^{\frac{\widehat{H}t}{\imath\hbar}}$ o operador unitário de evolução temporal. Este cálculo foi realizado com o auxílio da relação $\ln(\widehat{\mathcal{U}}\,\widehat{\rho}\,\widehat{\mathcal{U}}^{\dagger}) = \widehat{\mathcal{U}}\,\ln(\widehat{\rho})\,\widehat{\mathcal{U}}^{\dagger}$, que pode ser demonstrada através da expansão da função logarítmica em série de potências e da propriedade $\widehat{\mathcal{U}}\widehat{\mathcal{U}}^{\dagger} = \widehat{\mathcal{U}}^{\dagger}\widehat{\mathcal{U}} = 1$. Então, podemos concluir que se o estado global é puro, $S(t) = S(0) = 0$. Com este resultado e utilizando-se a desigualdade de Araki e Lieb [47]

$$|S_1(t) - S_2(t)| \leq S_{12}(t) \leq S_1(t) + S_2(t), \tag{1.17}$$

mostra-se imediatamente que

$$S_1(t) = S_2(t). \tag{1.18}$$

Esta relação corrobora a conveniência da entropia como medida de emaranhamento. O emaranhamento do sistema 1 com o sistema 2 medido pela entropia S_1 é igual ao emaranhamento do sistema 2 com o sistema 1 medido pela entropia S_2, o que é bastante razoável uma vez que temos apenas dois subsistemas interagindo.

Apesar de toda a conveniência conceitual da entropia de von Neumann, sua implementação pode ser um tanto complicada na prática. De fato, mesmo conhecendo-se $\widehat{\rho}$ exatamente, sua diagonalização (mesmo numérica) pode ser extremamente trabalhosa, ainda mais porque em geral trabalhamos com matrizes de dimensão infinita. Isso sem mencionar o fato de que a diagonalização precisaria ser feita a cada instante de tempo. Nesse contexto, define-se uma quantidade mais apropriada: a *entropia linear*.

1.2.2 Entropia Linear

Em seu artigo de revisão de 1957 [48], U. Fano já apontava para a potencialidade da grandeza $Tr[\widehat{\rho}^2]$ como uma medida de informação para o caso de estados globais puros. Mais

tarde, levando em conta também o fato de que estados puros são *idempotentes*[4], vários trabalhos [49, 50] utilizaram o conceito de *entropia linear*,

$$\delta(\widehat{\rho}) = 1 - Tr[\widehat{\rho}^2], \tag{1.19}$$

o qual já havia sido utilizado em [51]. Esta medida, também chamada de *defeito de idempotência*, traz as mesmas informações conceituais da entropia de von Neumann em relação à pureza e à separabilidade quando aplicada a sistemas globalmente puros. Alguns limites particulares mostrando a equivalência conceitual com a entropia de von Neumann podem ser facilmente ilustrados. Por exemplo, para um estado puro devidamente normalizado ($Tr[\widehat{\rho}] = 1$), vale a condição de idempotência $\widehat{\rho}^2 = \widehat{\rho}$, e consequentemente $\delta = 0$, o que também acontece para a entropia de von Neumann. Por outro lado, se $\widehat{\rho}$ não é idempotente, então $0 \leq Tr[\widehat{\rho}^2] < 1$, e fatalmente $0 < \delta \leq 1$.

Note-se que apesar da equivalência qualitativa (ambas são zero ou ambas são positivas), as entropias em geral não têm a mesma amplitude. Façamos o cálculo do caso em que o operador densidade representa um estado completamente misturado, como fizemos há pouco para a entropia de von Neumann. Nesse caso, para a entropia linear teremos $\delta = 1 - \frac{1}{N}$, enquanto $S = \ln N$. Esses resultados de fato mostram que

$$0 \leq \delta \leq 1 \qquad \text{e} \qquad 0 \leq S \leq \infty. \tag{1.20}$$

Apesar da diferença em amplitude, utilizaremos também a entropia linear como uma medida de emaranhamento no caso de sistemas bipartites globalmente puros, o que é razoável dada a semelhança qualitativa com a entropia de von Neumann. Além disso, em acordo com [50], utilizaremos a entropia linear também como uma medida de *descoerência* (perda de coerência de fase) do estado do subsistema, o qual evoluirá (quase sempre) para um estado não puro. Portanto, dentro do contexto em que trabalharemos, emaranhamento e descoerência serão conceitos intimamente conectados (o que não é verdade em geral) e ambos serão quantificados pela mesma grandeza: a entropia linear.

1.3 Estados Iniciais "Clássicos"

Começamos a apresentar agora os principais resultados obtidos no estudo da descoerência no MJC-N. A idéia principal desta etapa do trabalho é trazer alguma informação sobre a relação entre a descoerência do subsistema e a condição inicial clássica. Nesse sentido, estaremos estabelecendo conexões entre grandezas que pertencem a mundos diferentes (clássico ou quântico).

A medida de emaranhamento - entropia linear - que também mostra como o estado do subsistema perde coerência, já foi definida. Resta então discutirmos como fazer a conexão com a condição inicial clássica no espaço de fase. De fato, a receita mais razoável é utilizar como estados iniciais os estados mais clássicos possíveis, isto é, os estados iniciais quânticos devem ser estados coerentes centrados sobre a condição inicial clássica, cuja influência sobre a entropia desejamos observar. É assim que tentaremos fazer a conexão com o mundo clássico, a exemplo do que foi feito nos trabalhos [16, 20, 21].

Construímos então o seguinte estado inicial puro

$$|\psi(0)\rangle = |z\rangle \otimes |w\rangle, \tag{1.21}$$

[4] A álgebra linear classifica como idempotente todo operador que satisfaça a relação $\widehat{A}^2 = \widehat{A}$.

o qual é composto pelo produto de um estado coerente bosônico $|z\rangle$, com um estado coerente do grupo $SU(2)$ $|w\rangle$, definidos respectivamente como

$$|z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{z\widehat{a}^\dagger}|0\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|z\rangle, \tag{1.22}$$

$$|w\rangle = \frac{1}{(1+|w|^2)^J} e^{w\frac{\hat{J}_+}{\hbar}}|J,-J\rangle = \frac{1}{(1+|w|^2)^J} \sum_{m=0}^{2J} \sqrt{\frac{(2J)!}{(2J-m)!m!}} w^m|m\rangle, \tag{1.23}$$

para os quais utilizamos as seguintes relações de conexão com o espaço de fase:

$$z = \frac{q_2 + \imath p_2}{\sqrt{2\hbar}}, \tag{1.24}$$

$$w = \frac{q_1 + \imath p_1}{\sqrt{4\hbar J - ({q_1}^2 + {p_1}^2)}}. \tag{1.25}$$

Como já foi discutido anteriormente, esperamos que esses estados simulem tanto melhor um "estado clássico" quanto mais próximos estiverem do limite clássico definido por: $\hbar \to 0$, $J \to \infty$ e $(\hbar J) \to 1$.

1.4 Descoerência e Efeito de Borda no MJC-N

Iniciamos esta seção enfatizando que não estamos trabalhando com resevatórios. Trata-se de acoplar dois subsistemas e observar, através da entropia linear[5], como ocorre a *descoerência* do estado puro inicial. O conceito de *taxa de descoerência*, definido aqui como a derivada da entropia linear ($\frac{d\delta}{dt}$), nos será particularmente útil nesse estudo.

Na primeira etapa do trabalho estudamos um regime totalmente integrável do MJC-N (eq. 1.1 e 1.3 com $G' = 0$) buscando informações sobre a influência da separatriz de movimento clássica sobre a dinâmica de emaranhamento. Dado que a separatriz é uma região de alta instabilidade, assim como a região caótica, espera-se que a descoerência ocorra de forma tão rápida quanto no caso caótico [16].

Na figura 1.1, na qual mostramos a seção de Poincaré do MJC-N para o regime integrável, destacamos as três condições iniciais sobre as quais centramos os estados coerentes atômicos (ou de spin).

[5]Note-se que a entropia linear, extremamente útil como medida de pureza, trará também informações referentes ao emaranhamento e à descoerência, os quais estarão inevitavelmente conectados na dinâmica do sistema. Para que o estado inicial perca coerência é necessário que os subsistemas se emaranharem!

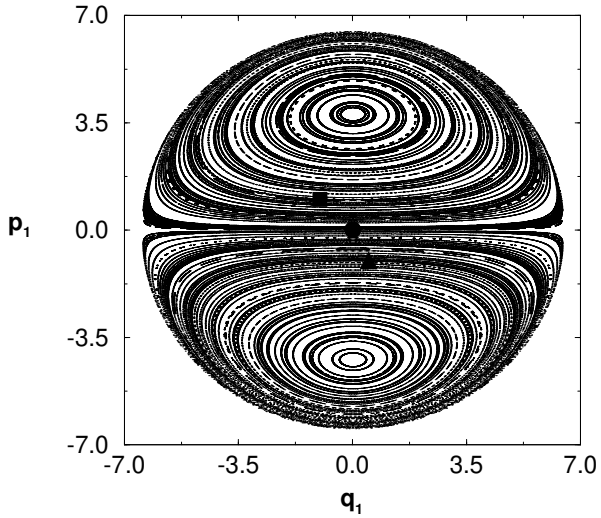

Figura 1.1: Seção de Poincaré ($q_2 = 0$ e $p_2 > 0$) para o grau de liberdade atômico (ou de spin) no caso ressonante ($\epsilon = \omega_0 = 1$), com energia $E = 19.83$, $J = 10.5$, $G = 0.5$ e $G' = 0$. As marcas representam as várias escolhas para o centro do pacote coerente atômico inicial: círculo para ($q_1 = 0.01$, $p_1 = 0.01$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 7.7834$), triângulo para ($q_1 = 0.5$, $p_1 = -1.0$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 8.2160$) e quadrado para ($q_1 = -1.0$, $p_1 = 1.0$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 7.81865$).

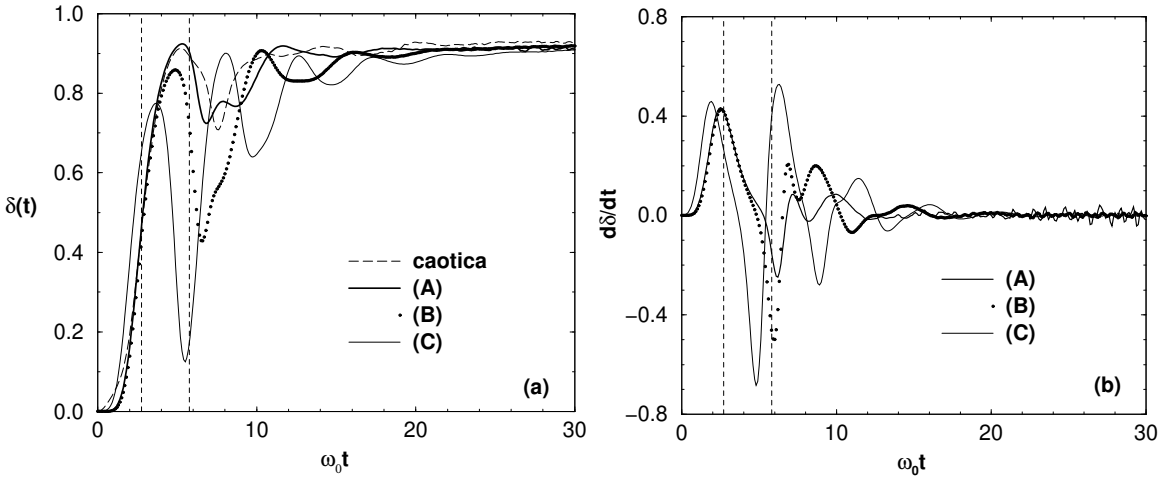

Figura 1.2: (a) Entropia linear em função do tempo para os mesmos parâmetros da figura 1.1. As letras correspondem às condições iniciais escolhidas na seção de Poincaré: **(A)** para o círculo, **(B)** para o triângulo e **(C)** para o quadrado. A curva tracejada representa um caso de condição inicial caótica com mesma energia ($q_1 = 0.5$, $p_1 = -1.0$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 8.4280$); (b) taxa de descoerência em função do tempo para os casos mostrados em (a). As linhas tracejadas verticais foram colocadas sobre os instantes $\omega_0 t \approx 2.7$ e $\omega_0 t \approx 5.8$.

Note-se que a escolha do estado inicial, $|\psi(0)\rangle = |z(q_2, p_2)\rangle \otimes |w(q_1, p_1)\rangle$, juntamente com a escolha do número de átomos $N = 2J$ (ou do spin total), determinam a energia ($E = \langle\psi(0)|\widehat{H}|\psi(0)\rangle$) e a borda (definida por J) do análogo clássico. As frequências e constantes de acoplamento recebem os mesmos valores numéricos no sistema quântico e clássico.

Calculamos então as entropias lineares correspondentes a cada condição inicial mostrada na figura 1.1 e os resultados estão dispostos na figura 1.2. Note-se que a entropia linear

cresce tão rapidamente quanto aquela do caso caótico. Podemos dizer então que a taxa de crescimento da entropia é sensível à condição inicial clássica sobre a qual foi centrado o estado coerente inicial, o que corrobora os resultados obtidos na literatura [16, 20, 21].

Há entretanto uma outra informação interessante a respeito do processo de emaranhamento no MJC-N. Verificamos que o primeiro máximo na entropia linear está conectado com os instantes em que o pacote atômico visita a borda clássica do espaço de fase, isto é, se observarmos a função Q para o grau de liberdade atômico, veremos que existe uma conexão entre os instantes de sua aproximação (afastamento) da borda clássica e o instante máximo (mínimo) local da entropia linear. Aqui entretanto, para ilustrar numericamente esta relação, utilizaremos um ente clássico: um ensemble de condições iniciais (um volume de raio R no espaço de fase quadridimensional) centrado sobre a condição inicial que se quer estudar. Trata-se, no fundo, de uma espécie de projeção da função densidade de Liouville sobre o espaço de fase, uma vez que não atribuímos uma probabilidade para cada ponto e também porque vemos apenas a "sombra" do ensemble projetado no espaço de fase atômico.

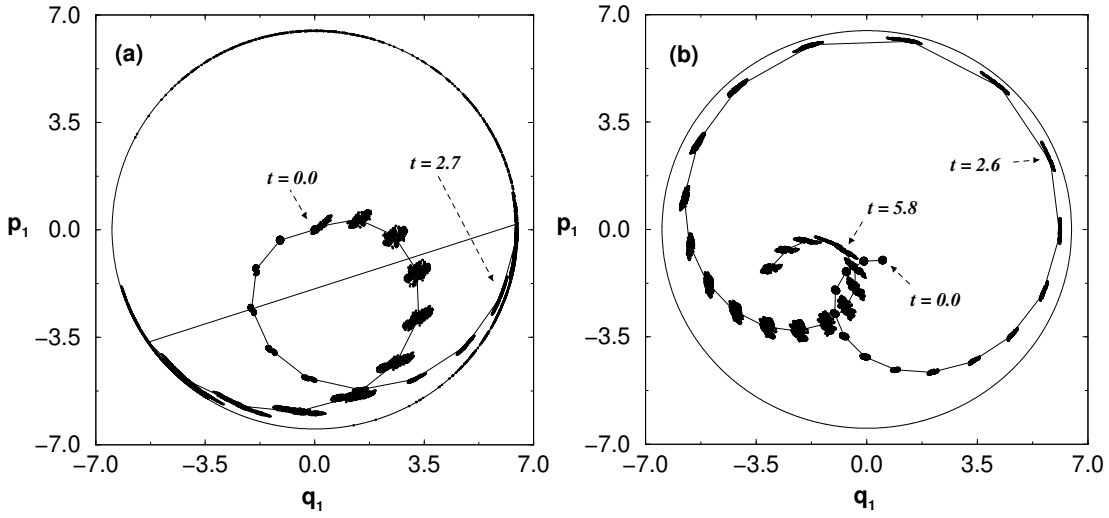

Figura 1.3: Projeção no plano (q_1, p_1) da evolução temporal de um ensemble de condições iniciais: (a) ensemble centrado no círculo da figura 1.1, com $\Delta t = 0.3$; (b) ensemble centrado no triângulo, com $\Delta t = 0.2$. Os vários segmentos de reta indicam a evolução do centro do ensemble. O círculo externo representa a borda do espaço de fase do grau de liberdade atômico.

Na figura 1.3 mostramos a projeção da evolução temporal do ensemble clássico evidenciando os instantes de aproximação e afastamento da borda clássica. O "pacote clássico" tem dimensões muito menores que o pacote coerente quântico utilizado (com raio da ordem de 1 em unidades do espaço de fase), mas seu comportamento é bastante similar ao observado para a função Q atômica[6]. Note-se que de fato o instante de máxima *deslocalização clássica* (instante da aproximação da borda) concorda com o instante de pico na taxa de descoerência do estado (ver figura 1.2-b). De fato, em alguns casos essa parece ser a correlação: distância da borda com a *taxa de descoerência* (derivada temporal da entropia linear). Entretanto, em alguns casos, a conexão clássica é melhor quando relacionada com a própria entropia. Supomos que esta defasagem na concordância dos tempos é devida ao fato de que a entropia

[6]G. Q. Pellegrino (DFM-UFSCar) em comunicação particular. De fato, a coincidência entre os "pacotes" quântico e clássico será tanto melhor a tempos curtos quanto mais próximos estivermos do limite clássico [15].

linear é uma grandeza quântica determinada por um pacote com largura finita. Assim, quanto mais próximos estivermos do limite clássico, mais localizado estará o pacote (pelo menos para tempos curtos) e melhor será a conexão com o ponto clássico.

1.4.1 O Efeito de Borda

À conexão das oscilações da entropia linear com a borda clássica, demos o nome de *efeito de borda*. Para que possamos entender do que se trata, precisamos antes entender o que é a borda, o que pode ser feito através da análise do processo de tomada do limite clássico explícito na referência [30]. O procedimento utilizado pelos autores foi essencialmente o seguinte: (1) toma-se o valor esperado do Hamiltoniano quântico em estados coerentes e (2) realizam-se transformações canônicas que levam a uma representação no espaço de fase. Acontece que nesse processo, estamos fazendo uma projeção estereográfica de um sistema que é originalmente representado por um vetor tridimensional que anda sobre um esfera de raio constante (o spin quântico $\widehat{\mathbf{J}} = (\widehat{J}_x, \widehat{J}_y, \widehat{J}_z)$) para um sistema representado num espaço de fase bidimensional clássico definido pelo par canônico (q_1, p_1) [34]. Desta forma, a projeção estereográfica transformou o pólo norte da esfera de spin (ou esfera de Bloch) em um círculo no espaço de fase: a *borda*. Então, quando observamos por exemplo a funçao Q se aproximando da borda e se deslocalizando sobre a borda clássica, devemos na realidade entender que o estado quântico está se aproximando do pólo norte da esfera de spin.

Entretanto, para que a transformação de uma esfera em um círculo seja topologicamente possível, é preciso que se "fure" a esfera, por exemplo no pólo norte, retirando-lhe este ponto. De fato, se isso não fosse feito, o teleporte clássico seria possível: uma trajetória clássica que atingisse a borda de um lado, poderia sair instantaneamente em seu diâmetro oposto, visto que esses dois pontos seriam o mesmo. De fato, não é isso o que se observa numericamente [34]. Tipicamente, uma trajetória clássica que atinge a borda em determinado ponto viaja através dela com alta velocidade e sai de outro lado depois de alguns instantes. Isto é, a transformação topologicamente correta proíbe a teleportação clássica.

Nesse sentido, concluímos que a borda clássica, que faz com que o ensemble clássico se "deslocalize", é na realidade uma representação, talvez não a melhor, para o pólo norte da esfera de spin, de modo que devemos entender que o pacote está na realidade se "localizando" quando se aproxima dela. Por outro lado, se esta deslocalização não existe de fato, então como explicar a correspondência entre os instantes de aproximação (afastamento) da borda clássica com os instantes de máximos (mínimos) locais da entropia?

Como proposta de explicação, fazemos algumas considerações **heurísticas** sobre a energia média de cada subespaço e sobre a energia de interação. Analisemos de fato a própria Hamiltoniana semiclássica, lembrando que ela é dada pelo valor esperado do Hamiltoniano quântico em estados coerentes. Agora representamos a Hamiltoniana clássica como: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_{12}$, sendo que os dois primeiros termos representam as Hamiltonianas livres e o último representa a Hamiltoniana de interação. Lembremo-nos agora que $-\epsilon\hbar J \leq \mathcal{H}_1 \leq \epsilon\hbar J$. Suponhamos agora que a energia inicial seja $\mathcal{H} = 20\epsilon\hbar J$. Agora imaginemos que em determinado instante de tempo, a energia estivesse distribuída da seguinte forma particular: $\mathcal{H}_1 = \epsilon\hbar J$, $\mathcal{H}_2 = 19\epsilon\hbar J$ e $\mathcal{H}_{12} = 0$. Note-se que este é o caso em que a energia do átomo é máxima (como no caso de um pacote coerente sobre a borda) e a energia da interação é nula. Agora, cabe a questão: qual será a direção do fluxo de energia? Bem, como o átomo e o campo estão praticamente com energia máxima possível, espera-se que a energia "escoe" para a interação. Olhemos somente para o campo, que está com energia bastante grande. Onde ele deve "despejar" sua

energia, se o átomo não pode mais recebê-la? Nesse sentido, quando o átomo está com sua energia máxima (borda), a interação fica mais "importante" no sistema e o emaranhamento é favorecido. Nesses instantes, observam-se os máximos locais na taxa de emaranhamento.

De acordo com esta argumentação, devemos esperar que esse efeito seja mais pronunciado quanto maior for a energia total. De fato é o que pode ser observado na figura 1.4, na qual mostramos que a descoerência ocorre de forma cada vez mais rápida com o incremento da energia inicial.

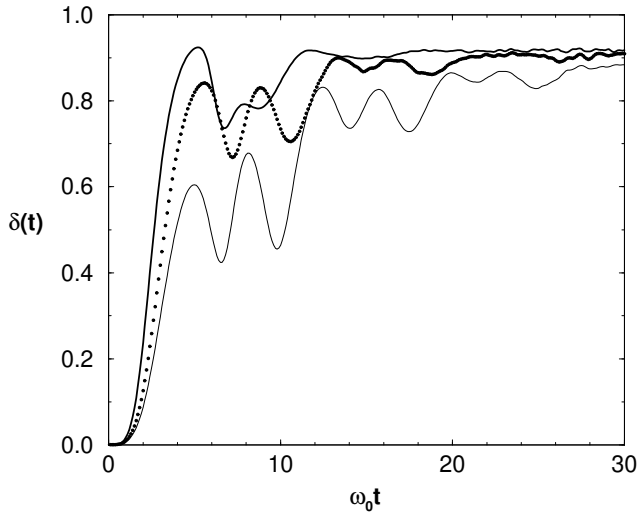

Figura 1.4: Entropia linear em função do tempo para a condição inicial representada pelo círculo da figura 1.1, com os parâmetros lá indicados, mas com diferentes valores de energia: curva grossa para $E = 19.83$, curva pontilhada para $E = 8.5$ e curva fina para $E = 4.5$.

Admitindo a validade de tal argumentação, estaremos admitindo, implicitamente, que o mesmo fenômeno pode ocorrer em sistemas sem borda, bastando que a trajetória clássica esteja restrita a uma região finita do espaço de fase. Ora, mas é isso o que acontece com as trajetórias regulares. Suponhamos então uma órbita periódica projetada em um dos subespaços de fase. Em qualquer sistema Hamiltoniano clássico, para um valor fixo de energia, haverá uma "borda" no espaço de fase no sentido de que regiões que lhe sejam externas serão energeticamente proibidas. Neste caso, em geral, a projeção da órbita pode ser tal que haverá instantes de aproximação e afastamento da borda de energia. Então, segundo a argumentação acima, aqui também deveríamos observar máximos e mínimos na taxa de descoerência. Por outro lado, fora do contexto do MJC-N, isso não passa de uma conjectura a ser testada.

No contexto do efeito de borda, a rápida descoerência observada nos casos de condições iniciais caóticas e sobre a separatriz, podem ser entendidas como condições que favorecem a "interação", no sentido de que elas levam a trajetória clássica mais rapidamente para a borda, de modo que passa a valer a argumentação de máxima energia.

Os resultados apresentados nesta seção para o MJC-N foram publicados em 1999, com as colaborações da Profa. M. Carolina Nemes (ICEx - UFMG, MG) e Dr. Giancarlo Q. Pellegrino (DM - UFSCar, SP) [52].

1.5 Recoerências Parciais e Órbitas Periódicas

Uma vez estudado e "entendido" o efeito de borda, a continuação natural do trabalho foi o estudo sistemático da correspondência entre as *oscilações na entropia linear*[7] e a simetria da trajetória clássica correspondente. O procedimento adotado para este estudo foi o mesmo que o anterior: escolhemos condições iniciais da seção de Poincaré do sistema clássico, centramos estados coerentes nessas condições e então calculamos a entropia linear para cada condição inicial. Na figura 1.5, mostramos a seção de Poincaré com marcas sobre as condições iniciais escolhidas. Nesta etapa do trabalho, os cálculos foram todos realizados com $\epsilon = \omega_0 = 1$ (ressonância), $E = 8.5$, $J = 4.5$, $G = 0.5$ e $G' = 0.2$ (regime não-integrável). Na figura 1.6, mostramos a projeção das órbitas periódicas (círculos da figura 1.5) no subespaço atômico, indicando os instantes de máxima aproximação e máximo afastamento da borda clássica. Por razões óbvias, essas órbitas serão identificadas como órbita *elíptica* e órbita 8. Na figura

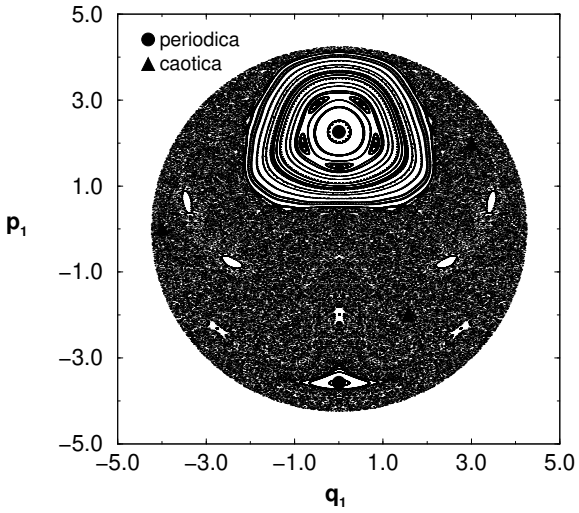

Figura 1.5: Seção de Poincaré dada por $q_2 = 0$ e $p_2 > 0$ para $J = 4.5$ num regime ressonante ($\epsilon = \omega_0 = 1$) e não-integrável ($G = 0.5$ e $G' = 0.2$). As marcas representam as várias escolhas para o centro do pacote coerente inicial, tendo sido adotados círculos para condições regulares e triângulos para as caóticas.

1.7, apresentamos as curvas da entropia linear, sua derivada temporal (taxa de descoerência) e o valor esperado de $\widehat{J}_z$, que dá uma medida da energia média atômica. Esses resultados evidenciam o que já dissemos anteriormente, quando estudamos o efeito de borda, mas agora a conexão é feita para todos os máximos e mínimos. De fato, verifica-se que os instantes de máximo e mínimo na taxa de descoerência (derivada da entropia), concordam com os instantes de máximo e mínimo em $\frac{\widehat{J}_z}{J}$. Esta última grandeza mostra-se bastante adequada para este estudo pelo fato de trazer a informação imediata sobre a distância da borda clássica. De fato, classicamente, em estados coerentes, temos

$$\langle \widehat{J}_z \rangle = \frac{{p_1}^2 + {q_1}^2}{2} - \hbar J, \tag{1.26}$$

[7]Estamos nos referindo às oscilações na entropia linear como *recoerências parciais*, as quais descrevem, por definição, variações na "quantidade" de emaranhamento entre os subsistemas. Se a entropia voltar a se anular, então a recoerência será total.

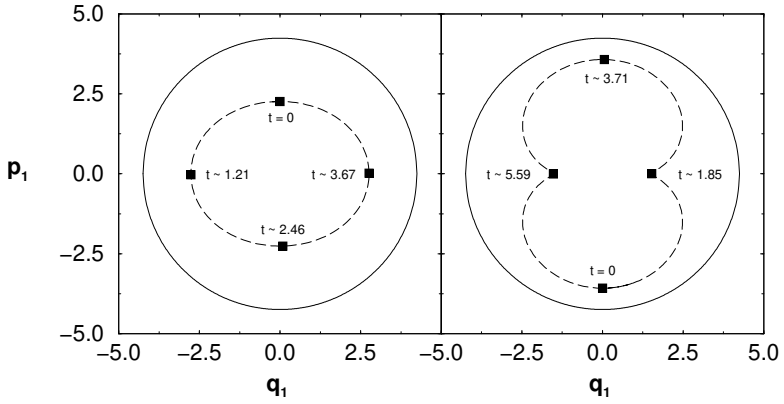

Figura 1.6: Projeção no subespaço atômico de duas órbitas periódicas estáveis (círculos da figura 1.5). O círculo mais externo representa a borda clássica. As condições iniciais escolhidas foram: ($q_1 = 0$, $p_1 = 2.261$, $q_2 = 0$, $p_2 = 3.423276$) para a órbita elíptica de período $\tau_e = 4.89$ e ($q_1 = 0$, $p_1 = -3.577$, $q_2 = 0$, $p_2 = 5.221656$) para a órbita 8 de período $\tau_8 = 7.45$.

que mostra que $\langle \widehat{J}_z \rangle$ mede essencialmente o quadrado de um "raio" no espaço de fase clássico. Obviamente, essa imagem vale somente em tempos muito curtos, quando o pacote ainda mantem alguma localização.

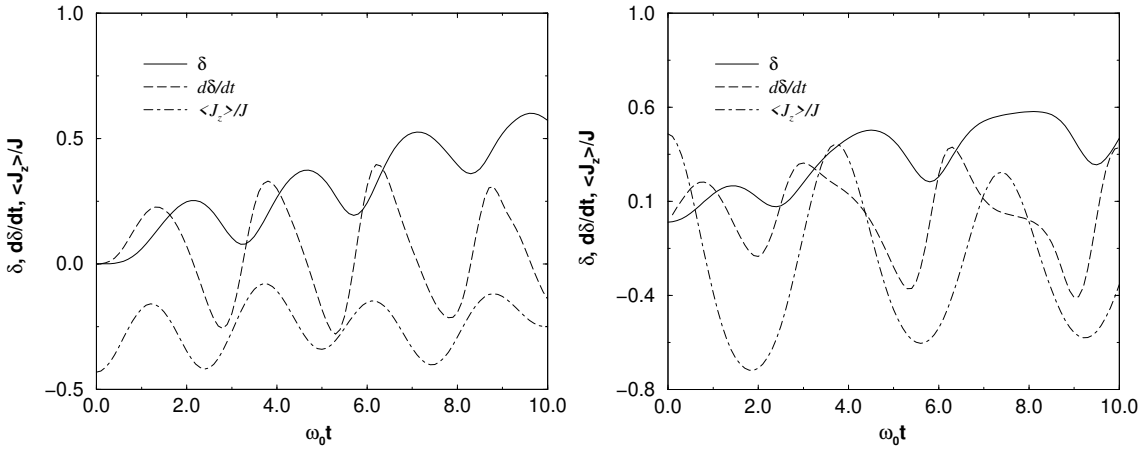

Figura 1.7: Entropia linear (linhas sólidas), sua derivada temporal $\frac{d\delta}{dt}$ (linhas tracejadas), e valor esperado normalizado $\frac{\langle \widehat{J}_z \rangle}{J}$ (linhas pontuadas e tracejadas) em função de $\omega_0 t$. À esquerda, essas quantidades foram calculadas para a órbita regular elíptica. Note-se a correspondência entre os máximos e mínimos locais de $\frac{d\delta}{dt}$ e $\frac{\langle \widehat{J}_z \rangle}{J}$. À direita, as mesmas grandezas para a órbita 8. Neste caso, somente os mínimos de $\frac{d\delta}{dt}$ e $\frac{\langle \widehat{J}_z \rangle}{J}$ apresentam clara correspondência.

Um outro resultado bastante importante na direção da verificação do efeito de borda ou da conexão entre as oscilações da entropia linear e a borda do espaço de fase é o caso de uma órbita circular. Neste caso, de acordo com nossa argumentação, como não há aproximação ou afastamento da borda, não devemos ver qualquer oscilação na entropia linear. A figura 1.8 mostra que de fato isso acontece. As pequeníssimas oscilações remanescentes são provavelmente oriundas do fato de que o pacote quântico tem largura finita, o que faz com que toros

vizinhos da órbita circular contribuam com alguma informação para a entropia.

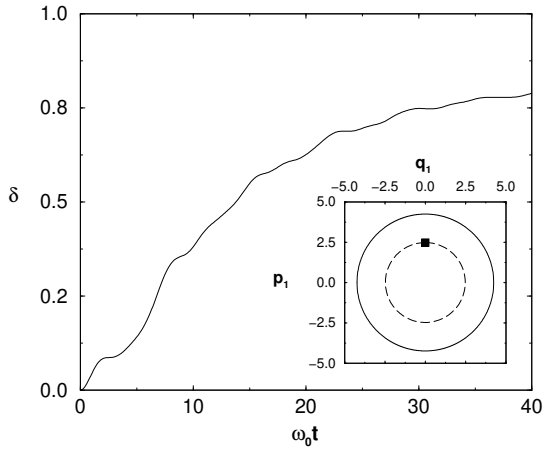

Figura 1.8: Com energia $E = 8.5$, no caso integrável ($G = 0.5$ e $G' = 0.0$) e ressonante ($\epsilon = \omega_0 = 1$), mostramos a entropia linear para uma condição inicial sobre a órbita periódica *circular* (gráfico interno): ($q_1 = 0.0$, $p_1 = 2.47675$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 3.563642$).

A conexão das oscilações com a borda também se manifesta no caso caótico, embora o efeito seja apreciável apenas a tempos curtos, quando a entropia ainda está abaixo de seu patamar. As figuras 1.9 e 1.10 ilustram o caso caótico.

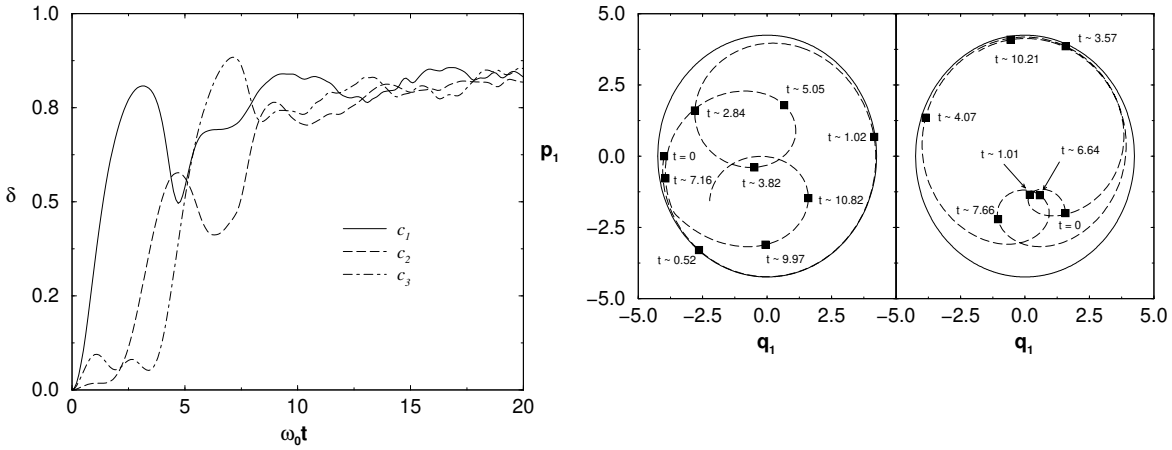

Figura 1.9: (À esquerda) Entropia linear para as condições iniciais caóticas indicadas pelos triângulos da figura 1.5: linha sólida para c_1 ($q_1 = -4.0$, $p_1 = 0.0$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 3.162278$), linha tracejada para c_2 ($q_1 = 1.57$, $p_1 = -2.0$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 5.680465$) e linha ponto-tracejada para c_3 ($q_1 = 3.0$, $p_1 = 2.0$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 2.942413$). (À direita) Projeções atômicas das órbitas c_1 e c_2. Vários instantes são indicados mostrando a direção de lançamento das órbitas: c_1 vai para a borda enquanto c_2 vai para o centro do espaço de fase.

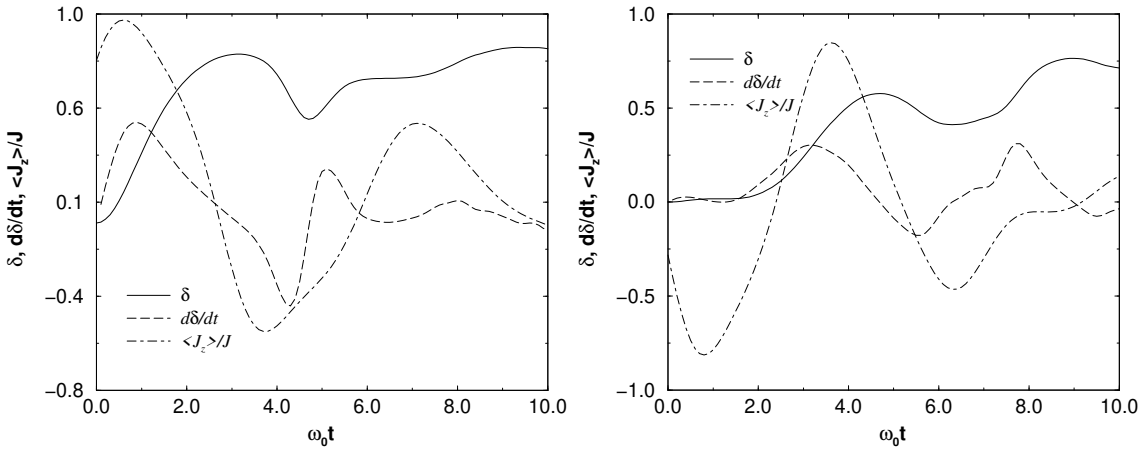

Figura 1.10: δ (linhas sólidas), $\frac{d\delta}{dt}$ (linhas tracejadas) e $\frac{\langle \widehat{J}_z \rangle}{J}$ (linhas ponto-tracejadas) para as órbitas c_1 (à esquerda) e c_2 (à direita). Durante o intervalo de tempo correspondente ao crescimento da entropia, também verifica-se correspondência aproximada entre $\frac{d\delta}{dt}$ e $\frac{\langle \widehat{J}_z \rangle}{J}$. Entretanto, para o caso regular (figura 1.7), a correspondência permanece para escalas de tempo maiores.

Na figura 1.11, mostramos a distribuição de Husimi do grau de liberdade atômico para um estado inicial coerente centrado na órbita c_2. Este resultado ilustra bem a deslocalização *irreal* do pacote na borda clássica e a deslocalização *verdadeira* oriunda do processo de descoerência, que leva a entropia ao seu patamar.

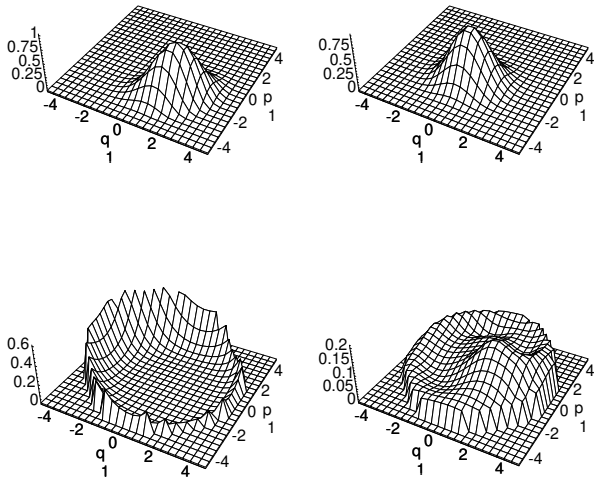

Figura 1.11: Distribuição de Husimi do spin total ($\langle w|\widehat{\rho}_1(t)|w\rangle$) para um estado inicial coerente centrado na condição c_2. São mostrados os instantes $t = 0$ (acima e à esquerda), $t = 1$ (acima e à direita), $t = 4$ (abaixo e à esquerda) e $t = 25$.

1.5.1 Emaranhamento no Equilíbrio

Os cálculos realizados para o MJC-N sempre exibiram um patamar para a entropia linear a tempos longos (equilíbrio). Isso indica que a interação entre os subsistemas, a qual é responsável pelo emaranhamento, leva os estados iniciais puros a estados mistos. Por outro lado, como já discutimos anteriormente, o valor da entropia linear para um estado totalmente misturado, $\widehat{\rho} = \sum_{m=1}^{M} |m\rangle\langle m|$, é dado por $\delta = 1 - \frac{1}{M}$.

Há então dois pontos a serem ressaltados a partir dessas informações nos resultados que obtivemos até aqui. Em primeiro lugar, o patamar encontrado para a entropia foi sempre menor que $1 - \frac{1}{2J+1}$ [53]. Isso indica que o estado final não é totalmente misturado. Algum grau de coerência sobrevive. Por outro lado, como a entropia linear é a mesma para ambos os subsistemas, vemos que a entropia do campo também está limitada por um valor de patamar que está associado ao número de estados $M = 2J + 1$, embora este valor máximo de estados esteja obviamente associado com o grau de liberdade atômico, ou de spin. Isso está em acordo com o fato conhecido de que as propriedades da descoerência são ditadas pelo subsistema "menor" [54–57].

Os resultados apresentados nesta seção para o MJC-N foram publicados em 2001, com as colaborações da Profa. M. Carolina Nemes (ICEx - UFMG, MG) e Dr. Giancarlo Q. Pellegrino (DM - UFSCar, SP) [58].

1.6 Emaranhamento Médio

Em seus trabalhos sobre a descoerência [15, 59–61], Zurek, Paz e colaboradores têm argumentado que a taxa de crescimento da entropia, para um sistema classicamente caótico em contato com um reservatório, é proporcional à soma dos expoentes de Lyapunov positivos do sistema clássico correspondente. Nesta seção, apresentaremos um estudo bastante preliminar realizado com o MJC-N átomos, no qual calculamos um expoente característico que descreve a taxa de crescimento da entropia linear.

1.6.1 Simetria de Órbitas Periódicas

Nas seções anteriores discutimos o efeito de borda, segundo o qual, as oscilações na entropia linear se relacionam com a trajetória clássica correspondente. Desta forma, conectam-se a entropia linear (grandeza quântica que mede o emaranhamento) e trajetórias no espaço de fase clássico. Uma consequência direta deste comportamento é a dependência em *fase* das oscilações da entropia linear com a condição inicial escolhida sobre a órbita clássica. Para deixar claro o que estamos dizendo, vamos estudar a órbita periódica 8 e a trajetória caótica c_2, apresentadas na seção passada.

Sejam várias condições iniciais escolhidas sobre essas trajetórias, conforme o esquema mostrado na figura 1.12. Levando-se em conta o efeito de borda, pode-se prever que condições iniciais simétricas da órbita 8 (2 e 9, 4 e 10, 6 e 11, 8 e 0) apresentam exatamente a mesma entropia linear. De fato, isso foi verificado numericamente.

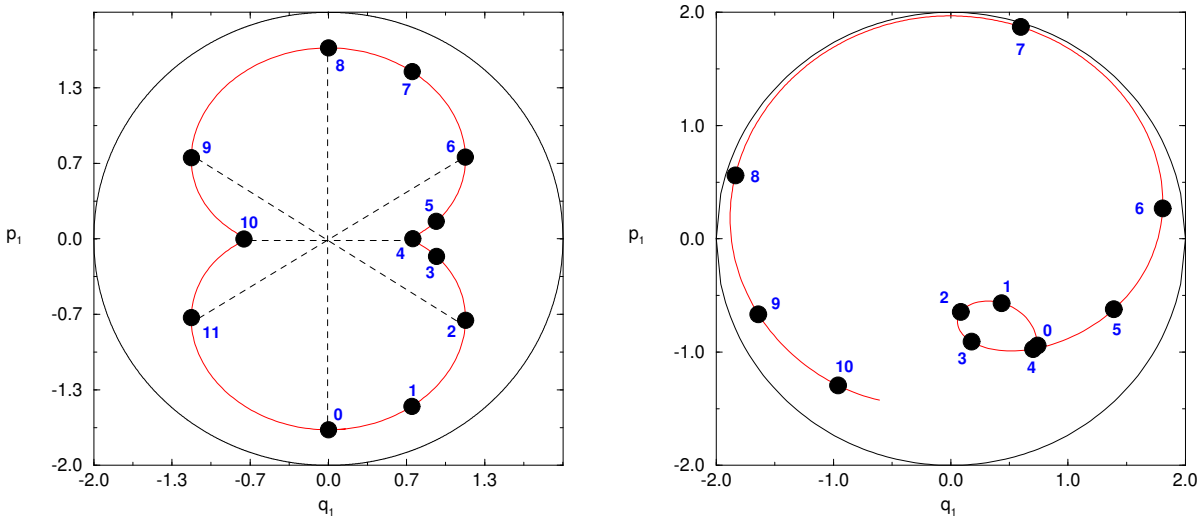

Figura 1.12: Projeções da órbita periódica 8 (à esquerda) e da trajetória caótica c_2 no espaço de fase atômico. Os círculos pretos representam as várias condições iniciais escolhidas sobre cada trajetória. As condições iniciais ligadas por linhas tracejadas apresentaram exatamente a mesma entropia linear. As trajetórias foram desenhadas na escala unitária ($E = 1.89, J = 1$), equivalente a ($E = 8.5, J = 4.5$), com $G = 0.5$, $G' = 0.2$ e $\omega_0 = \epsilon = 1$.

Por outro lado, para condições iniciais não-simétricas, verifica-se a diferença em fase para as oscilações. Por exemplo, para as condições iniciais 0 e 4, existe uma clara defasagem temporal correspondente a um quarto do período da órbita clássica. A figura 1.13 traz as evidências numéricas deste caso.

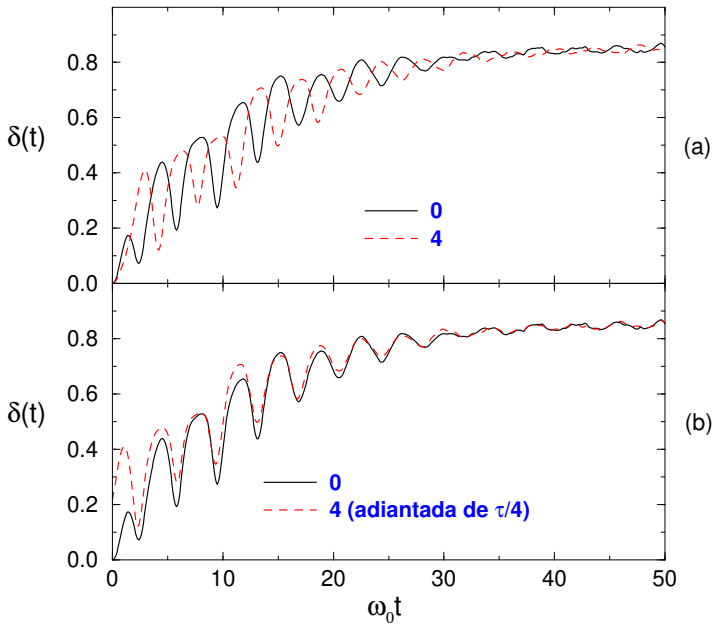

Figura 1.13: Entropias lineares para as condições iniciais 0 e 4 da órbita 8. Em (b) a entropia linear da condição 4 foi atrasada de $\frac{\tau}{4}$, sendo $\tau = 7.46$ o período da órbita 8. Os máximos e mínimos passam a coincidir perfeitamente.

Esses resultados voltam a apontar para a íntima relação entre as oscilações na entropia

linear e a trajetória clássica, o que ocorre via efeito de borda. A análise realizada aqui entretanto traz uma nova informação: a dependência do período de oscilação da entropia com a simetria da órbita clássica em relação à borda. O período de oscilação da entropia linear neste caso é $\frac{\tau}{2}$, como indica sua transformada de Fourier, enquanto que o período da órbita 8 é τ. De fato, o fator dois vem da simetria de reflexão em torno do eixo $(0, p_1)$. Provavelmente, no caso de um órbita fictícia com projeção tipo "trevo" (♣, sem o cabinho) teríamos a entropia linear oscilando com um terço do período desta órbita. Em contrapartida, a trajetória caótica não dá à entropia qualquer padrão de oscilação, o que corrobora nossa argumentação.

1.6.2 Taxa Média de Descoerência

Voltando ao objetivo inicial, isto é, a tentativa de se estabelecer um expoente característico que descreva a taxa de crescimento da entropia (ou a taxa de descoerência), nos deparamos com um impasse conceitual. Se de fato a taxa de descoerência pode ser associada à soma dos expoentes de Lyapunov positivos, então esta relação deve ser independente da condição inicial sobre uma mesma órbita, visto que os expoentes o são. De fato, se uma trajetória é caótica, então deve apresentar o mesmo expoente positivo qualquer que seja a condição inicial sobre esta trajetória. Note-se que estamos falando de "condições iniciais diferentes" sobre a mesma trajetória, o que corresponde a tomarmos pontos diferentes no espaço de fase que perterçam à mesma solução da equação de movimento, para tempos distintos. Isso significa que esses pontos, que estamos chamando de "condições iniciais diferentes sobre a mesma trajetória", são atingidos pela trajetória em instantes diferentes na evolução. Mas o fato é que, de acordo com o resultado da seção anterior, a entropia linear não apresenta o mesmo comportamento para condições distintas sobre a mesma órbita.

A solução mais razoável neste caso parece ser o cálculo de uma entropia média, que traria consigo a informação líquida do emaranhamento entre os subsistemas, sem quaisquer oscilações devido ao efeito de borda. O objetivo é conseguir um comportamento médio para a entropia parecido com aquele obtido para a órbita circular (figura 1.8), para o qual poderemos fazer um ajuste numérico e tentar obter algum parâmetro importante à dinâmica. A hipótese é que a entropia linear neste modelo possa ser escrita através de uma função suave que contenha a informação "média" sobre a descoerência somada a pequenas correções devido às oscilações oriundas da borda.

Procedendo segundo essas idéias, calculamos a entropia linear para cada condição inicial sobre determinada trajetória e ao final, calculamos a entropia linear média

$$\delta_m(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta_i(t), \tag{1.27}$$

sendo N o número de condições escolhidas sobre cada trajetória. O cálculo foi realizado para a órbita 8 e para trajetória caótica c_2, conforme indicado na figura 1.14. Apesar de a trajetória caótica não apresentar qualquer padrão de simetria que nos permita selecionar adequadamente as condições iniciais que produzam uma "boa" média, como fazemos no caso regular, pode-se notar, pelo borrão formado pelas curvas em torno da média (figura 1.14), que não é necessário incluirmos novas condições iniciais na média. Assim, enquanto a simetria da órbita regular é o melhor critério para as escolhas de condições iniciais sobre a órbita, no caso caótico, a convergência do "borrão" nos pareceu um critério bastante adequado (na verdade o único que nos ocorreu).

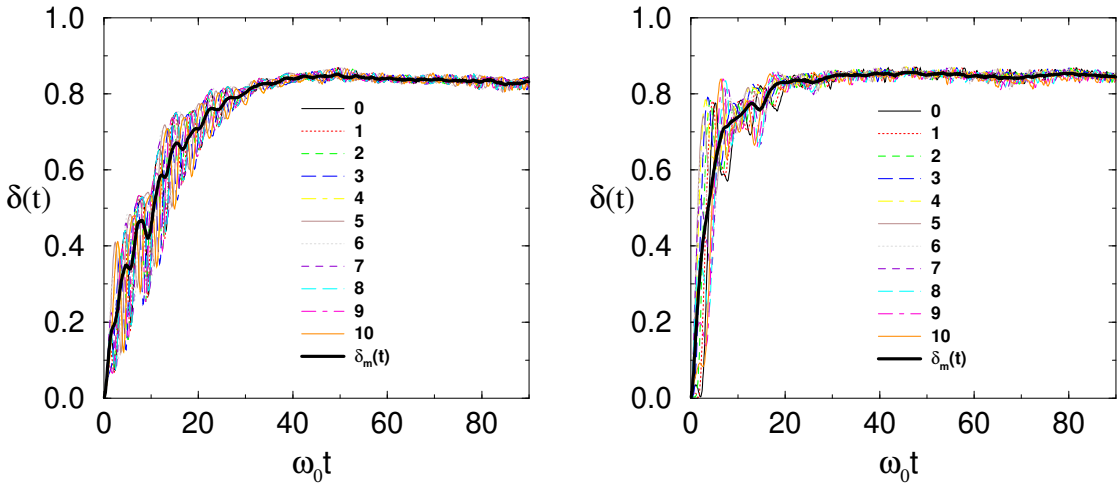

Figura 1.14: Entropia linear para cada condição indicada na figura 1.12. À esquerda, temos o cálculo para a órbita 8 e à direita, o cálculo para a trajetória caótica c_2. As linhas grossas indicam a entropia média de cada caso.

De posse da entropia linear média, propusemos o seguinte ajuste:

$$\delta_m(t) = A_0 \left(1 - e^{-A_1 t}\right), \tag{1.28}$$

sendo A_0 o parâmetro relacionado com a situação de equilíbrio, $\lim_{t\to\infty} \delta_m(t) = A_0$, e A_1 o *expoente característico* relacionado à taxa de descoerência do sistema, $A_1 = -\frac{d}{dt}\ln(A_0 - \delta_m)$, como ficará claro mais tarde[8]. Os resultados do ajuste são mostrados na figura 1.15.

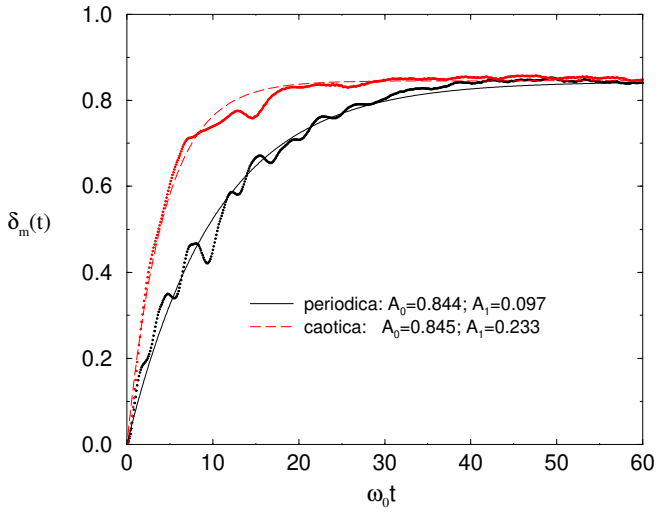

Figura 1.15: Entropia linear média (linhas pontilhadas) para a órbita periódica 8 e para a trajetória caótica c_2 pertencentes ao regime ressonante ($\epsilon = \omega_0 = 1$) misto $G = 0.5$ e $G = 0.2$, com $E = 8.5$ e $J = 4.5$. Os ajustes (linhas sólida e tracejada) foram feitos com tolerância da ordem de 10^{-5}.

[8]No capítulo 5 desta tese, vamos conjecturar que no limite clássico valha a relação $S = -\ln(1-\delta)$, de modo que neste regime, ou a tempos curtíssimos, teremos a validade da relação $A_1 = \frac{dS}{dt}$. Sendo S a entropia de von Neumann, estaremos em acordo com a proposta de Monteoliva e Paz [61] para a taxa de descoerência.

É importante destacar que o resultado contido na figura 1.15 corrobora aquele obtido por Furuya e colaboradores em [16], pois mostra de forma bastante clara, sem as oscilações oriundas do efeito de borda, que o processo de descoerência é realmente "incentivado" pelo caos do espaço de fase clássico. Além disso, nosso resultado quantifica a taxa de descoerência através do parâmetro de ajuste A_1, nitidamente maior para o caso caótico. Note-se que o parâmetro relacionado ao patamar recebe essencialmente o mesmo valor, independemente da trajetória escolhida. Isso reforça o fato de que este parâmetro está conectado com o número de estados acessíveis ao sistema a tempos longos. Lembremo-nos que o valor de A_0 é portanto limitado: $A_0 \leq 1 - \frac{1}{2J+1} = \frac{2J}{2J+1}$.

1.6.3 Expoentes de Lypunov

Mas o que dizer a respeito de uma eventual conexão entre os expoentes de Lyapunov e os expoentes característicos A_1 definidos aqui? Apesar da proximidade numérica entre os valores de A_1 e o valor do máximo expoente de Lyapunov para as trajetórias caóticas [34] (ambos são da ordem de 0.2), ainda é muito cedo para se estabelecer tal relação.

Em primeiro lugar, destacamos o fato de que a grandeza clássica independente da representação é a soma dos expoentes de Lyapunov positivos e não o maior expoente. Nesse sentido, a conexão não pode ser feita de forma direta e nossas ferramentas numéricas precisariam ser modificadas. Por outro lado, o cálculo de expoentes de Lyapunov no MJC-N pode ser bastante complexo e sensível a valores de parâmetros [34], de modo de que se exige um aprimoramento das técnicas numéricas que temos utilizado até o presente momento.

Além disso, outras questões nos parecem relevantes, podendo inclusive ser consideradas como possíveis direções futuras para a complementação deste trabalho. A comparação entre a derivada da entropia de von Neumann (a taxa de descoerência) e a soma dos expoentes de Lyapunov é adequada em que regime de tempo? Tal comparação permanece válida mesmo fora do regime semiclássico ($\hbar \to 0$ e $J \to \infty$)?

Terminamos esta subseção apontando parao fato de que as idéias originais referentes ao emaranhamento médio foram concebidas com a participação do Dr. Giancarlo Q. Pellegrino (DM - UFSCar, SP).

1.7 O Limite Clássico da Entropia Linear

Um dos problemas mais contundentes em relação ao estudo da descoerência no MJC-N, foi a questão do limite clássico da entropia linear. Como sabemos, esta grandeza está diretamente relacionada com o grau de emaranhamento do sistema. Por outro lado, é de conhecimento geral que o emaranhamento é uma manifestação essencialmente quântica, inconcebível classicamente[9]. Então o que esperar de uma grandeza como a entropia no limite clássico de $\hbar \to 0$, $J \to \infty$ e $\hbar J \to 1$? Em princípio, em uma análise corriqueira, diríamos que a entropia deve tender a zero neste limite, afinal os subsistemas não devem se emaranhar classicamente. Por outro lado, os resultados numéricos semiclássicos para o modelo, mostram uma tendência estranhamente diferente.

Começamos nossa análise sobre o limite clássico da entropia apresentando os resultados numéricos obtidos para o modelo à medida que tendemos ao limite clássico. Os resultados

[9]Nos próximos capítulos entretanto, faremos uma discussão sobre uma possível definição para o "emaranhamento clássico".

para a tendência semiclássica da entropia linear da órbita 8 e de uma trajetória caótica são mostrados na figura 1.16. Note-se que à medida que aumentamos J, temos um sistema sempre *mais emaranhado* em cada instante de tempo.

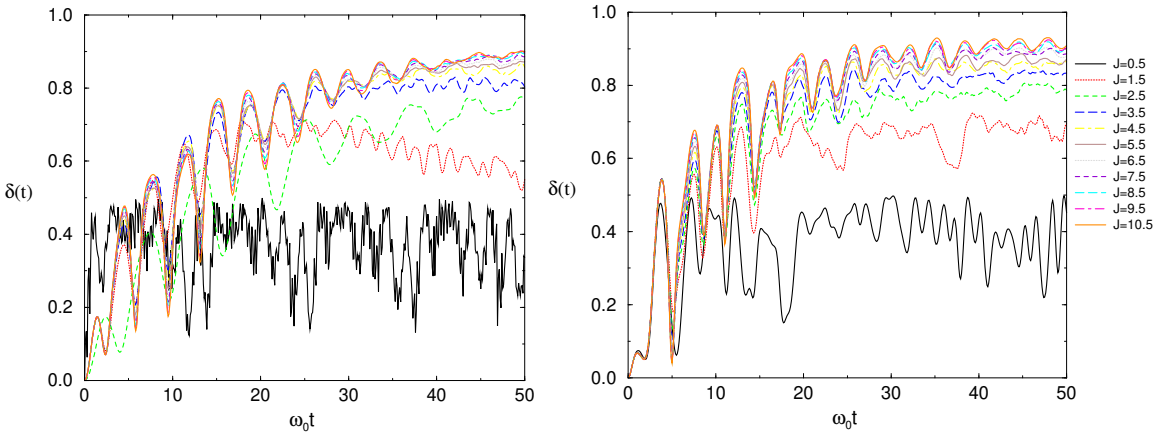

Figura 1.16: Entropia linear para a órbita 8 ($q_1 = 0.0$, $p_1 = -1.68626$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 2.461491)\sqrt{J}$ (à esquerda) e para uma trajetória caótica ($q_1 = 1.178511$, $p_1 = -1.178511$, $q_2 = 0.0$, $p_2 = 4.006093)\sqrt{J}$ (à direita), com $G = 0.5$, $G' = 0.2$, $\epsilon = \omega_0 = 1$ e diversos regimes equivalentes de E/J. Para cada J escolhido, reescalam-se as condições iniciais (na forma mostrada) de modo que a energia total seja adequada.

Antes de prosseguirmos com nossa análise, é preciso que se diga que o regime semiclássico foi simulado simplesmente com o aumento de J (com devida reescala do espaço de fase), com $\hbar = 1$. O limite que apontamos há pouco é uma forma matemática de se obter equações clássicas do movimento, mas deve ser totalmente equivalente a este que utilizamos numericamente. Note-se que $\hbar$ é uma constante da natureza, à qual não se tem acesso no controle dos experimentos. O que se faz na realidade é aumentar o número médio de fótons $\bar{n} = |\alpha|^2$. Porém, teoricamente, desde que $|\alpha|^2 = \frac{p^2+q^2}{2\hbar}$, podemos fazer $|\alpha|^2 \to \infty$, simplesmente escolhendo $\hbar \to 0$ ou $\frac{p^2+q^2}{2} \to \infty$.

No caso do grau de liberdade de spin, como já apontamos, temos uma propriedade de escala. Então quando aumentamos J, a borda do espaço de fase clássico aumenta. Porém, se reescalamos a condição inicial (conforme legenda da figura 1.16), teremos exatamente a mesma dinâmica. Além disso, este procedimento não aumenta a largura do estado inicial coerente, de modo que o efeito líquido deste processo é um pacote inicial coerente, centrado sobre a mesma condição inicial (para cada J), mas com largura cada vez menor quando comparada com a borda do espaço de fase (que aumenta com J), como podemos verificar na figura 1.17. Note-se que as variáveis do campo também são escaladas com $\sqrt{J}$, de modo que estamos simulando o limite em que $\frac{{p_2}^2+{q_2}^2}{2} \to \infty$. Nesse sentido, fica claro que o regime semiclássico emerge através da localização do estado inicial, que no limite clássico singular, deve ser uma função delta.

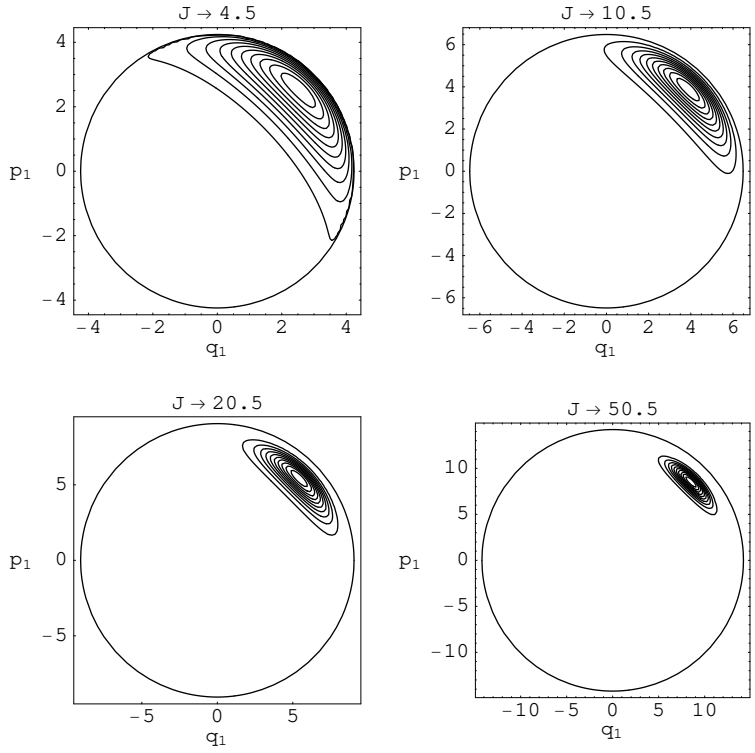

Figura 1.17: Curvas de nível da função de Husimi para o estado inicial coerente de spin ($\langle w|\widehat{\rho}_1(0)|w\rangle$) para alguns valores de J. Cada coordenada do espaço de fase é escalada na forma $r_{(J)} = r_{(1)}\sqrt{J}$.

Pode-se argumentar entretanto que o valor $J = 10.5$ não é suficiente para ilustrar o caráter clássico do sistema, devendo-se utilizar J ainda maiores[10]. Propomos então uma contra-argumentação baseada na extrapolação de alguns resultados numéricos, supondo que não deve ocorrer nenhum tipo de comportamento qualitativamente diferente para J's maiores. Consideremos então as curvas da entropia linear contidas na figura 1.16 e realizemos o ajuste médio $\delta_m(t) = A_0(1 - e^{-A_1 t})$, conforme foi feito na seção anterior, para os diversos valores de J. Estaremos com isso, encontrando uma taxa média de descoerência (A_1) e o valor de máxima entropia (A_0) para cada valor de J. Então, observando o comportamento de A_0 e A_1 em função de J, façamos a previsão para $J \to \infty$. Na figura 1.18 mostramos os resultados obtidos nesse processo. Note-se que os resultados numéricos apontam para os seguinte valores limites ($J \to \infty$): $A_0 \sim 1$ e $A_1 \sim 0.062$ para a órbita 8, e $A_0 \sim 1$ e $A_1 \sim 0.101$ para a trajetória caótica c_2.

Esta estimativa simples sugere que a entropia linear deve receber valores finitos e não-nulos em relação ao tempo no limite clássio. De um lado, este é um resultado razoável do ponto de vista de uma grandeza extensiva como a entropia. De fato, com o aumento de J temos o consequente aumento do número de estados do sistema e, portanto, parece natural que a entropia cresça sempre. Por outro lado, se a entropia é realmente uma medida de emaranhamento, então estamos vendo que os subsistemas permanecem emaranhados mesmo

[10]O aumento de J provoca o crescimento das matrizes que precisam ser diagonalizadas para a obtenção numérica da evolução do sistema. Se J fica muito maior que 10.5, os tempos de computação ficam realmente exagerados e o processo se torna impraticável.

no limite clássico.

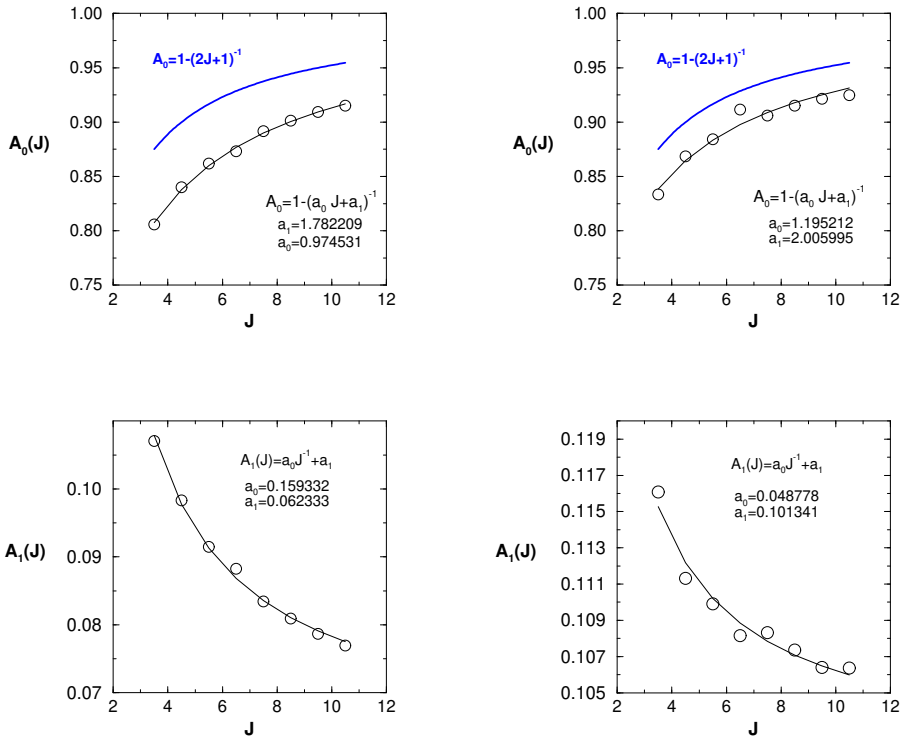

Figura 1.18: Ajuste do comportamento dos parâmetros A_0 e A_1 em função de J para a órbita 8 (coluna da esquerda) e para trajetória caótica c_2 (coluna da direita). Nos gráficos da linha superior mostramos também o valor máximo esperado para o parâmetro A_0 relacionado ao patamar da entropia linear.

Esse impasse nos faz pensar sobre a possibilidade de o limite clássico de uma grandeza como a entropia ser *singular*, no sentido que ele só poderá ser verificado no limite extremo de $J = \infty$. Uma discussão bastante interessante sobre a transição não-assintótica entre os mundos quântico e clássico é apresentada por Berry na referência [62], e nas referências lá contidas. Baseados nessas idéias, façamos uma breve discussão sobre o limite singular.

1.7.1 O Limite Singular

Vamos dar um exemplo de limite singular estudando alguns valores esperados no oscilador harmônico. Se preparamos um estado inicial coerente $\alpha_0 = \frac{q_0 + \imath p_0}{\sqrt{2\hbar}}$, o valor esperado da energia será

$$\begin{aligned} \langle\alpha_0|\widehat{H}|\alpha_0\rangle &= \langle\alpha_0|\hbar\omega\left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}\right)|\alpha_0\rangle = \hbar\omega\left(|\alpha_0|^2 + \frac{1}{2}\right) \\ &= \omega\left(\frac{q_0^2 + p_0^2}{2}\right) + \frac{\hbar\omega}{2} = E_{cl} + \frac{\hbar\omega}{2} \\ &= E_{cl}\left(1 + \frac{\hbar\omega}{2E_{cl}}\right), \end{aligned} \tag{1.29}$$

no qual vemos que o limite clássico é atingido preparando-se o estado inicial com energias cada vez maiores comparadas ao quanta $\frac{\hbar\omega}{2}$. Por outro lado, vejamos o que acontece quando

calculamos o valor esperado do comutador $[\widehat{a},\widehat{a}^\dagger]$ no limite de altas energias ($|\alpha_0|^2 \to \infty$):

$$\lim_{|\alpha_0|^2\to\infty} \left\langle \alpha_0 \left| [\widehat{a},\widehat{a}^\dagger] \right| \alpha_0 \right\rangle = \lim_{|\alpha_0|^2\to\infty} \langle \alpha_0 \left| \mathbf{1} \right| \alpha_0 \rangle = \lim_{|\alpha_0|^2\to\infty} \langle \alpha_0 | \alpha_0 \rangle = 1. \tag{1.30}$$

Utilizando a unidade de estados coerentes ($\mathbf{1} = \int \frac{d^2\alpha}{\pi} |\alpha\rangle \langle\alpha|$) e a parametrização $\alpha = \frac{q+\imath p}{\sqrt{2\hbar}}$, obtemos o mesmo resultado:

$$\begin{aligned}
\lim_{|\alpha_0|^2\to\infty} \quad & \left\langle \alpha_0 \left| [\widehat{a},\widehat{a}^\dagger] \right| \alpha_0 \right\rangle = \lim_{|\alpha_0|^2\to\infty} \left\{ \int d^2\alpha \frac{|\langle\alpha|\alpha_0\rangle|^2}{\pi} |\alpha|^2 - |\alpha_0|^2 \right\} \\
= \quad & \lim_{\hbar\to 0} \left\{ \int dqdp \frac{e^{-\frac{(q-q_0)^2}{2\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{q^2+p^2}{2\hbar} \right) - \left(\frac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar} \right) \right\} \\
= \quad & \lim_{\hbar\to 0} \left\{ 1 + \frac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar} - \frac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar} \right\} = 1.
\end{aligned} \tag{1.31}$$

Conforme já dissemos, uma vez que $|\alpha_0|^2 = \frac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar}$, optamos matematicamente por $\hbar \to 0$ como forma de se tomar o limite clássico, como é usual. Agora observemos que

$$\lim_{|\alpha_0|^2\to\infty} \frac{\left\langle \alpha_0 \left| \widehat{a}\widehat{a}^\dagger \right| \alpha_0 \right\rangle}{\left\langle \alpha_0 \left| \widehat{a}^\dagger\widehat{a} \right| \alpha_0 \right\rangle} = \lim_{|\alpha_0|^2\to\infty} \frac{1+|\alpha_0|^2}{|\alpha_0|^2} = \lim_{|\alpha_0|^2\to\infty} \left(1 + \frac{1}{|\alpha_0|^2} \right) = 1. \tag{1.32}$$

Esse resultado assintótico sugere que o valor esperado do comutador deveria ser nulo no limite clássico. Mas então, o que dizer das equações (1.30) e (1.31)? Na equação (1.31) o que ocorre é que utilizamos de antemão o resultado do comutador entre os operadores, de modo que acabamos não comparando $\langle \widehat{a}\widehat{a}^\dagger \rangle$ com $\langle \widehat{a}^\dagger\widehat{a} \rangle$, como se esperava.

É na equação (1.31) que encontramos a questão do limite clássico singular. De fato, se tomássemos o limite $\hbar \to 0$ antes de realizar a integral Gaussiana, ou seja, se explicitássemos a localização total da função de onda na forma

$$\lim_{\hbar\to 0} \left(\frac{e^{-\frac{(q-q_0)^2}{2\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) = \delta(q-q_0)\delta(p-p_0), \tag{1.33}$$

então obteríamos zero como resultado para o valor esperado. De fato, só se obtém tal resultado tomando-se a transformação acima. Caso contrário, não importa o quão grande façamos o valor de $|\alpha_0|^2$ (ou quão pequeno consideremos $\hbar$), sempre teremos uma integral com peso Gaussiano! Nesse sentido, para este tipo de cálculo, jamais veremos um comportamento assintótico em $\hbar$. Note-se que isso parece depender do tipo de observável para o qual se está calculando o valor esperado, pois, como mostramos há pouco, tal singularidade não acontece no cálculo do valor esperado da energia.

Podemos utilizar ainda uma forma diferencial para vislumbrar esse fato de maneira ainda mais clara. Suponhamos que quiséssemos realizar a seguinte média Gaussiana:

$$\langle \alpha_0 | \widehat{O} | \alpha_0 \rangle = \int dqdp \frac{e^{-\frac{(q-q_0)^2}{2\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathcal{O}(q,p). \tag{1.34}$$

Pode-se mostrar, como de fato faremos no próximo capítulo, que tal integral pode ser formalmente escrita na forma

$$\langle \alpha_0 | \widehat{O} | \alpha_0 \rangle = e^{\frac{\hbar}{2}\left(\partial_{q_0}^2 + \partial_{p_0}^2\right)} \mathcal{O}(q_0,p_0). \tag{1.35}$$

Esta notação representa uma expansão em série de potências em $\hbar$ das derivadas parciais em relação a q_0 e p_0, que são as variáveis do estado coerente $\alpha_0 = \frac{q_0+ip_0}{\sqrt{2\hbar}}$. A vantagem deste formato é que se ganha automaticamente uma expansão *semiclássica* para a média Gaussiana. Nesse sentido, o limite clássico será obtido com

$$\lim_{\hbar\to 0}\left\{e^{\frac{\hbar}{2}\left({\partial_{q_0}}^2+{\partial_{p_0}}^2\right)}\mathcal{O}(q_0,p_0)\right\} = \lim_{\hbar\to 0}\mathcal{O}(q_0,p_0). \tag{1.36}$$

Apliquemos então a fórmula (1.35), para o cálculo do valor esperado do comutador:

$$\left\langle \alpha_0\left|[\widehat{a},\widehat{a}^\dagger]\right|\alpha_0\right\rangle = \left\{e^{\frac{\hbar}{2}(\partial_{q_0}^2+\partial_{p_0}^2)}\left(\frac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar}\right)\right\} - \left(\frac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar}\right). \tag{1.37}$$

Façamos agora a expansão em ordens de $\hbar$:

$$\begin{aligned}\left\langle \alpha_0\left|[\widehat{a},\widehat{a}^\dagger]\right|\alpha_0\right\rangle &= \left\{\left[1+\frac{\hbar}{2}(\partial_{q_0}^2+\partial_{p_0}^2)+\cdots\right]\left(\frac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar}\right)\right\} - \left(\frac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar}\right)\\ &= \left[\underset{(\hbar^0)}{\left(\tfrac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar}\right)} + \underset{(\hbar^1)}{1} + \underset{(\hbar^2)}{0} + \underset{(\hbar^3)}{0} + \cdots\right] - \left(\frac{q_0^2+p_0^2}{2\hbar}\right).\end{aligned} \tag{1.38}$$

Note-se que se usamos apenas a ordem zero da expansão em $\hbar$, temos zero como resultado para o valor clássico. Porém, quando usamos a expansão semiclássica em todas as ordens, teremos o valor clássico 0 corrigido com a primeira ordem que é a unidade. De fato, o termo de ordem zero de $\langle\widehat{a}\widehat{a}^\dagger\rangle$ é muito maior que um, mas quando subtraído de $\langle\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\rangle$ no cálculo do valor médio de $\langle[\widehat{a},\widehat{a}^\dagger]\rangle$, cancela outro termo "grande", restando apenas a correção unitária. Assim, quando o resultado clássico esperado é 0, qualquer correção passa a ser extremamente relevante, sendo maior que o termo de ordem zero. Nesse sentido, o limite clássico para determinados observáveis é realmente singular, isto é, não pode ser alcançado de forma assintótica.

No caso da entropia linear, é possível que algo assim ocorra. De acordo com o cálculo perturbativo realizado por Nemes, Furuya e Pellegrino (não publicado), a entropia linear a tempos curtos não apresenta qualquer dependência em J, o que corrobora os nossos resultados numéricos. De acordo com a argumentação que propusemos acima, o que estaria acontecendo é o cancelamento dos termos "grandes", que crescem com J, restando apenas as correções que passam a assumir o papel mais importante. De qualquer forma, isso não passa de uma conjectura.

A idéia de um tal limite clássico singular, que parece ser adequada para a tomada do limite $\hbar\to 0$ ou $J\to\infty$ sobre a cinemática quântica (valores esperados dos comutadores e da energia), pode levar a resultados indesejados se aplicada indiscriminadamente sobre a dinâmica. Nesse sentido, muito mais cuidado é necessário para se analisar o limite de uma grandeza como a entropia linear. De qualquer forma, isso vem reforçar a necessidade de cálculos semiclássicos para os propagadores quânticos [63, 64], a partir dos quais pode-se entender de forma mais rigorosa o limite clássico da dinâmica quântica. No capítulo 3, apresentamos uma definição semiclássica para entropia baseada nos propagadores semiclássicos de estados coerentes. Há ainda uma outra frente de estudo da questão do limite clássico da entropia: uma proposta baseada na definição de operadores intensivos, a qual produz resultados dinâmicos com tempos escalados com J (grupo da Profa. M. Carolina Nemes, ICEx, UFMG/MG). De acordo com nosso conhecimento, não existe nada a respeito na literatura especializada.

Capítulo 2

Dinâmica Liouvilliana

2.1 Teorema de Liouville

"O conjunto dos auto-estados de um modelo quântico ou o conjunto dos pontos do espaço de fase clássico acessíveis a um determinado sistema constituem um ensemble estatístico" [65]. Construamos então um tal ensemble composto por um grande número de sistemas clássicos idênticos, cada qual com seu estado clássico (q,p) no instante t, segundo uma distribuição dada por $\rho(q,p,t)$. Cada ponto desse sistema clássico, com energia $\mathcal{H}$, evolui de acordo com o formalismo Hamiltoniano através das seguintes equações de movimento:

$$\dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \qquad \text{e} \qquad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}. \tag{2.1}$$

Desta forma, $\rho(q,p,t)dqdp$ representa a probabilidade de encontrarmos o sistema no instante t localizado no espaço de fase entre q e $q+dq$ e p e $p+dp$. Então, definido o parênteses de Poisson de ρ com $\mathcal{H}$,

$$\{\rho, \mathcal{H}\} = \frac{\partial \rho}{\partial q}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} - \frac{\partial \rho}{\partial p}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}, \tag{2.2}$$

pode-se estabelecer uma equação diferencial para a evolução temporal da densidade:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{dq}\dot{q} + \frac{\partial \rho}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \{\rho, \mathcal{H}\} + \frac{\partial \rho}{\partial t}. \tag{2.3}$$

Como a probabilidade total se conserva, isto é, não podemos criar ou destruir pontos representativos de um sistema físico (lembrando que as trajetórias nunca se cruzam), temos uma equação de conservação de probabilidades,

$$\oint_S \vec{J} \cdot d\vec{S} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_{V(S)} \rho \, dV, \tag{2.4}$$

em que S é uma hipersuperfície fechada que engloba o hipervolume V e o fluxo é dado por $\vec{J} = \rho\vec{v}$, sendo $\vec{v} = (\dot{q}, \dot{p})$ uma velocidade generalizada no espaço de fase. Utilizando o teorema de Gauss ($\oint_S \vec{A} \cdot d\vec{S} = \int_{V(S)} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} dV$) podemos reescrever (2.4) na forma

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{v}) = -\frac{\partial \rho}{\partial t}, \tag{2.5}$$

na qual usamos $\vec{\nabla} = (\frac{\partial}{\partial q}, \frac{\partial}{\partial p})$. Então, utilizando esta forma explícita do divergente generalizado e a definição do parênteses de Poisson, obtemos a famosa *equação de Liouville*:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial q}(\rho \dot{q}) - \frac{\partial}{\partial p}(\rho \dot{p}) \\
&= -\left(\frac{\partial \rho}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial \rho}{\partial p}\dot{p}\right) - \left(\frac{\partial}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial}{\partial p}\dot{p}\right) \\
&= \underbrace{\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}\frac{\partial \rho}{\partial p} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}\frac{\partial \rho}{\partial q}\right)}_{\{\mathcal{H},\rho\}} - \underbrace{\left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q\,\partial p} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p\,\partial q}\right)}_{0}
\end{aligned}$$

$$\therefore \frac{\partial \rho}{\partial t} = \{\mathcal{H}, \rho\}. \tag{2.6}$$

Esta equação implica que $\dot{\rho} = 0$, o que significa que a densidade ρ é uma constante de movimento, ou seja, os pontos no espaço se movem como um fluido incompressível. Numa situação de *equilíbrio*, isto é, *estacionária*, quando a densidade ρ não deve ser uma função explícita do tempo, teremos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{\mathcal{H}, \rho\} = 0, \tag{2.7}$$

ou seja, a densidade só deve depender das coordenadas generalizadas q e p por meio de uma função da Hamiltoniana do sistema, $\mathcal{H} = \mathcal{H}(q, p)$.

2.2 Formalismo Clássico-Estatístico

Recentemente, dois trabalhos [66,67] chamaram nossa atenção para o problema da dinâmica clássica de distribuições de Liouville. Então, com as colaborações dos professores Francisco Bosco (IF - UFES) e Marcus A. M. de Aguiar (DFMC - UNICAMP), iniciamos o estudo da função densidade de Liouville para fluxos Hamiltonianos, a qual deve satisfazer as equações bem conhecidas:

$$\begin{cases} \dfrac{d\rho(x,t)}{dt} = 0 \\ \\ \dfrac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \{\mathcal{H}(x), \rho(x,t)\}, \end{cases} \tag{2.8}$$

em que x denota $(q_1, p_1, ...q_i, p_i, ...q_N, p_N)$, $\mathcal{H}$ é a Hamiltoniana clássica e $\{\ ,\ \}$ é o parênteses de Poisson dado por $\sum_{i=1}^{N} \{\ ,\ \}_{(q_i,p_i)}$, sendo N o número de graus de liberdade do sistema. Esta equação pode ser formalmente integrada com a condição inicial $\rho(x,0) = \rho_0(x)$ levando a

$$\rho(x,t) = e^{\mathcal{L}t}\rho_0(x), \tag{2.9}$$

sendo $\mathcal{L} = \{\mathcal{H}, .\}$ o operador Liouvilliano. Esta é uma representação pictórica em que precisamos expandir a exponencial e aplicar o formalismo de superoperadores:

$$\begin{aligned}
&\{\mathcal{H}, .\}\rho = \{\mathcal{H}, \rho\}, \\
&\{\mathcal{H}, .\}^2\rho = \{\mathcal{H}, .\}\{\mathcal{H}, \rho\} = \{\mathcal{H}, \{\mathcal{H}, \rho\}\}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Observe-se agora, que o formalismo Hamiltoniano nos permite escrever as seguintes equações de movimento:

$$\begin{aligned}\dot{q}_i &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \{q_i, \mathcal{H}\} = -\mathcal{L}q_i, \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = \{p_i, \mathcal{H}\} = -\mathcal{L}p_i, \\ \mathcal{L} &\equiv \{\mathcal{H}, .\} = \sum_{i=1}^{N} \{\mathcal{H}, .\}_i \ ,\end{aligned} \tag{2.11}$$

nas quais $\{\mathcal{H}, .\}_i = \left(\partial_{q_i}\mathcal{H}\partial_{p_i} - \partial_{p_i}\mathcal{H}\partial_{q_i}\right)$. Essas equações podem ser formalmente integradas com x como condição inicial:

$$x(t) = e^{-\mathcal{L}t}x. \tag{2.12}$$

Com este resultado, resolve-se o problema da evolução da distribuição clássica[1]:

$$\rho(x,t) = e^{\mathcal{L}t}\rho_0(x) = \rho_0(x(-t)). \tag{2.13}$$

Note-se que a distribuição evoluída é obtida através da "retro-evolução" (evolução para trás) de cada elemento do ensemble inicial. Continuando com a analogia entre os formalismos quântico e estatístico, definimos a função densidade reduzida tomando o traço sobre o espaço que não nos interessa:

$$\rho_k(t) = \prod_{\substack{i=1 \\ i\neq k}}^{N} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dq_i dp_i\right] \ \rho(x,t). \tag{2.14}$$

É importante observar que esta definição do traço faz com que nossa distribuição tenha unidades de uma *densidade de probabilidade*, isto é, de *probabilidade por unidade de volume do espaço de fase*, o que não ocorre com o operador densidade quântico, que é adimensional.

Podemos também definir médias no espaço de fase como segue:

$$\langle \mathcal{O} \rangle (t) = \int d^N x \ \rho(x,t)\, \mathcal{O}(x), \tag{2.15}$$

na qual usamos $d^N x = \prod_{i=1}^{N} [dq_i dp_i]$. Em particular, se a função $\mathcal{O}$ depender apenas das variáveis de um dos espaços (do espaço k, por exemplo), então a média pode ser feita com a densidade reduzida:

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{O} \rangle (t) &= \int dq_k dp_k \left(\prod_{\substack{i=1 \\ i\neq k}}^{N} \left[\int dq_i dp_i\right] \ \rho(x,t) \right) \mathcal{O}(q_k, p_k) \\ &= \int dq_k dp_k \ \rho_k(t)\, \mathcal{O}(q_k, p_k),\end{aligned} \tag{2.16}$$

o que também ocorre no formalismo quântico.

[1] Por simplicidade vamos usar a palavra "clássica" ou "estatística" em vez de "clássico-estatística" quando não houver risco de confusão com a dinâmica Hamiltoniana clássica.

O cálculo de médias clássicas pode ainda ser feito de outra forma, utilizando-se o fato de que o fluxo hamiltoniano preserva o volume no espaço de fase em qualquer instante:

$$d^N x(t) = d^N x(t') = d^N x, \tag{2.17}$$

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{O} \rangle (t) &= \int d^N x \ \rho(x,t)\, \mathcal{O}(x) \\
&= \int d^N x(-t)\, \rho_0(\underbrace{x(-t)}_{\substack{\text{variável} \\ muda}})\, e^{-\mathcal{L}t} \mathcal{O}(x(-t)) \\
&= \int d^N x\, \rho_0(x)\, e^{-\mathcal{L}t} \mathcal{O}(x) \\
&= \int d^N x\, \rho(x,0)\, \mathcal{O}(x(t)),
\end{aligned} \tag{2.18}$$

que mostra que a média pode ser calculada com a função $\mathcal{O}$ evoluída ("para frente") e com a distribuição inicial, algo análogo à representação de Heisenberg da mecânica quântica.

Estendendo ainda mais a nossa analogia, podemos finalmente definir a *entropia linear clássica* do k-ésimo subespaço como

$$\delta_k^{cl}(t) = 1 - \frac{\int dq_k dp_k \ \rho_k^2(t)}{\int dq_k q p_k \ \rho_k^2(0)}, \tag{2.19}$$

a qual foi normalizada adequadamente para que $\delta_k^{cl}(0) = 0$, ou seja, é uma definição específica para representar o caso análogo de estados quânticos inicialmente "puros". Além disso, a normalização é oportuna, visto que desejamos definir uma entropia adimensional. Observe-se que as analogias estabelecidas até aqui satisfazem o fato de que para um sistema global puro devemos ter entropia nula. De fato,

$$\begin{aligned}
\delta^{cl}(t) &= 1 - \frac{\int d^N x \rho^2(x,t)}{\int d^N x \rho_0^2(x)} = 1 - \frac{\int d^N x \rho_0^2(x(-t))}{\int d^N x \rho^2(x,0)} \\
&= 1 - \frac{\int d^N x(-t) \rho_0^2(x(-t))}{\int d^N x \rho_0^2(x)} = 1 - \frac{\int d^N x \rho_0^2(x)}{\int d^N x \rho_0^2(x)} \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Pode-se também definir o análogo clássico da entropia de von Neumann através da expressão

$$S^{cl}(t) = \int d^N x \left[\rho(x,t) \ln \rho(x,t) - \rho(x,0) \ln \rho(x,0) \right], \tag{2.21}$$

também definida de forma a satisfazer $S^{cl}(0) = 0$.

Assim, temos definido o formalismo clássico-estatístico, cujos resultados serão comparados aos do formalismo quântico. Existem duas idéias conceituais importantes por trás deste procedimento: (a) podemos nos perguntar se é possível reproduzir os resultados da já consagrada mecânica quântica a partir de uma mecânica probabilística baseada em equações de movimento clássicas; (b) ou, de outra forma, entendendo as diferenças conceituais nas definições de ambos os formalismos, podemos tentar entender quais mecanismos são os responsáveis pelas diferenças nos resultados. O tempo todo teremos ambas as idéias como motivação para o nosso estudo.

2.2.1 Estados Iniciais Clássicos

Resta ainda um ponto a ser esclarecido no formalismo estatístico: qual distribuição inicial devemos escolher em cada problema? A resposta para esta questão está conectada aos nossos objetivos de comparação com a mecânica quântica. Neste contexto então, nos parece razoável que utilizemos distribuições iniciais clássicas que sejam idênticas às distribuições quânticas no espaço de fase. Como o conceito de probabilidade não permite a existência de distribuições negativas, descartamos de imediato a utilização da função de Wigner como distribuição clássica, embora possa ser interessante observar como a dinâmica de Liouville se comporta diante de tais estados. Por outro lado, a imposição de que a distribuição clássica deva ser positiva, não garante a unicidade de tal distribuição. De fato, analisando o caso unidimensional por simplicidade, dois exemplos nos ocorrem imediatamente:

$$(1) \qquad \rho_0 = \frac{\langle\alpha|\widehat{\rho}(0)|\alpha\rangle}{2\pi\hbar}, \tag{2.22}$$

a função de Husimi (ou função Q) e

$$(2) \qquad \rho_0 = \frac{\langle q|\widehat{\rho}(0)|q\rangle\langle p|\widehat{\rho}(0)|p\rangle}{\mathcal{N}}, \tag{2.23}$$

o produto das probabilidades marginais. Note-se que em qualquer dos dois casos, devemos introduzir uma normalização adequada a fim de garantir que $Tr[\rho_0] = 1$ e que ρ_0 tenha unidades do inverso do volume do espaço de fase. Ambas as formas propostas são positivo-definidas, mas não há nada que garanta a melhor adequação de uma delas, isto é, ambas são boas candidatas a distribuição inicial clássica. Entretanto, através de uma comparação mais detalhada entre os formalismos, teremos melhores condições de eleger o estado inicial clássico.

Observemos a fórmula para o cálculo do valor médio de um observável quântico $\widehat{\mathcal{O}}$ na base de estados coerentes no instante inicial no caso unidimensional:

$$\begin{aligned}
\langle\widehat{O}\rangle &= Tr[\widehat{\rho}(0)\,\widehat{\mathcal{O}}] = \int \frac{d^2\alpha}{\pi}\langle\alpha|\widehat{\rho}(0)\widehat{\mathcal{O}}|\alpha\rangle \\
&= \int \frac{d^2\alpha}{\pi}\frac{d^2\alpha'}{\pi}\langle\alpha|\widehat{\rho}(0)|\alpha'\rangle\langle\alpha'|\widehat{\mathcal{O}}|\alpha\rangle \\
&= \int dq\,dp \int \frac{dq'\,dp'}{2\pi\hbar}\frac{\langle q,p|\widehat{\rho}(0)|q',p'\rangle}{2\pi\hbar}\langle q',p'|\widehat{\mathcal{O}}|q,p\rangle,
\end{aligned} \tag{2.24}$$

na qual usamos a parametrização usual $\alpha = \frac{q+\imath p}{\sqrt{2\hbar}}$ e a notação $|\alpha\rangle = |q,p\rangle$. Façamos agora a comparação com nossa receita clássico-estatística:

$$\langle\mathcal{O}\rangle = \int dq\,dp\,\rho(q,p,0)\,\mathcal{O}(q,p). \tag{2.25}$$

Comparando as equações (2.24) e (2.25), observamos que no caso quântico temos uma média sobre termos não diagonais. Dizendo de outra forma, o valor esperado é calculado com o auxílio de uma função complexa F *não-diagonal normalizada*[2] dada por

$$F(q,p,q',p') = \frac{\langle q,p|\widehat{\rho}(0)|q',p'\rangle}{2\pi\hbar}, \tag{2.26}$$

[2]No caso diagonal em que $q' = q$ e $p' = p$, teremos $F = Q$, ou seja, recuperaremos a função Q usual.

sendo que algo bastante semelhante ocorre com o sanduíche do operador $\widehat{\mathcal{O}}$. Tal sugestão para a utilização de funções Q como distribuição inicial clássica, nos faz caminhar para a seguinte construção clássica:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int dq\, dp\, \frac{\langle q,p|\widehat{\rho}(0)|q,p\rangle}{2\pi\hbar} \langle q,p|\widehat{\mathcal{O}}|q,p\rangle, \tag{2.27}$$

cuja diferença marcante com a eq. (2.24) está no fato de que aquela contém uma média prévia sobre termos não-diagonais. Com esta análise bastante superficial, ganha-se também a receita para o análogo clássico do observável $\widehat{\mathcal{O}}$, o que se faz via sanduíche em estados coerentes. Entretanto, há aqui um detalhe conceitual importante: como estamos interessados em um dinâmica puramente clássica (no sentido de não possuir correções quânticas), analisaremos sempre funções independentes de $\hbar$. De fato, no formalismo estatístico, esperamos que $\hbar$ apareça somente na largura da distribuição inicial. Assim, nossos "observáveis" clássicos serão calculados através de

$$\mathcal{O}(q,p) = \lim_{\hbar\to 0} \langle q,p|\widehat{\mathcal{O}}|q,p\rangle. \tag{2.28}$$

Ao final desta seção devemos ainda salientar que a proposta do formalismo estatístico para a entropia está diretamente conectada á proposta de Wehrl [46] para o cálculo da entropia clássica, apesar de termos parâmetros adicionais que garantem a normalização da entropia. Além disso, em seu trabalho Wehrl não especifica os detalhes da evolução temporal de sua proposta para a entropia.

2.2.2 Distribuições "Coerente" e de "Número"

Alguns casos particulares serão utilizados extensivamente nesta tese e portanto é interessante estudá-los nesse momento, definindo notações compactas. Estamos nos referindo às distribuições clássicas dos estados coerentes e de número. Então, de acordo com a discussão realizada na seção anterior, as distribuições iniciais serão dadas pelas funções Q devidamente normalizadas,

$$\begin{aligned}
\rho_{ec}(q,p) &= \frac{\langle\alpha|\alpha_0\rangle\langle\alpha_0|\alpha\rangle}{2\pi\hbar} = \frac{e^{-|\alpha-\alpha_0|^2}}{2\pi\hbar} \\
&= \frac{e^{-\frac{(q-q_0)^2}{2\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \\
&\equiv \mathcal{G}(q-q_0)\,\mathcal{G}(p-p_0),
\end{aligned} \tag{2.29}$$

$$\begin{aligned}
\rho_{en}(q,p) &= \frac{\langle\alpha|n\rangle\langle n|\alpha\rangle}{2\pi\hbar} = \frac{e^{-|\alpha|^2}}{2\pi\hbar}\frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \\
&= \frac{1}{n!}\left(\frac{p^2+q^2}{2\hbar}\right)^n \frac{e^{-\frac{p^2+q^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar} \\
&= \mathcal{P}^n(q,p),
\end{aligned} \tag{2.30}$$

nas quais definimos as respectivas funções *Gaussiana* e *Poissoniana*:

$$\mathcal{G}_\sigma(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}}, \tag{2.31}$$

$$\mathcal{P}_{\sigma}^{n}(x,y) = \frac{1}{n!}\left(\frac{x^2+y^2}{\sigma}\right)^{n} \mathcal{G}_{\sigma}(x)\mathcal{G}_{\sigma}(y), \tag{2.32}$$

sendo que omitiremos o índice σ sempre que ele for igual a $2\hbar$, o que acontecerá na grande maioria dos casos, a exemplo do que foi feito nas equações (2.29) e (2.30). Nessas equações, utilizamos também os índices "*ec*" e "*en*" para indicar que estamos trabalhando com a distribuição do *estado coerente* ou com a do *estado de número* respectivamente.

Antes de prosseguirmos com a resolução de problemas físicos utilizando os formalismos citados, faz-se necessário o estudo de algumas propriedades de operadores clássicos Liouvillianos, as quais serão fundamentais para a solução analítica dos problemas que serão tratados.

2.3 Operadores Liouvillianos

2.3.1 Operador Deslocamento

O operador deslocamento pode ser obtido de forma bastante instrutiva diretamente do binômio de Newton através do seguinte procedimento:

$$\begin{aligned}
(a+b)^n &= \sum_{p=0}^{n} \frac{n!}{(n-p)!p!}\, a^{n-p}b^{p} \\
&= \sum_{p=0}^{n} \frac{n(n-1)...(n-p+1)}{p!}\, a^{n-p}b^{p} \\
&= \sum_{p=0}^{n} \frac{b^p}{p!}\partial_a^p a^n = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(b\partial_a)^p}{p!} a^n
\end{aligned}$$

$$\therefore (a+b)^n = e^{b\partial_a} a^n. \tag{2.33}$$

Podemos então generalizar esta equação para qualquer função analítica que possa ser expandida em termos de uma série de Taylor. Aliás, a própria série de Taylor já contém essa informação:

$$\begin{aligned}
f(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left[\partial_y^n f(y)\right]_{y=x_0} (x-x_0)^n \\
&= \left\{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{[(x-x_0)\partial_y]^n}{n!} f(y)\right\}_{y=x_0}
\end{aligned}$$

$$\therefore f(x) = \left[e^{(x-x_0)\partial_y} f(y)\right]_{y=x_0}. \tag{2.34}$$

Assim, para uma função f bem comportada, temos a propriedade que nos interessa:

$$\blacktriangle \qquad e^{\alpha\partial_x} f(x) = f(x+\alpha), \tag{2.35}$$

sendo α independente de x.

2.3.2 Operador Dilatação

Vamos agora apresentar um novo operador Liouvilliano que será de fundamental importância para a solução da equação mestra clássica que deduziremos mais tarde. Este operador "expande" distâncias nos espaço de fase. Iniciamos com

$$\begin{aligned} e^{\alpha x\partial_x}x^n &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^k}{k!}(x\partial_x)^k x^n = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^k}{k!}(x\partial_x)^{k-1}nx^n \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^k}{k!}(x\partial_x)^{k-2}n^2x^n = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^k}{k!}(x\partial_x)^{k-l}n^lx^n \\ &\vdots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\alpha n)^k}{k!}x^n = e^{\alpha n}x^n = (e^{\alpha}x)^n. \end{aligned} \tag{2.36}$$

Então, sendo $f(x)$ uma função de x bem comportada, generalizamos:

$$\blacktriangle \qquad e^{\alpha x\partial_x}f(x) = f(e^{\alpha}x). \tag{2.37}$$

Note-se então que $e^{\lambda t x\partial_x}x = e^{\lambda t}x$, o que nos faz conjecturar que este tipo de operador deve aparecer de alguma forma na álgebra associada aos sistemas caóticos. Nesses casos, λ estaria conectado com os expoentes de Lyapunov do sistema.

2.3.3 Operador Momento Angular

Seja $\mathcal{L}_0(x,y)$ definido como

$$\mathcal{L}_0(x,y) = \omega(x\partial_y - y\partial_x), \tag{2.38}$$

sendo ω uma constante que define a unidade dimensional do operador $\mathcal{L}_0$. Estamos interessados em calcular a seguinte aplicação deste operador sobre uma função de x e y:

$$e^{\mathcal{L}_0(x,y)t}f(x,y), \tag{2.39}$$

sendo t uma constante com dimensão igual a $[\omega^{-1}]$. Utilizando a transformação

$$x = \sqrt{2Y}\,\operatorname{sen}X \qquad \text{e} \qquad p = \sqrt{2Y}\,\cos X, \tag{2.40}$$

podemos reescrever o operador Liouvilliano como

$$\mathcal{L}_0(x(X,Y),y(X,Y)) = -\omega\partial_X \equiv \mathcal{L}_T(X,Y). \tag{2.41}$$

Então, segue que

$$\begin{aligned} e^{\mathcal{L}_0(x,y)t}f(x,y) &= e^{\mathcal{L}_T(X,Y)t}f(\sqrt{2Y}\,\operatorname{sen}X, \sqrt{2Y}\,\cos X) \\ &= e^{-wt\partial_X}f(\sqrt{2Y}\,\operatorname{sen}X, \sqrt{2Y}\,\cos X). \end{aligned} \tag{2.42}$$

Agora temos um operador clássico com propriedades conhecidas e podemos fazer sua aplicação direta apenas deslocando X para $X - wt$, isto é,

$$e^{\mathcal{L}_0 t}f = f(\sqrt{2Y}\,\operatorname{sen}(X-wt), \sqrt{2Y}\,\cos(X-wt)). \tag{2.43}$$

Dessa forma, utilizando a transformação (2.40), obtemos a relação desejada:

$$\blacktriangle \qquad e^{\mathcal{L}_0(x,y)t} f(x,y) = f\left(x\,\cos wt - y\,\operatorname{sen} wt, y\,\cos wt + x\,\operatorname{sen} wt\right). \tag{2.44}$$

Note-se que acabamos de resolver o problema do oscilador harmônico em uma dimensão, pois

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(q,p) &= \tfrac{\omega}{2}(p^2+q^2) \equiv \omega \mathcal{H}_0(q,p), \\ \mathcal{L}(q,p) &= \omega(q\partial_p - p\partial_q) \equiv \omega \mathcal{L}_0(q,p). \end{aligned} \tag{2.45}$$

Bastante útil também é a seguinte notação vetorial:

$$R(t) = e^{\omega t \mathcal{L}_0(x,y)} R = M[\omega t] R, \tag{2.46}$$

$$R(t) = \begin{bmatrix} x(t) \\ y(t) \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad M[\omega t] = \begin{pmatrix} \cos\omega t & \operatorname{sen}\omega t \\ -\operatorname{sen}\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix}, \tag{2.47}$$

sendo $R = R(0)$ e M a matriz de rotações no plano xy. Fica claro, das considerações acima, o caráter de "momento angular" do operador $\mathcal{L}_0$.

2.3.4 "Expansão Semiclássica"

Vamos agora mostrar uma das utilidades do operador deslocamento no cálculo de médias com distribuições Gaussianas. Seja o cálculo do valor médio da função clássica $\mathcal{O}(q,p)$ no instante t para uma distribuição inicial Gaussiana em uma dimensão:

$$\langle \mathcal{O} \rangle(t) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dq\,dp\,\rho_0(q,p)\mathcal{O}(q,p,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dq\,dp\,\frac{e^{-\frac{(q-q_c)^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}}\,\frac{e^{-\frac{(p-p_c)^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}}\mathcal{O}(q,p,t), \tag{2.48}$$

sendo (q_c, p_c) o ponto clássico sobre o qual foi centrada a Gaussiana. Agora fazemos uma mudança de variáveis, $(q-q_c) = x$ e $(p-p_c) = y$, e utilizamos o operador deslocamento (2.35) para reescrever $\langle \mathcal{O} \rangle$ na forma

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}(q,p) \rangle(t) \;&=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \frac{e^{-\frac{x^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}}\frac{e^{-\frac{y^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}}\mathcal{O}(q_c+x, p_c+y, t) \\ &=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \frac{e^{-\frac{x^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}}\frac{e^{-\frac{y^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}} e^{x\partial_{q_c}} e^{y\partial_{p_c}} \mathcal{O}(q_c, p_c, t). \end{aligned} \tag{2.49}$$

A idéia é que agora a função $\mathcal{O}$ não depende mais das variáveis de integração e, portanto, completando quadrados, podemos fazer a integral Gaussiana formalmente e obter

$$\blacktriangle \quad \langle \mathcal{O}(q,p) \rangle(t) \;=\; e^{\frac{\sigma}{4}\nabla_c^2} \mathcal{O}(q_c, p_c, t), \tag{2.50}$$

com $\nabla_c^2 = \partial_{q_c}^2 + \partial_{p_c}^2$. Este resultado pode ser deduzido a partir da expansão em série de Taylor da função $\mathcal{O}$ diretamente na equação (2.48). Depois disso, pode-se realizar as integrais analiticamente e reagrupar o resultado no formato diferencial mostrado acima.

Note-se que o nosso problema de calcular a média clássica foi reduzido à atuação do operador Laplaciano no ponto (q_c, p_c), centro da distribuição no instante inicial. Novamente, devemos nos lembrar que temos uma série infinita em potências do operador Laplaciano. Por outro lado, à medida que tomamos σ cada vez menor comparado a uma ação clássica característica, podemos truncar nossa série, obtendo uma expansão semiclássica nas primeiras ordens em σ. Além disso, essa mesma argumentação parece indicar que o limite clássico existe ($\lim_{\sigma \to 0} \langle \mathcal{O} \rangle = \mathcal{O}(q_c, p_c, t)$) e que deve ser alcançado de forma assintótica.

Capítulo 3

Sistemas Integráveis Lineares

Neste capítulo vamos aplicar os formalismos descritos nos capítulos anteriores para resolver alguns casos interessantes de interações lineares, procurando sempre informações que nos esclareçam as questões referentes ao fenômeno do emaranhamento e ao regime semiclássico. Assim, o tempo todo faremos comparações entre os resultados oferecidos por cada formalismo, o quântico, o estatístico e o clássico.

Em busca dessas informações vamos trabalhar com alguns modelos simples e importantes que nos oferecem a possibilidade de obter soluções analíticas para a evolução dinâmica de grandezas como entropia e valores esperados. Neste contexto, trabalharemos essencialmente com sistemas bidimensionais com dois bósons (osciladores) interagentes, sendo que a interação será escolhida em cada caso de forma a permitir a solução analítica do problema. Neste capítulo, utilizaremos dois tipos de interação bilinear.

Em cada seção que se segue estudaremos um tipo de interação, apresetando as soluções nos três formalismos sempre que possível.

3.1 Interação *Bilinear*

O sistema que estudaremos nesta seção foi tratado durante muito tempo apenas como um sistema integrável pedagógico, para o qual todas as soluções dinâmicas podem ser rapidamente obtidas face a uma transformação canônica adequada. Entretanto, com o avanço das técnicas experimentais em óptica quântica, este modelo passou a ser de grande interesse nesta área [68, 69], pois acaba sendo um modelo bastante simples para descrever a interação entre dois campos bosônicos em cavidades ópticas ressonantes de alta qualidade. O Hamiltoniano quântico que modela esta situação (desprezando perdas) é dado por

$$\begin{aligned} \widehat{H} &= \hbar\omega_1\left(\widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_1+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_2\left(\widehat{a}_2^\dagger\widehat{a}_2+\frac{1}{2}\right) \\ &+ \hbar\lambda\left(\widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_2+\widehat{a}_1\widehat{a}_2^\dagger\right)+\hbar\lambda\left(\widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_2^\dagger+\widehat{a}_1\widehat{a}_2\right), \end{aligned} \tag{3.1}$$

sendo a condição de ressonância implementada com $\omega_1=\omega_2=\omega$. O campo na cavidade k é descrito por operadores bosônicos de criação ($\widehat{a}_k^\dagger$) e aniquilação ($\widehat{a}_k$), sendo ω_k a frequência eletromagnética permitida pelas dimensões físicas da cavidade.

O análogo clássico deste sistema, que pode ser obtido pelo procedimento que descrevemos nas seções anteriores, é bastante utilizado nos livros-textos para descrever a interação clássica de dois osciladores harmônicos interagindo através de um acoplamento *posição-posição* [70] da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \left(\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{m_1\omega_1^2 q_1^2}{2}\right) + \left(\frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{m_2\omega_2^2 q_2^2}{2}\right) + \lambda q_1 q_2. \tag{3.2}$$

3.1.1 Solução Clássica

Nesta seção vamos resolver a dinâmica clássica do sistema descrito acima para o caso de osciladores ressonantes ($\omega_1 = \omega_2 = \omega$) com massas unitárias ($m_1 = m_2 = 1$), isto é, trataremos o caso de osciladores com mesma constante de mola. A solução deste problema é bastante simples e pode ser obtida através dos procedimentos usuais oferecidos pelo formalismo Hamiltoniano, que exige em última análise, a solução de um sistema de $2d$ equações diferencias de primeira ordem em t, sendo d o número de graus de liberdade do sistema. Para este sistema em particular, podemos optar pela utilização do formalismo dos operadores Liouvillianos clássicos, que fornece a solução da dinâmica através da simples aplicação do operador de momento angular $\mathcal{L}_0$ dado na equação (2.38).

A ausência de simetria qp[1] nos impede de aplicar o procedimento Liouvilliano diretamente, de modo que, a exemplo do que ocorre no caso do procedimento padrão, somos levados a fazer inicialmente uma transformação canônica,

$$q_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Q_1}{\sqrt{\Omega_1}} \pm \frac{Q_2}{\sqrt{\Omega_2}}\right), \qquad p_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\Omega_1}P_1 \pm \sqrt{\Omega_2}P_2\right), \tag{3.3}$$

que deixa a nova Hamiltoniana no formato "diagonal" adequado:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \Omega_1\left(\frac{P_1^2 + Q_1^2}{2}\right) + \Omega_2\left(\frac{P_2^2 + Q_2^2}{2}\right), \tag{3.4}$$

na qual escolhemos

$$\Omega_{\frac{1}{2}} = \sqrt{\omega^2 \pm \lambda}\,. \tag{3.5}$$

Agora, o operador Liouvilliano assume a forma que nos é familiar,

$$\mathcal{L} = \Omega_1\mathcal{L}_0(Q_1, P_1) + \Omega_2\mathcal{L}_0(Q_2, P_2), \tag{3.6}$$

e a solução dinâmica do problema clássico é dada imediatamente por

$$\tilde{R}_k(t) = M[\Omega_k t]\tilde{R}_k, \tag{3.7}$$

com

$$\tilde{R}_k(t) = \begin{bmatrix} Q_k(t) \\ P_k(t) \end{bmatrix}, \tag{3.8}$$

sendo $M[\Omega_k t]$ a matriz das rotações bidimensionais assoaciada ao operador Liouvilliano de momento angular $\mathcal{L}_0$ e k o índice assoaciado ao k-ésimo oscilador. Na notação adotada para

[1] Dizemos que o sistema apresenta simetria qp se a função Hamiltoniana satisfaz a relação $\mathcal{H}(q,p) = \mathcal{H}(p,q)$.

os vetores $\tilde{R}(t)$, temos que $\tilde{R}_k(0) = \tilde{R}_k$ é a condição inicial do oscilador k nas variáveis maiúsculas. Então, através de (3.3) e (3.7) e utilizando-se a forma explícita de M, obtemos a solução do problema original:

$$\begin{aligned} q_{\frac{1}{2}}(t) &= q_1\left(\frac{\cos\Omega_1 t}{2} \pm \frac{\cos\Omega_2 t}{2}\right) + p_1\left(\frac{\operatorname{sen}\Omega_1 t}{2\Omega_1} \pm \frac{\operatorname{sen}\Omega_2 t}{2\Omega_2}\right) \\ &+ q_2\left(\frac{\cos\Omega_1 t}{2} \mp \frac{\cos\Omega_2 t}{2}\right) + p_2\left(\frac{\operatorname{sen}\Omega_1 t}{2\Omega_1} \mp \frac{\operatorname{sen}\Omega_2 t}{2\Omega_2}\right), \qquad (3.9) \\ p_{\frac{1}{2}}(t) &= p_1\left(\frac{\cos\Omega_1 t}{2} \pm \frac{\cos\Omega_2 t}{2}\right) - q_1\left(\frac{\Omega_1\operatorname{sen}\Omega_1 t}{2} \pm \frac{\Omega_2\operatorname{sen}\Omega_2 t}{2}\right) \\ &+ p_2\left(\frac{\cos\Omega_1 t}{2} \mp \frac{\cos\Omega_2 t}{2}\right) - q_2\left(\frac{\Omega_1\operatorname{sen}\Omega_1 t}{2} \mp \frac{\Omega_2\operatorname{sen}\Omega_2 t}{2}\right). \qquad (3.10) \end{aligned}$$

Note-se que no procedimento dos superoperadores Liouvillianos não é necessário resolver qualquer equação diferencial, mas devemos conhecer a aplicação de cada operador. É importante notarmos também que tal solução já traz consigo o ingrediente fundamental que provocará o "emaranhamento clássico" entre distribuições clássicas, a saber: o "estado clássico" de um oscilador no instante t, dado pela trajetória $(q_k(t), p_k(t))$, depende da condição inicial do outro oscilador no instante inicial. Este acoplamento entre os espaços de fase está totalmente conectado ao parâmetro de interação λ, dado que para $\lambda = 0$, teremos $\Omega_1 = \Omega_2 = \omega$ e os osciladores não "sentem" a presença um do outro, isto é, o movimento fica completamente desacoplado, "desemaranhado".

3.1.2 Entropia Linear Clássica

O primeiro cálculo de entropia linear clássica para o caso de estados iniciais Gaussianos foi feito pelo Prof. Marcus A. M. de Aguiar (IFGW-Unicamp), através do procedimento que temos usado neste trabalho. Mais tarde, reproduzimos esses cálculos, a partir do cálculo clássico de trajetórias mostrado acima, e analisamos alguns casos especiais que serão discutidos a seguir. De posse das trajetórias clássicas, pode-se calcular a evolução temporal das distribuições Gaussianas clássicas através da expressão

$$\rho(r_j, t) = \prod_{j=1}^{4}\left\{\frac{e^{-\frac{\left[r_j(-t)-r_{j0}\right]^2}{2\sigma_j}}}{\sqrt{2\pi\sigma_j}}\right\}, \qquad (3.11)$$

sendo $(r_1, r_2, r_3, r_4) = (q_1, p_1, q_2, p_2)$, σ_j o quadrado da largura da Gaussiana referente à direção j do espaço de fase e "0" o índice que denota o ponto sobre o qual a distribuição foi centrada em $t = 0$. Os próximos passos em direção ao estenso cálculo da entropia linear clássica envolvem essencialmente integrais Gaussianas e não o explicitaremos aqui (maiores detalhes em [71]).

3.1.3 Entropia Linear Quântica

O cálculo quântico da entropia linear parcial foi realizado numericamente pela Profa. Kyoko Furuya (IFGW-Unicamp) e mais tarde resolvido analiticamente pelo Prof. Marcus A. M. de Aguiar (IFGW-Unicamp).

3.1.4 Entropia Linear Semiclássica

Vamos agora escrever uma forma semiclássica para a entropia linear utilizando a fórmula semiclássica do propagador na base de estados coerentes. A fórmula será proposta para estados iniciais coerentes dados na forma

$$\widehat{\rho}(0) = \widehat{\rho}_1(0) \otimes \widehat{\rho}_2(0) = |z_0\rangle\langle z_0| \otimes |w_0\rangle\langle w_0|, \tag{3.12}$$

na qual utilizamos z para estados coerentes de um dos subsistemas e w para estados coerentes do outro. Agora, partimos da definição da entropia linear e utilizamos a base supercompleta dos estados coerentes ($\int \frac{d^2z}{\pi}|z\rangle\langle z| = \mathbf{1}_1$ e $\int \frac{d^2w}{\pi}|w\rangle\langle w| = \mathbf{1}_2$) para escrever

$$\begin{aligned}
\delta_1(t) &= 1 - Tr_1\Big\{Tr_2[\widehat{\rho}(t)]\Big\}^2 \qquad (3.13)\\
&= 1 - Tr_1\Big\{Tr_2[\widehat{\mathcal{U}}\,\widehat{\rho}(0)\,\widehat{\mathcal{U}}^\dagger]\Big\}^2\\
&= 1 - Tr_1\Big\{Tr_2[\widehat{\mathcal{U}}\,\widehat{\rho}(0)\,\widehat{\mathcal{U}}^\dagger]\,\mathbf{1}_1\,Tr_2[\widehat{\mathcal{U}}\,\widehat{\rho}(0)\,\widehat{\mathcal{U}}^\dagger]\Big\}\\
&= 1 - \int \frac{d^2z_1}{\pi}\frac{d^2z_2}{\pi}\frac{d^2w_1}{\pi}\frac{d^2w_2}{\pi}\\
&\times \langle z_1w_1|\widehat{\mathcal{U}}|z_0w_0\rangle\langle z_0w_0|\widehat{\mathcal{U}}^\dagger|z_2w_1\rangle\langle z_2w_2|\widehat{\mathcal{U}}|z_0w_0\rangle\langle z_0w_0|\widehat{\mathcal{U}}^\dagger|z_1w_2\rangle,
\end{aligned}$$

com $\widehat{\mathcal{U}} = e^{\frac{\widehat{H}t}{i\hbar}}$. Agora utilizamos a definição do *propagador de estados coerentes*,

$$K(z_i^*, w_j^*, z_k, w_l, t) \equiv \langle z_iw_j|\,\widehat{\mathcal{U}}(t)\,|z_kw_l\rangle = K_{ijkl}, \tag{3.14}$$

para reescrever a entropia linear na forma

$$\delta_1(t) = 1 - \int \mathcal{D}_{12}(\mathbf{z},\mathbf{w})\; K_{1100}\,K^*_{0021}\,K_{2200}\,K^*_{0012}, \tag{3.15}$$

na qual $\mathcal{D}_{12}(\mathbf{z},\mathbf{w}) \equiv \frac{d^2z_1}{\pi}\frac{d^2z_2}{\pi}\frac{d^2w_1}{\pi}\frac{d^2w_2}{\pi}$. A eq. (3.15) é a fórmula exata da entropia linear em termos dos propagadores de estados coerentes, isto é, até o momento não foi feito qualquer tipo de aproximação. A idéia é então substituir os propagadores exatos K por suas formas semiclássicas $\mathcal{K}$ de acordo com a proposta de Baranger e colaboradores [63, 64], o que nos leva à seguinte fórmula para a *entropia linear semiclássica*:

$$\delta_{1_{semicl}}(t) = 1 - \int \mathcal{D}_{12}(\mathbf{z},\mathbf{w})\; \mathcal{K}_{1100}\,\mathcal{K}^*_{0021}\,\mathcal{K}_{2200}\,\mathcal{K}^*_{0012}. \tag{3.16}$$

Esta fórmula vale para qualquer sistema com dois graus de liberdade bosônicos com estados iniciais coerentes. O cálculo do propagador semiclássico foi feito de acordo com a receita detalhada apresentada em [64] para o caso bidimensional.

3.1.5 Resultados

Todos os cálculos para a entropia linear, a saber, o quântico, o clássico e o semiclássico, levaram a resultados idênticos como podemos observar na figura 3.1. Apesar de não ter sido obtida nenhuma comprovação analítica, todos os resultados numéricos apontam de forma inequívoca para este fato. Além disso, pudemos também verificar numericamente que não

há qualquer dependência da entropia linear com a posição inicial da distribuição ou com a largura da distribuição.

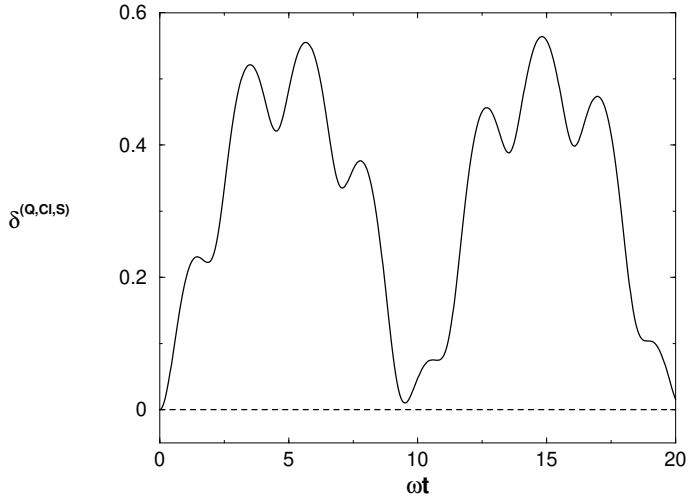

Figura 3.1: Entropias quântica (δ^Q), clássica (δ^{Cl}) e semiclássica (δ^S) para $\lambda = 0.9$ e $\omega = 1$ (linha sólida) e "desvio médio" definido como $d = (\delta^Q - \delta^{Cl})^2 + (\delta^Q - \delta^S)^2$ (linha tracejada). Resultados idênticos!

De fato, a entropia linear depende apenas dos valores das frequências ω e λ do modelo, como mostra a figura 3.2, na qual exibimos a entropia linear clássica para diversos valores da frequência de acoplamento.

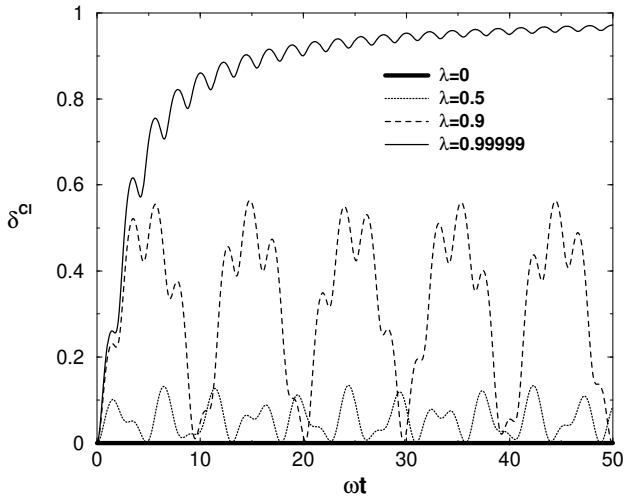

Figura 3.2: Entropia linear clássica para diversos valores da frequência de acoplamento λ, com $\omega = 1$.

Um resultado interessante que emerge desses cálculos (vide figura 3.2) é o comportamento *irreversível* da entropia linear no caso em que $\lambda \to \omega^2$. Quando tal condição é satisfeita, o sistema não apresenta mais as recoerências (decréscimos na entropia), e deste ponto de vista, temos um comportamento "descoerente" para o sistema que se assemelha àquele obtido via acoplamento com um reservatório. É interessante tentarmos uma explicação para isso apenas

analisando a dinâmica característica dos possíveis regimes do potencial do sistema em função dos parâmetros ω e λ. Estudemos inicialmente o seguinte teorema [72]:

***Teorema**: Seja a seção cônica $Ax^2 + Bxy + Cy^2 + Dx + Ey + F = 0$. Então, a seção será*

$$\begin{array}{l} \text{parábola se } B^2 - 4AC = 0, \\ \text{elipse se } B^2 - 4AC < 0, \\ \text{hipérbole se } B^2 - 4AC > 0. \end{array} \tag{3.17}$$

Aplicando o teorema para o nosso potencial bilinear $V(q_1, q_2) = \omega^2 \left(\frac{q_1^2+q_2^2}{2}\right) + \lambda q_1 q_2$, teremos curvas de nível na forma de:

$$\begin{array}{l} \text{parábola se } |\lambda| = \omega^2, \\ \text{elipse se } |\lambda| < \omega^2, \\ \text{hipérbole se } |\lambda| > \omega^2. \end{array} \tag{3.18}$$

Aqui fica evidente a importância da condição $\lambda = \omega^2$ para a dinâmica. Na figura (3.3), na qual estão ilustrados os regimes descritos nas condições dadas em (3.18), fica claro que existe uma transição de uma dinâmica de órbitas fechadas ($\lambda < \omega^2$) para outra de órbitas abertas ($\lambda > \omega^2$).

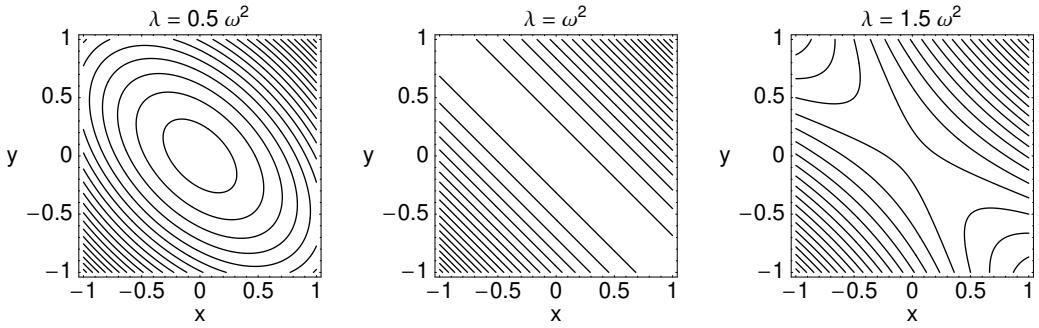

Figura 3.3: Curvas de nível do potencial bilinear $V(x, y) = \omega^2 \left(\frac{x^2+y^2}{2}\right) + \lambda xy$ em função dos parâmetros ω e λ. Em $\lambda = \omega^2$ ocorre a transição de um regime de órbitas fechadas para outro de órbitas abertas.

Desse ponto de vista, abandona-se uma dinâmica restrita a uma região finita do espaço de fase para dar lugar a uma dinâmica que acessa um número cada vez maior de estados clássicos no espaço de fase. Se fizéssemos uma grade no espaço $q_1 q_2$ para $\lambda < \omega^2$, toda a evolução do sistema estaria contida em um número finito de quadradinhos (numa elipse), enquanto que no caso de $\lambda \geq \omega^2$ seria necessário um número infinito de quadradinhos para conhecermos toda a evolução do sistema (aí está o conceito de entropia ou de informação necessária para localizar o sistema [73]). A condição de *localização* da trajetória no espaço $q_1 q_2$ no regime parabólico ($\lambda = \omega^2$) pode ser vislumbrada analiticamente na eq. (3.9) no limite de tempos longos:

$$\lim_{t\to\infty} \left[\lim_{\lambda\to\omega^2} q_{\frac{1}{2}}(t) \right] = \lim_{t\to\infty} \left(\frac{\pm p_1 \mp p_2}{2} \right) t. \tag{3.19}$$

Aqui fica claro que só existirão órbitas periódicas "localizadas" se $p_1 = p_2$, o que implica em escolhermos o momento total inicial na direção perpendicular à linha de potencial mínimo

($q_1 = -q_2$); caso contrário, qualquer trajetória "escoará" por este eixo (vide figura 3.4). Note-se entretanto, que do ponto de vista das entropias, no regime parabólico, a largura inicial das distribuições impede que o pacote mantenha sua coerência (quântica ou classicamente), e por isso o sistema é sempre irreversível. Em outras palavras, mesmo que o centro do pacote esteja sobre a condição de periodicidade ($p_1 = p_2$), todo o resto do pacote estará fora desta condição.

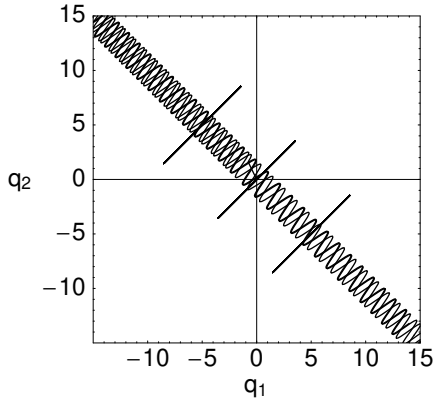

Figura 3.4: Três órbitas periódicas "localizadas" (linhas pequenas perpendiculares à reta $q_2 + q_1 = 0$, com $p_1 = p_2 = 5$) e órbita "deslocalizada" ($q_1 = q_2 = 0$, $p_1 = 1$ e $p_2 = 1.5$).

Uma outra forma de pensarmos este mesmo fato é a seguinte: a órbita periódica (uma linha no espaço $q_1 q_2$), tem medida de área nula; por outro lado, todo pacote quântico ou clássico tem medida de área finita (da ordem de $\hbar$). Então, no regime parabólico (ou hiperbólico), nenhuma distribuição poderá simular as condições de localização, e dada a simetria do potencial, todas devem sofrer o mesmo tipo de descoerência, independentemente do ponto em que foi centrada inicialmente. Apesar de toda a análise ter sido feita baseada em grandezas clássicas, esperamos que argumentos completamente análogos (do ponto de vista do potencial e das distribuições no espaço de fase) sejam aplicáveis ao contexto quântico.

3.2 Interação *RWA*

Vamos agora estudar um caso ainda mais simples de interação, um paradigma de sistema integrável, também bastante conhecido dos livros didáticos. Estudaremos o seguinte modelo clássico:

$$\mathcal{H} = \omega_1 \left(\frac{p_1^2 + q_1^2}{2} \right) + \omega_2 \left(\frac{p_1^2 + q_1^2}{2} \right) + \lambda \left(q_1 q_2 + p_1 p_2 \right). \tag{3.20}$$

Apesar da aparente forma mais complexa, por envolver acoplamento momento-momento, sua simetria simplifica a solução. Note-se que estamos usando coordenadas tais que $[q_k] = [p_k] = [\hbar]$. Fazendo então a quantização do sistema de acordo com os procedimentos já discutidos, escrevemos o Hamiltoniano quântico bosônico na forma

$$\widehat{H} = \hbar\omega_1 \left(\widehat{a}_1^\dagger \widehat{a}_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(\widehat{a}_2^\dagger \widehat{a}_2 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\lambda \left(\widehat{a}_1 \widehat{a}_2^\dagger + \widehat{a}_1^\dagger \widehat{a}_2 \right), \tag{3.21}$$

sendo $\widehat{a}_k$ e $\widehat{a}_k^\dagger$ os operadores de aniquilação e criação, respectivamente, para o bóson k. O acoplamento entre os campos neste hamiltoniano é conhecido como interação na *RWA* (rotating-wave approximation) [74], e faz referência ao fato de ser este termo mais importante que o termo $(\widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_2^\dagger + \widehat{a}_1\widehat{a}_2)$.

3.2.1 Solução Quântica

Vamos agora encontrar a solução quântica para a dinâmica de estados de número e estados coerentes. Nesta etapa, por questão de completeza, estaremos apenas reproduzindo ou reescrevendo de forma diferente, resultados bastante conhecidos da literatura. Essencialmente, seguiremos o procedimento proposto por Zoubi e colaboradores [69] e trabalharemos sempre na ressonânica $\omega_1 = \omega_2 = \omega$.

Estados de Número

Seja a seguinte transformação para novos operadores bosônicos $\widehat{A}_k$ e $\widehat{A}_k^\dagger$:

$$\widehat{a}_1 = \frac{\widehat{A}_1 + \widehat{A}_2}{\sqrt{2}}, \qquad \widehat{a}_2 = \frac{\widehat{A}_1 - \widehat{A}_2}{\sqrt{2}}, \tag{3.22}$$

com $[\widehat{A}_i, \widehat{A}_j] = 0$ e $[\widehat{A}_i, \widehat{A}_j^\dagger] = \widehat{\mathbf{1}}\delta_{ij}$, para $i,j = 1,2$. Através dela, pode-se reescrever o Hamiltoniano (3.21) na forma diagonal

$$\widehat{H} = \hbar(\omega+\lambda)\left(\widehat{N}_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar(\omega-\lambda)\left(\widehat{N}_2 + \frac{1}{2}\right), \tag{3.23}$$

na qual $\widehat{N}_k = \widehat{A}_k^\dagger\widehat{A}_k$ é o operador número do novo oscilador k. Agora é preciso se perguntar o que ocorre com os estados do sistema original na base dos autoestados dos novos bósons. Considere o estado inicial para o sistema original

$$|\psi(0)\rangle = |n_1\rangle_a \otimes |n_2\rangle_a, \tag{3.24}$$

no qual o subíndice "a" denota que o estado pertence ao espaço dos operadores bosônicos $\widehat{a}$ e $\widehat{a}^\dagger$. Utilizaremos uma notação completamente análoga para o espaço "A". Com a imposição de que o vácuo seja descrito pelo mesmo vetor estado em qualquer das representações e com o auxílio da transformação (2.40), podemos relacionar as bases através do seguinte cálculo:

$$\begin{aligned}
|n_1,n_2\rangle_a &= \frac{(\widehat{a}_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}}\frac{(\widehat{a}_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}}|0,0\rangle_a = \frac{(\widehat{A}_1^\dagger+\widehat{A}_2^\dagger)^{n_1}(\widehat{A}_1^\dagger-\widehat{A}_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{2^{(n_1+n_2)}n_1!n_2!}}|0,0\rangle_A \\
&= \sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2}\frac{\binom{n_1}{i}\binom{n_2}{j}}{\sqrt{2^{(n_1+n_2)}n_1!n_2!}}(\widehat{A}_1^\dagger)^{n_1-i}(\widehat{A}_2^\dagger)^i(\widehat{A}_1^\dagger)^{n_2-j}(-\widehat{A}_2^\dagger)^j|0,0\rangle_A \\
&= \sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2}\frac{(-1)^j\binom{n_1}{i}\binom{n_2}{j}}{\sqrt{2^{(n_1+n_2)}n_1!n_2!}}(\widehat{A}_1^\dagger)^{n_1+n_2-(i+j)}(\widehat{A}_2^\dagger)^{i+j}|0,0\rangle_A \\
&= \sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2}(-1)^j\binom{n_1}{i}\binom{n_2}{j}\sqrt{\frac{[n_1+n_2-(i+j)]!(i+j)!}{2^{(n_1+n_2)}n_1!n_2!}} \\
&\quad \times |n_1+n_2-(i+j),(i+j)\rangle_A\,.
\end{aligned}$$

Então, de forma mais compacta, podemos reescrever a relação entre as bases como

$$\begin{cases} |n_1, n_2\rangle_a = \sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2} c_{i,j}(n_1,n_2)\,|n_1+n_2-(i+j),(i+j)\rangle_A \\ \\ c_{i,j}(n_1,n_2) = (-1)^j \binom{n_1}{i}\binom{n_2}{j}\sqrt{\dfrac{[n_1+n_2-(i+j)]!(i+j)!}{2^{(n_1+n_2)}n_1!n_2!}}. \end{cases} \tag{3.25}$$

Neste ponto, é importante notarmos que o emaranhamento é uma propriedade física, e portanto, seu cálculo (via entropia) não deve depender da base ou representação que escolhemos para o espaço de Hilbert, isto é, seu valor deve ser o mesmo em qualquer das representações que estamos usando. Vejamos: na representação original, temos um estado inicialmente desemaranhado (chamemos de $\widehat{\rho}_a$) e um Hamiltoniano com interação bilinear. Por outro lado, na nova representação, o Hamiltoniano se desacopla, mas o estado inicial se torna emaranhado ($\widehat{\rho}_A$). Esse cenário aparentemente inconciliável acaba sendo conectado justamente pela transformação de bases (3.25). De fato, desde que $\widehat{\rho}_a = \widehat{\rho}_A$ (são apenas representações diferentes para a mesma matriz densidade), então, ao aplicarmos o traço para calcular quantidades físicas relevantes (aquelas do sistema original), teremos por exemplo $Tr_a[\widehat{\rho}_a{}^2] = Tr_a[\widehat{\rho}_A{}^2]$. Assim, é preciso utilizar a relação (3.25) em Tr_a para se obter a maneira correta de se tomar o traço na nova representação, o que em geral é bastante diferente de $Tr_A[\widehat{\rho}_A{}^2]$. Portanto, ao realizarmos a mudança de base, acabamos alterando também a definição da entropia para que a medida física do emaranhamento permaneça inalterada. Todo o processo é regido pelas transformações (3.22) e (3.25).

Utilizando o Hamiltoniano transformado, podemos agora calcular a evolução temporal do sistema:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{\frac{\widehat{H}t}{\imath\hbar}}\,|\psi(0)\rangle \\ &= \sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2} c_{i,j}(n_1,n_2) e^{\frac{\widehat{H}t}{\imath\hbar}}\,|n_1+n_2-(i+j),(i+j)\rangle_A \\ &= \sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2} c_{i,j}(n_1,n_2) e^{-\imath[(\omega+\lambda)t(n_1+n_2-i-j+\frac{1}{2})]} \\ &\quad \times e^{-\imath[(\omega-\lambda)t(i+j+\frac{1}{2})]}\,|n_1+n_2-(i+j),(i+j)\rangle_A \\ &= e^{-\imath[\omega t(n_1+n_2+1)+\lambda t(n_1+n_2)]} \\ &\quad \times \sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2} c_{i,j}(n_1,n_2) e^{2\imath(i+j)\lambda t}\,|n_1+n_2-(i+j),(i+j)\rangle_A\,. \end{aligned} \tag{3.26}$$

Reescrevendo o estado evoluído com a fase global renomeada, obtemos simplesmente

$$\blacktriangle\ |\psi(t)\rangle = e^{-\imath\theta(t)}\sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2} c_{i,j}(n_1,n_2) e^{2\imath(i+j)\lambda t}\,|n_1+n_2-(i+j),(i+j)\rangle_A\,, \tag{3.27}$$

com $\theta(t) = \omega t(n_1+n_2+1) + \lambda t(n_1+n_2)$. Podemos agora voltar à representação original "a":

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= e^{-\imath\theta(t)} \sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2} c_{i,j}(n_1,n_2) e^{2\imath(i+j)\lambda t} \frac{(\widehat{A}_1^\dagger)^{n_1+n_2-(i+j)}}{\sqrt{[n_1+n_2-(i+j)]!}} \frac{(\widehat{A}_2^\dagger)^{i+j}}{\sqrt{(i+j)!}} |0,0\rangle_A \\
&= e^{-\imath\theta(t)} \sum_{i=0}^{n_1}\sum_{j=0}^{n_2} (-1)^j \binom{n_1}{i}\binom{n_2}{j} \frac{(\widehat{A}_2^\dagger e^{2\lambda\imath t})^{i+j} (\widehat{A}_1^\dagger)^{n_1+n_2-(i+j)}}{\sqrt{2^{n_1+n_2} n_1! n_2!}} |0,0\rangle_A \\
&= e^{-\imath\theta(t)} \frac{\left(\widehat{A}_1^\dagger + \widehat{A}_2^\dagger e^{2\lambda\imath t}\right)^{n_1}}{\sqrt{2^{n_1} n_1!}} \frac{\left(\widehat{A}_1^\dagger - \widehat{A}_2^\dagger e^{2\lambda\imath t}\right)^{n_2}}{\sqrt{2^{n_2} n_2!}} |0,0\rangle_A \\
&= \frac{e^{-\imath\omega t(n_1+n_2+1)}}{\sqrt{n_1! n_2!}} \left(\frac{\widehat{A}_1^\dagger e^{-\lambda\imath t} + \widehat{A}_2^\dagger e^{\lambda\imath t}}{\sqrt{2}}\right)^{n_1} \left(\frac{\widehat{A}_1^\dagger e^{-\lambda\imath t} - \widehat{A}_2^\dagger e^{\lambda\imath t}}{\sqrt{2}}\right)^{n_2} |0,0\rangle_A .
\end{aligned}$$

Então, utilizando a inversa da eq.(3.22) e omitindo a fase global, concluímos que

$$\blacktriangle \quad |\psi(t)\rangle = \frac{\left[\widehat{a}_1^\dagger \cos\lambda t - \imath \widehat{a}_2^\dagger \operatorname{sen}\lambda t\right]^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{\left[-\imath \widehat{a}_1^\dagger \operatorname{sen}\lambda t + \widehat{a}_2^\dagger \cos\lambda t\right]^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} |0,0\rangle_a . \tag{3.28}$$

Este resultado nos permite destacar alguns instantes interessantes na evolução:

- se $t = 0$, a equação toma a forma

$$|\psi(t)\rangle = \frac{\left(\widehat{a}_1^\dagger\right)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{\left(\widehat{a}_2^\dagger\right)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} |0,0\rangle = |n_1,n_2\rangle_a = |\psi(0)\rangle , \tag{3.29}$$

  como era de se esperar.

- se $\lambda t_m = \left(m + \frac{1}{2}\right)\pi$, com $m \in \mathbb{N}$, temos

$$\begin{aligned}
|\psi(t_m)\rangle &= (-1)^{m(n_1+n_2)} (-\imath)^{n_1+n_2} \frac{\left(\widehat{a}_1^\dagger\right)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \frac{\left(\widehat{a}_2^\dagger\right)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} |0,0\rangle \\
&= (-1)^{(m)(n_1+n_2)} (-\imath)^{n_1+n_2} |n_2,n_1\rangle_a ;
\end{aligned} \tag{3.30}$$

- se $\lambda t_m = m\pi$, temos

$$\begin{aligned}
|\psi(t_m)\rangle &= (-1)^{m(n1+n2)} \frac{\left(\widehat{a}_1^\dagger\right)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{\left(\widehat{a}_2^\dagger\right)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} |0,0\rangle \\
&= (-1)^{m(n1+n2)} |n_1,n_2\rangle_a .
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Isso mostra que o sistema sempre volta ao estado inicial (a menos de fases globais), isto é, podemos dizer que o sistema é *reversível* para autoestados do oscilador harmônico. Além disso, se $\lambda = 0$, teremos entropia nula em qualquer instante, o que significa que os osciladores não se emaranham.

Estados Coerentes

Estamos interessados agora na evolução temporal dos estados coerentes. No cálculo, utilizaremos os resultados da seção anterior:

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= e^{\frac{\widehat{H}t}{\imath\hbar}}|\psi(0)\rangle = e^{\frac{\widehat{H}t}{\imath\hbar}}|\alpha_1\rangle\otimes|\alpha_2\rangle \\
&= e^{\frac{-|\alpha_1|^2}{2}}e^{\frac{-|\alpha_2|^2}{2}}\sum_{n,m}\frac{(\alpha_1)^n}{\sqrt{n!}}\frac{(\alpha_2)^m}{\sqrt{m!}}\underbrace{e^{\frac{Ht}{\imath\hbar}}|n,m\rangle}_{\text{ver eq.(3.28)}} \\
&= e^{\frac{-|\alpha_1|^2}{2}}e^{\frac{-|\alpha_2|^2}{2}}\sum_{n,m}\frac{\left[\alpha_1(t)\cos\lambda t\ \widehat{a}_1^\dagger - \imath\alpha_1(t)\,\mathrm{sen}\,\lambda t\ \widehat{a}_2^\dagger\right]^n}{n!} \\
&\quad\times\frac{\left[-\imath\alpha_2(t)\,\mathrm{sen}\,\lambda t\ \widehat{a}_1^\dagger + \alpha_2(t)\cos\lambda t\ \widehat{a}_2^\dagger\right]^m}{m!}|0,0\rangle\,,
\end{aligned} \tag{3.32}$$

com $\alpha_k(t) = \alpha_i e^{-\imath\omega t}$. Realizando formalmente os somatórios, escreve-se a solução analítica do problema num formato bastante compacto:

$$\blacktriangle \quad |\psi(t)\rangle = \widehat{D}_1[\beta_1(t)]\widehat{D}_2[\beta_2(t)]|0,0\rangle = |\beta_1(t)\rangle\otimes|\beta_2(t)\rangle \tag{3.33}$$

$$\beta_{1,2}(t) = \alpha_{1,2}e^{-\imath\omega t}\cos\lambda t - \imath\alpha_{2,1}e^{-\imath\omega t}\,\mathrm{sen}\,\lambda t, \tag{3.34}$$

no qual utilizamos o operador deslocamento $\widehat{D}_k(\alpha) = e^{\alpha a_k^\dagger - \alpha^* a_k}$ que possui a propriedade bem conhecida: $\widehat{D}_k(\alpha)\,|0\rangle_k = |\alpha\rangle_k$. Este resultado (3.33) é bastante interessante pois mostra que **não** há emaranhamento no caso de estados coerentes. Além disso, depois de alguma álgebra, podemos reescrever os estados coerentes evoluídos em função da trajetória clássica da seguinte forma:

$$\beta_k(t) = \frac{q_k(t) + \imath p_k(t)}{\sqrt{2\hbar}}, \tag{3.35}$$

$$q_{1,2}(t) = \big(q_{1,2}\cos\lambda t + p_{2,1}\,\mathrm{sen}\,\lambda t\big)\cos\omega t + \big(p_{1,2}\cos\lambda t - q_{2,1}\,\mathrm{sen}\,\lambda t\big)\,\mathrm{sen}\,\omega t,$$

$$p_{1,2}(t) = \big(p_{1,2}\cos\lambda t - q_{2,1}\,\mathrm{sen}\,\lambda t\big)\cos\omega t + \big(q_{1,2}\cos\lambda t + p_{2,1}\,\mathrm{sen}\,\lambda t\big)\,\mathrm{sen}\,\omega t,$$

sendo $q_k(t)$ e $p_k(t)$ as soluções do problema clássico, como mostraremos adiante. Percebe-se então que o pacote quântico evolui coerentemente sempre com seu máximo sobre a trajetória clássica.

Estado Coerente ⊗ Estado de Número

Este caso também será estudado para a interação RWA, entretanto nenhum cálculo geral foi feito, de modo que os resultados serão apresentados apenas no momento das devidas comparações. Apesar disso, é interessante analisarmos alguns casos particulares principalmente do ponto de vista das entropias clássicas que trarão informações novas em relação ao caso de estados somente coerentes ou somente de número.

Valores Esperados e Variâncias

O cálculo de valores esperados e variâncias da posição e do momento para o caso de estados coerentes é imediato, dado que sabemos que o estado evoluído do sistema é simplesmente o produto de dois estados coerentes. Para os valores esperados, temos

$$\langle R_k(t)\rangle_Q = \begin{bmatrix}\langle Q_k(t)\rangle \\ \langle P_k(t)\rangle\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_k(t) \\ p_k(t)\end{bmatrix} = R_k(t), \tag{3.36}$$

evidenciando que o vetor que define a posição do centróide quântico no espaço de fase é igual ao vetor clássico. Para as variâncias:

$$\left\langle \Delta Q_k^2(t)\right\rangle = \left\langle \Delta P_k^2(t)\right\rangle = \hbar, \tag{3.37}$$

resultado que confirma o fato de que os pacotes evoluem coerentemente, sempre com a mesma largura.

Entropia Quântica

Para os estados coerentes, a entropia é sempre nula pois a evolução dos pacotes se faz coerentemente e os estados são sempre puros, como já mostramos. Por outro lado, o mesmo não ocorre com os estados de número. Neste caso, desenvolvendo a expressão (3.28), podemos calcular $\widehat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ e em seguida o operador densidade reduzido $\widehat{\rho}_1(t) = Tr_2[\widehat{\rho}(t)]$, mostrando que este último é diagonal na base dos estados de número. Desta forma, $\widehat{\rho}_1(t)$ fica diretamente escrito em termos de seus autovalores (λ_l) e autovetores (os próprios estados de número) na seguinte forma

$$\rho_k(t) = \sum_{l=0}^{n_1+n_2} \lambda_l(t)|l\rangle\langle l|, \tag{3.38}$$

$$\lambda_l(t) = \sum_{m,m'=0}^{n_2} c_{m+n_1-l,m}(t)c^*_{m'+n_1-l,m'}(t), \tag{3.39}$$

$$\begin{aligned} c_{i,m}(t) &= \binom{n_1}{i}\binom{n_2}{m}\sqrt{\frac{(n_1-i+m)!(n_2+i-m)!}{n_1!n_2!}} \\ &\quad\times(\cos\lambda t)^{n_1+n_2-(i+m)}(-\imath\,\mathrm{sen}\,\lambda t)^{i+m}, \end{aligned} \tag{3.40}$$

em que a condição do traço, $\sum_{l=0}^{n_1+n_2}\lambda_l(t) = 1$, deve ser sempre satisfeita. Agora, as entropias linear e de von Neumann de cada oscilador, podem ser escritas simplesmente como

$$\delta_k(t) = 1 - \sum_{l=0}^{n_1+n_2}\lambda_l(t)^2 \qquad \text{e} \qquad S_k(t) = -\sum_{l=0}^{n_1+n_2}\lambda_l(t)\ln[\lambda_l(t)]. \tag{3.41}$$

Na figura 3.5, na qual mostramos o comportamento geral da entropia linear em relação aos números de fótons de cada espaço, fica evidente uma crescente estrutura de oscilações à medida que o número total de fótons cresce. Conforme as equações acima, o número de estados acessíveis do sistema aumenta com o número total de fótons, o que faz com que o

sistema tenha a possibilidade de transitar por uma quantidade cada vez maior de estados de mistura nos instantes de máximo emaranhamento $\lambda t_m = (m+\frac{1}{2})\frac{\pi}{2}$, com $m \in \mathbb{N}$. Entretanto, o sistema sempre volta a ficar puro em $\lambda t_j = j\frac{\pi}{2}$, com $j \in \mathbb{N}$. Verifica-se também que a entropia de Von Neumann traz informações qualitativamente semelhantes às da entropia linear, apesar de apresentar amplitudes sempre maiores, como apontamos anteriormente.

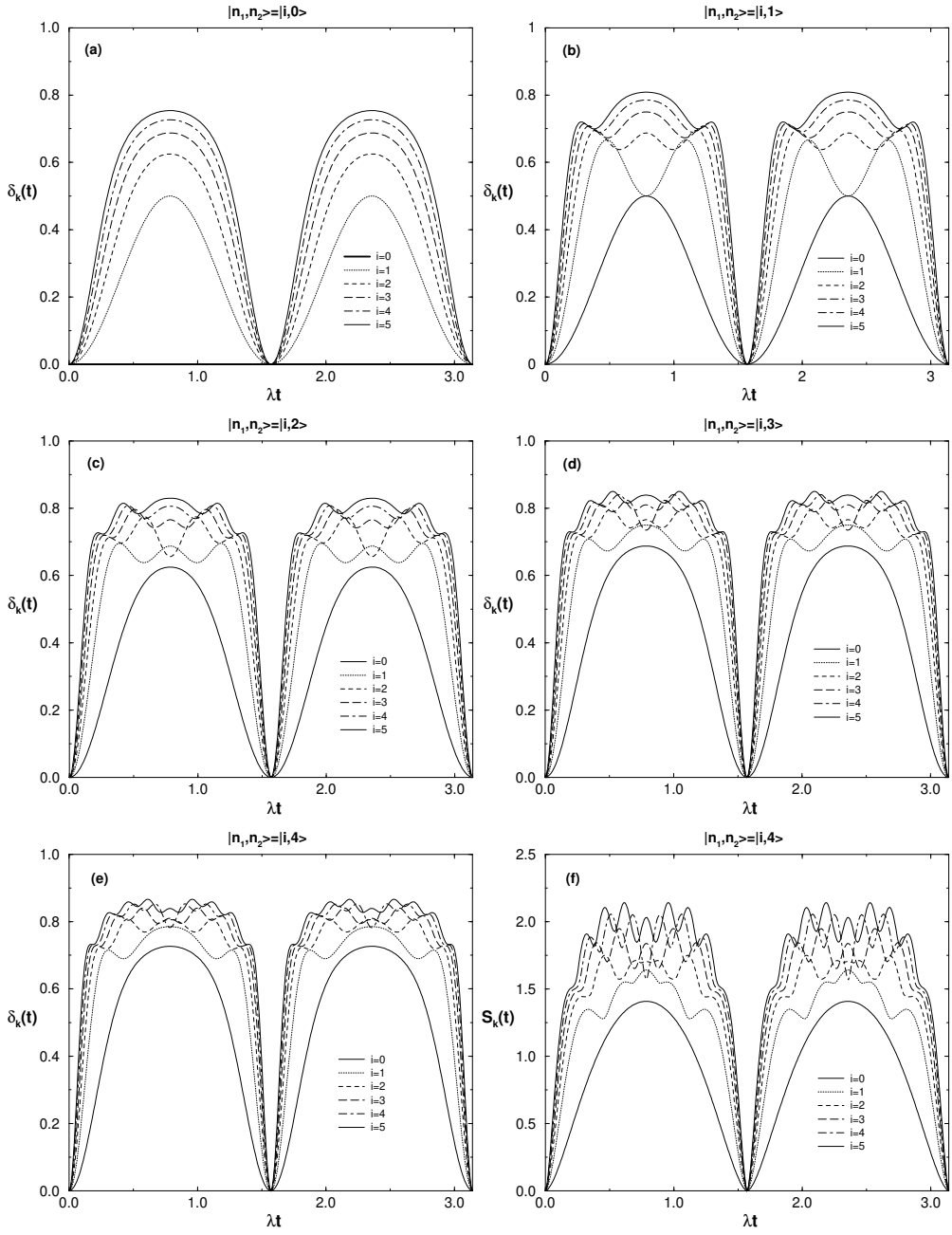

Figura 3.5: Entropia linear quântica (a-e) e entropia de Von Neumann (f) para estados iniciais do tipo $|n_1, n_2\rangle$ e diversos valores de n_1 e n_2 em função do tempo adimensional λt. Note-se o comportamento particular nos casos em que $n_1 = n_2$ em $\lambda t_m = (m + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}$, com $m \in \mathbb{N}$.

3.2.2 Solução Estatística

A solução estatística do problema é obtida através do formalismo Liouvilliano clássico. Iniciamos com o cálculo do operador Liouvilliano oriundo da Hamiltoniana (3.20):

$$\mathcal{L} = \underbrace{\omega_1 \mathcal{L}_0(q_1,p_1) + \omega_2 \mathcal{L}_0(q_2,p_2)}_{\mathcal{L}_{livre}} + \underbrace{\lambda\Big[\mathcal{L}_0(q_1,p_2) + \mathcal{L}_0(q_2,p_1)\Big]}_{\mathcal{L}_{int}}. \tag{3.42}$$

Note-se que o operador Liouvilliano do sistema é formado somente por operadores do tipo momento angular, sendo que os termos de interação produzem operadores que "misturam" os espaços. É interessante agora calcularmos o comutador entre o operador da parte livre e o da interação:

$$[\mathcal{L}_{livre}, \mathcal{L}_{int}] = \lambda(\omega_1 - \omega_2)\Big(q_2\partial_{q_1} - q_1\partial_{q_2} + p_2\partial_{p_1} - p_1\partial_{p_2}\Big), \tag{3.43}$$

que mostra que tais operadores comutam na ressonância, condição que usamos no cálculo quântico e que usaremos daqui por diante. Assim, dado que o operador Liouvilliano do sistema é composto somente por operadores do tipo $\mathcal{L}_0$ e visto que a parte livre comuta com a interação, obtemos de forma imediata as equações de movimento do sistema:

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} q_{1,2}(t) \\ p_{1,2}(t) \end{bmatrix} &= e^{-\mathcal{L}_{int}t} e^{-\mathcal{L}_{livre}t} \begin{bmatrix} q_{1,2} \\ p_{1,2} \end{bmatrix} \\
&= e^{-\mathcal{L}_{int}t} \begin{bmatrix} q_{1,2}\cos\omega t + p_{1,2}\,\mathrm{sen}\,\omega t \\ p_{1,2}\cos\omega t - q_{1,2}\,\mathrm{sen}\,\omega t \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \big(q_{1,2}\cos\lambda t + p_{2,1}\,\mathrm{sen}\,\lambda t\big)\cos\omega t + \big(p_{1,2}\cos\lambda t - q_{2,1}\,\mathrm{sen}\,\lambda t\big)\,\mathrm{sen}\,\omega t \\ \big(p_{1,2}\cos\lambda t - q_{2,1}\,\mathrm{sen}\,\lambda t\big)\cos\omega t + \big(q_{1,2}\cos\lambda t + p_{2,1}\,\mathrm{sen}\,\lambda t\big)\,\mathrm{sen}\,\omega t \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{3.44}$$

resultado idêntico àquele obtido no cálculo da evolução quântica para os estados coerentes (3.35). Com este resultado, todo o formalismo estatístico pode ser desenvolvido em qualquer instante, bastando para isso que definamos as distribuições iniciais. Como já discutimos no capítulo 2, as distribuições iniciais para estados coerentes são funções Gaussianas [vide eq.(2.29)] e para os estados de número, são funções Poissonianas [vide eq.(2.30)]. Assim, as distribuições clássicas iniciais ficam escritas nas formas

$$\rho_{ec}(\vec{q},\vec{p}) = \prod_{k=1}^{2}\Big[\mathcal{G}(q_k - q_{k0})\mathcal{G}(p_k - p_{k0})\Big], \tag{3.45}$$

$$\rho_{en}(\vec{q},\vec{p}) = \prod_{k=1}^{2}\Big[\mathcal{P}(q_k)\mathcal{P}(p_k)\Big], \tag{3.46}$$

$$\rho_{cn}(\vec{q},\vec{p},0) = \mathcal{G}(q_1 - q_{10})\mathcal{G}(p_1 - p_{10})\mathcal{P}^1(q_2,p_2), \tag{3.47}$$

nas quais os índices *ec*, *en* e *cn* indicam que as distribuições se referem aos estados coerentes, aos estados de número e a estados do tipo coerente⊗número, respectivamente.

3.2.3 Comparação entre as Entropias

Entropias de Estados Gaussianos

Vamos agora ao cálculo das entropias. O primeiro passo é o cálculo das distribuições no instante t, o qual é feito através da receita discutida no capítulo 2: $\rho(\vec{q},\vec{p},t) = \rho_{ec}(\vec{q}(-t),\vec{p}(-t))$. Depois de alguma álgebra, obtém-se o seguinte resultado para a distribuição clássica:

$$\rho_{ec}(R,t) = \frac{e^{-\frac{[R-K(t)R_0]^T[R-K(t)R_0]}{2\hbar}}}{(2\pi\hbar)^2}, \tag{3.48}$$

com

$$K(t) = \begin{bmatrix} M[\omega t]\cos\lambda t & M[\frac{\pi}{2}]M[\omega t]\,\mathrm{sen}\,\lambda t \\ \\ M[\frac{\pi}{2}]M[\omega t]\,\mathrm{sen}\,\lambda t & M[\omega t]\cos\lambda t \end{bmatrix}, \tag{3.49}$$

em que M são as matrizes bidimensionais de rotação definidas no capítulo 2, $R^T = (q_1, p_1, q_2, p_2)$ e $R_0^T = (q_{10}, p_{10}, q_{20}, p_{20})$, sendo que T denota a operação de transposição matricial. A equação (3.48) é interessante porque mostra que a ditribuição global tem formato Gaussiano em qualquer instante. De fato, neste caso, a condição de normalização para a entropia no instante $t = 0$, implica que o sistema só será "puro" se o estado global for Gaussiano, como ocorre.

O próximo passo é obter a distribuição reduzida através do traço nas variáveis de um dos osciladores, digamos o do oscilador 2. Como resultado, obtemos

$$\rho_{1ec}(R_1,t) = \frac{e^{-\frac{[R_1-C(t)]^T[R_1-C(t)]}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}, \tag{3.50}$$

$$C(t) = M[\omega t]R_{10}\cos\lambda t + M[\tfrac{\pi}{2}]M[\omega t]R_{20}\,\mathrm{sen}\,\lambda t, \tag{3.51}$$

sendo $R_1^T = (q_1, p_1)$ e $R_{k0}^T = (q_{k0}, p_{k0})$. Uma equação completamente análoga pode ser obtida para o oscilador 2. Note-se que a distribuição reduzida também evolui coerentemente, isto é, preserva o formato Gaussiano. Novamente, fica obedecida a condição de pureza do estado inicial, isto é, o estado evolui com a mesma forma da distribuição inicial.

Em seguida, toma-se o quadrado da distribuição (3.50) e realizam-se integrais Gaussianas para mostrar que de fato $\delta_k^{cl}(t) = 0$, resultado este idêntico ao do processo quântico.

Entropias de Estados Não-Gaussianos

Vamos agora ao caso mais interessante: o cálculo das entropias para os estados de número. O cálculo geral analítico para n_1 e n_2 quaisquer é bastante complicado pois envolve integrais de funções Poissonianas de altas ordens, e por isso analisaremos apenas os casos de estados de número de poucos fótons. O estudo será feito para três casos simples: (a) $|\psi(0)\rangle = |0,1\rangle$, (b) $|\psi(0)\rangle = |1,1\rangle$ e (c) $|\psi(0)\rangle = |0,2\rangle$. O caso $|\psi(0)\rangle = |0,0\rangle$ corresponde essencialmente ao produto de dois estados coerentes, os quais, já sabemos, não emaranham na RWA.

Antes de prosseguirmos com as comparações, vamos mostrar um resultado que pode nos guiar na direção do cálculo das entropias e nos auxiliar na interpretação dos resultados. Trata-se da evolução temporal de uma distribuição da forma (3.47) para o caso $|\psi(0)\rangle = |\alpha_0, 1\rangle$,

sendo $\alpha_0 = \frac{q_0+\imath p_0}{\sqrt{2\hbar}}$. Note-se que se $\alpha_0 = 0$, estaremos simulando os casos com condição inicial (a). Através do procedimento usual, calculamos as distribuições reduzidas de cada espaço e as escrevemos aqui utilizando a notação do caso anterior:

$$\begin{aligned} \bullet \qquad \rho_{1cn}(R_1,t) &= A_1(t)\frac{e^{-\frac{[R_1-Y(t)]^T[R_1-Y(t)]}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}, \\ A_1(t) &= \frac{\left[R_{10}^T R_{10}\,\mathrm{sen}^{\,2}\lambda t+2\hbar\right]\cos^2\lambda t+\left[R_1^T R_1+2R_1^T M[\pi]Y(t)\right]\mathrm{sen}^{\,2}\lambda t}{2\hbar}, \end{aligned} \tag{3.52}$$

com $Y(t) = \cos\lambda t M[\omega t]R_{10}$, e

$$\begin{aligned} \bullet \qquad \rho_{2cn}(R_2,t) &= A_2(t)\frac{e^{-\frac{[R_2-X(t)]^T[R_2-X(t)]}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}, \\ A_2(t) &= \frac{\left[R_2^T R_2-2X^T(t)R_2\right]\cos^2\lambda t+\left[R_{10}^T R_{10}\cos^2\lambda t+2\hbar\right]\mathrm{sen}^{\,2}\lambda t}{2\hbar}, \end{aligned} \tag{3.53}$$

com $X(t) = \mathrm{sen}\,\lambda t M[\frac{\pi}{2}]M[\omega t]R_{10}$. De posse dessas distribuições, procede-se ao cálculo das entropias lineares de cada subsistema através do procedimento já descrito. Abaixo, apresentamos diretamente os resultados obtidos nos formalismos quântico e estatístico para as entropias lineares do k-ésimo subsistema:

- (a) $|\psi(0)\rangle = |0,1\rangle$:

$$\delta_k(t) = \frac{1}{2}\,\mathrm{sen}^{\,2}2\lambda t, \qquad \begin{aligned} \delta_1^{cl}(t) &= \tfrac{\mathrm{sen}^{\,2}\lambda t}{4}\left(3+\cos 2\lambda t\right), \\ \delta_2^{cl}(t) &= -\,\mathrm{sen}^{\,4}\lambda t. \end{aligned} \tag{3.54}$$

- (b) $|\psi(0)\rangle = |1,1\rangle$:

$$\delta_k(t) = \frac{\mathrm{sen}^{\,2}2\lambda t}{4}\left(5+3\cos 4\lambda t\right), \qquad \delta_k^{cl}(t) = \frac{\mathrm{sen}^{\,2}2\lambda t}{32}\left(5+3\cos 4\lambda t\right). \tag{3.55}$$

- (c) $|\psi(0)\rangle = |0,2\rangle$:

$$\delta_k(t) = \frac{\mathrm{sen}^{\,2}2\lambda t}{16}\left(13+3\cos 4\lambda t\right), \qquad \delta_k^{cl}(t) = \text{numérico}. \tag{3.56}$$

Para a entropia de Von Neumann, o cálculo estatístico foi feito sempre numericamente, enquanto o cálculo quântico é analítico e geral em n_1 e n_2 (3.41). Nos casos acima, o cálculo quântico produziu:

- (a) $|\psi(0)\rangle = |0,1\rangle$:

$$S_k(t) = -\cos^2\lambda t\ln\left(\cos^2\lambda t\right) - \mathrm{sen}^{\,2}\lambda t\ln\left(\mathrm{sin}^{\,2}\lambda t\right). \tag{3.57}$$

- (b) $|\psi(0)\rangle = |1,1\rangle$:

$$S_k(t) = -\cos^2 2\lambda t\ln\left(\cos^2 2\lambda t\right) - \mathrm{sen}^{\,2}2\lambda t\ln\left(\frac{\sin^2 2\lambda t}{2}\right). \tag{3.58}$$

- (c) $|\psi(0)\rangle = |0,2\rangle$:

$$S_k(t) = -\cos^4\lambda t \ln\left(\cos^4\lambda t\right) - \operatorname{sen}^4\lambda t \ln\left(\operatorname{sen}^4\lambda t\right) - \frac{\operatorname{sen}^2 2\lambda t}{2} \ln\left(\frac{\operatorname{sen}^2 2\lambda t}{2}\right). \quad (3.59)$$

Note-se que todas as entropias independem da condição inicial ou da largura do pacote, assim como havia ocorrido no caso da interação bilinear. No caso (a) das entropias lineares, isso significa ainda que teremos exatamente a mesma entropia para qualquer estado coerente que utilizarmos. Além disso, todas as entropias se anulam no caso não-interagente ($\lambda = 0$), como se espera. Nas figuras 3.6 e 3.7, nas quais mostramos graficamente esses resultados, ficam explícitas as diferenças entre as previsões de cada formalismo.

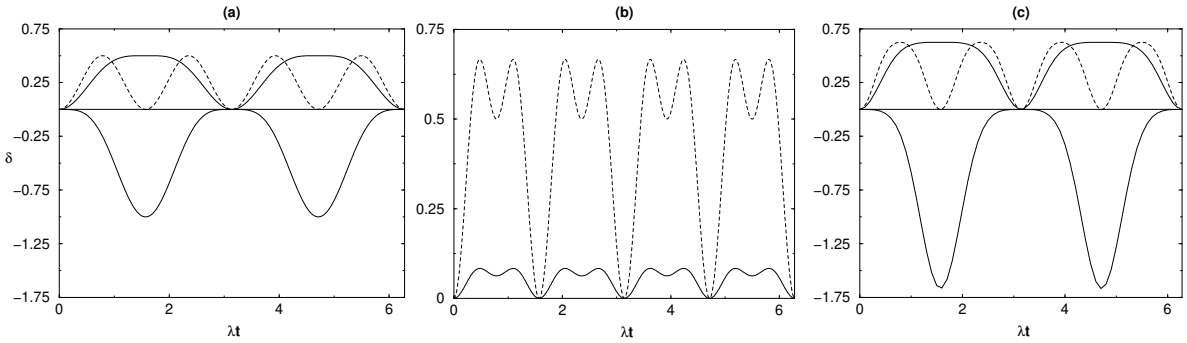

Figura 3.6: Entropias lineares quânticas (linha tracejada) e clássicas (linhas sólidas) para as condições iniciais descritas de (a) a (c). Classicamente, nos casos (a) e (c), as entropias de cada subespaço são diferentes ($\delta_1^{cl} \geq 0$ e $\delta_2^{cl} \leq 0$), o que não ocorre quanticamente. Por outro lado, no caso (b), as entropias de cada subespaço se igualam.

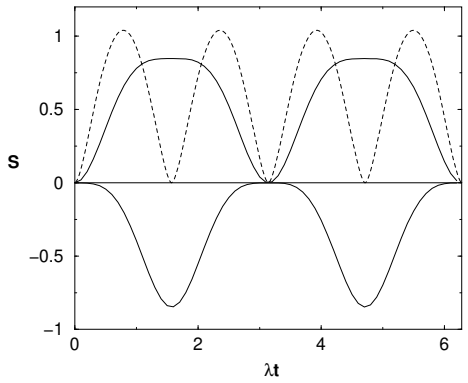

Figura 3.7: Entropias de Von Neumann quânticas (linha tracejada) e clássicas (linhas sólidas) para o caso $|\psi(0)\rangle = |0,2\rangle$. Não há informação qualitativa diferente dos resultados apresentados pelas entropias lineares na figura 3.6-(c).

Principalmente nos casos em que os espaços começam com estados de "natureza" diferente (um coerente e um de número), isto é, com diferentes larguras no espaço de fase, é que as diferenças são mais contundentes: a entropia clássica dos subespaços são diferentes, uma delas negativa, e não se pode sequer prever a separação dos espaços em $\lambda t = \frac{\pi}{2}$. Apesar desse aparente fracasso do formalismo estatístico, uma análise mais cuidadosa da questão pode

nos levar a entender melhor o problema e a propor um procedimento mais adequado para a comparação.

De fato, todos os "problemas" apontados nos resultados estatístico são oriundos da normalização da entropia linear, a qual foi implementada para que inicialmente a entropia fosse nula, a exemplo do que ocorre quanticamente. Lembremo-nos da fórmula da entropia clássica:

$$\delta_k(t) = 1 - \frac{\int dq_k dp_k \rho_k^2(t)}{\int dq_k dp_k \rho_k^2(0)}. \tag{3.60}$$

Suponhamos então que o subespaço 1 comece com um estado de número e que seja levado, pela evolução do sistema, a um estado coerente. Neste caso, o numerador da equação acima ficará certamente menor que o denominador, e a fração será menor que a unidade, de modo que a entropia crescerá, como de fato se espera. Por outro lado, suponhamos que o subespaço 1 comece agora com um estado coerente e que seja levado para um estado de número num instante t. Neste caso, como a normalização inicial era a de um estado coerente, a fração na equação acima será maior que a unidade e teremos uma entropia negativa. Esse mesmo argumento, nos ajuda a entender porque as entropias dos subespaços podem tomar valores diferentes, o que não ocorre quanticamente.

Essa argumentação pode ser corroborada analisando-se as densidades reduzidas evoluídas nos casos de estados iniciais com normalizações diferentes. Vejamos por exemplo, os operadores quânticos do caso $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$:

$$\begin{aligned} &\bullet \quad \widehat{\rho}_1(t) = \cos^2\lambda t|0\rangle\langle 0| + \operatorname{sen}^2\lambda t|1\rangle\langle 1|, \\ &\bullet \quad \widehat{\rho}_2(t) = \operatorname{sen}^2\lambda t|0\rangle\langle 0| + \cos^2\lambda t|1\rangle\langle 1|. \end{aligned} \tag{3.61}$$

Calculemos agora a função Q com a normalização adequada para a comparação com a distribuição clássica:

$$\begin{aligned} Q_1(q_1,p_1,t) &= \frac{\langle\alpha_1|\widehat{\rho}_1(t)|\alpha_1\rangle}{2\pi\hbar} = \cos^2\lambda t\left[\frac{e^{-\frac{p_1^2+q_1^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}\right] + \operatorname{sen}^2\lambda t\left[\left(\frac{p_1^2+q_1^2}{2\hbar}\right)\frac{e^{-\frac{p_1^2+q_1^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}\right], \\ Q_2(q_2,p_2,t) &= \frac{\langle\alpha_2|\widehat{\rho}_2(t)|\alpha_2\rangle}{2\pi\hbar} = \operatorname{sen}^2\lambda t\left[\frac{e^{-\frac{p_2^2+q_2^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}\right] + \cos^2\lambda t\left[\left(\frac{p_2^2+q_2^2}{2\hbar}\right)\frac{e^{-\frac{p_2^2+q_2^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}\right]. \end{aligned} \tag{3.62}$$

A partir de (3.52) e (3.53), com $\alpha_0 = 0$, calculam-se as distribuições clássicas:

$$\begin{aligned} \rho_1^{cl}(q_1,p_1,t) &= \cos^2\lambda t\left[\frac{e^{-\frac{p_1^2+q_1^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}\right] + \operatorname{sen}^2\lambda t\left[\left(\frac{p_1^2+q_1^2}{2\hbar}\right)\frac{e^{-\frac{p_1^2+q_1^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}\right], \\ \rho_2^{cl}(q_2,p_2,t) &= \operatorname{sen}^2\lambda t\left[\frac{e^{-\frac{p_2^2+q_2^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}\right] + \cos^2\lambda t\left[\left(\frac{p_2^2+q_2^2}{2\hbar}\right)\frac{e^{-\frac{p_2^2+q_2^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}\right]. \end{aligned} \tag{3.63}$$

Note-se que as distribuições no espaço de fase (3.62) e (3.63) são idênticas, e reproduzem exatamente aquilo que dissemos na argumentação exposta acima, isto é, de fato, os subsistemas transitam durante a evolução de um estado de número para um estado coerente e vice-versa. Dizendo ainda de outro modo, o sistema realiza transições entre estados puros pertencentes

à base dos estados de número, no caso, o estado de vácuo e o estado de um fóton. Então, o subsistema 2, que começa com um estado "maior" (largura maior no espaço de fase, por exemplo), e que depois, em $\lambda t = \frac{\pi}{2}$, se transforma em um estado coerente, terá entropia negativa, como temos obtido! É como se a normalização fizesse a "calibração" de uma unidade de medida de volume do sistema; assim o tempo todo, se compara o volume do pacote evoluído com a medida inicial. Então, se a distribuição vai se "localizando" em relação ao instante inicial, é como se o sistema ganhasse informação, isto é, perdesse entropia! Na figura 3.8, mostramos as distribuições clássicas (iguais às quânticas) no espaço de fase para o caso discutido acima. Nesta figura, observa-se claramente as diferenças de "tamanho" entre as Gaussianas e Poissonianas que identificam os estados coerentes e de número respectivamente.

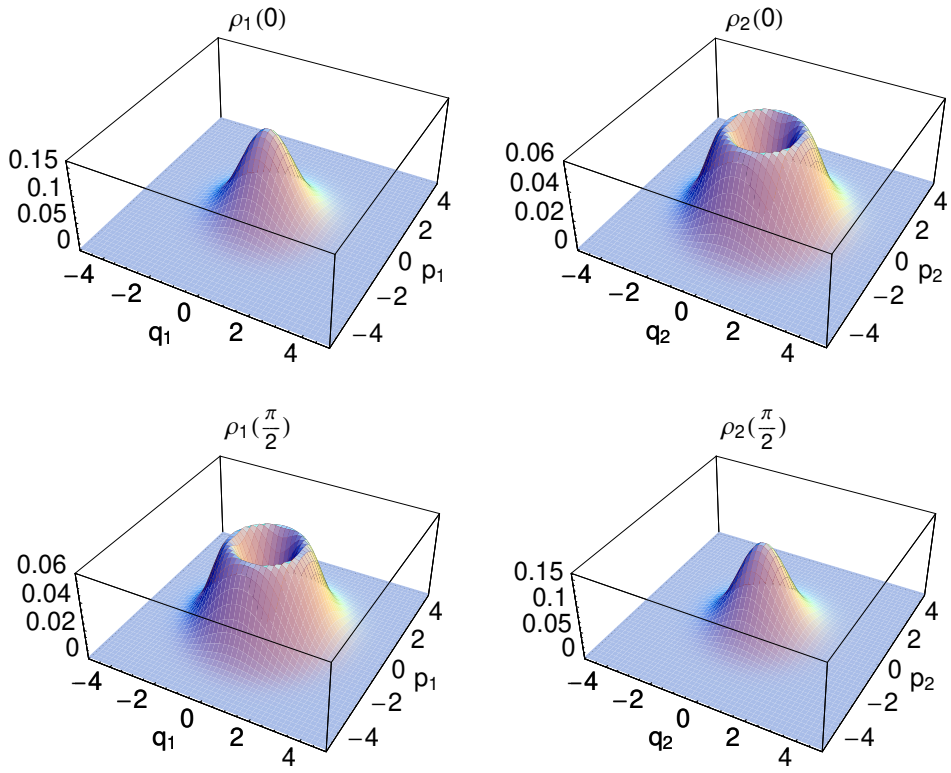

Figura 3.8: Distribuições clássicas para o caso $|\psi(0)\rangle = |0,1\rangle$ em $\lambda t = 0$ e no primeiro instante de recoerência quântica $\lambda t = \frac{\pi}{2}$.

Ainda há um ponto importante a ser comentado a respeito dos resultados expostos nas equações (3.61)-(3.63), o qual se refere justamente a uma das grandes diferenças entre os formalismos quântico e estatístico. Vejamos o que ocorre quando tomamos o quadrado da distribuição clássica 1 e comparamos com a projeção em estados coerentes do quadrado do

operador densidade reduzido do espaço 1:

$$\begin{aligned}
\frac{\langle\alpha_1|\widehat{\rho}_1^2(t)|\alpha_1\rangle}{2\pi\hbar} &= \cos^4\lambda t\left[\frac{e^{-\frac{p_1^2+q_1^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}\right] + \operatorname{sen}^4\lambda t\left[\left(\frac{p_1^2+q_1^2}{\hbar}\right)^2\frac{e^{-\frac{p_1^2+q_1^2}{\hbar}}}{\pi\hbar}\right], \qquad (3.64)\\
\left(\rho_1^{cl}(t)\right)^2 &= \frac{\cos^4\lambda t}{\boxed{4\pi\hbar}}\left[\frac{e^{-\frac{p_1^2+q_1^2}{\hbar}}}{\pi\hbar}\right] + \boxed{\frac{1}{2}}\frac{\operatorname{sen}^4\lambda t}{\boxed{4\pi\hbar}}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{p_1^2+q_1^2}{\hbar}\right)^2\frac{e^{-\frac{p_1^2+q_1^2}{\hbar}}}{\pi\hbar}\right]\\
&+ \boxed{\frac{\operatorname{sen}^2\lambda t\cos^2\lambda t}{4\pi\hbar}\left[\left(\frac{p_1^2+q_1^2}{\hbar}\right)\frac{e^{-\frac{p_1^2+q_1^2}{\hbar}}}{\pi\hbar}\right]},
\end{aligned}$$

na qual foram "encaixotados" os termos clássicos que não aparecem na fórmula quântica. Além do último termo clássico, que se refere ao fato de não existirem estados clássicos ortogonais como "$\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$", há ainda o fator $\frac{1}{2}$ multiplicando o segundo termo do lado direito do sinal de igual. Este fator é proveniente do traço parcial sobre estados que não contém a normalização que lhes é adequada, o que é uma manifestação matemática da questão da normalização de estados de "naturezas diferentes", que já mencionamos. Os denominadores "$4\pi\hbar$" serão cancelados pela normalização da entropia clássica e portanto não têm qualquer influência sobre o resultado, apesar de justificarem a necessidade de tal normalização.

Ao final dos cálculos, depois das integrais mas ainda em uma versão não simplicada, obtém-se então as seguintes entropias:

$$\begin{aligned}
\delta_1(t) &= 1 - \left(\cos^4\lambda t + \operatorname{sen}^4\lambda t\right),\\
\delta_1^{cl}(t) &= 1 - \left(\cos^4\lambda t + \boxed{\frac{1}{2}}\operatorname{sen}^4\lambda t + \boxed{\operatorname{sen}^2\lambda t\cos^2\lambda t}\right),
\end{aligned} \qquad (3.65)$$

nas quais podemos identificar claramente as assinaturas do formalismo estatítico, que foi formulado em termos de funções clássicas não-ortogonais, cada qual com sua condição peculiar de normalização. Fica aí justificado também o fato de as entropias clássicas terem apresentado amplitudes menores que as de seu correspondente quântico em cálculos realizados para os sistemas com interações bilineares.

Grau de Emaranhamento $I(t)$

É importante notarmos que em $\lambda t = \frac{\pi}{2}$, para o caso de estados iniciais com normalizações diferentes, não foi possível prever a condição de separabilidade dos sistemas. De fato, quando o sistema quântico volta a ficar puro (apesar de não voltar ao estado inicial), o sistema clássico não consegue reconhecer o novo estado como sendo "puro", pois foi calibrado com uma condição de normalização diferente, como argumentamos acima.

Inspirados na proposta de uma medida de entropia para sistemas que começam sua evolução a partir de estados misturados [75], propomos a seguinte medida quântica do *grau de emaranhamento* entre dois subsistemas descritos por uma matriz densidade global $\widehat{\rho}(t)$:

$$I(t) \equiv Tr\left[\widehat{\rho}^2(t) - \widehat{\rho}_1^2(t)\otimes\widehat{\rho}_2^2(t)\right], \qquad (3.66)$$

com $\widehat{\rho}_k(t) = Tr\,[\widehat{\rho}(t)]$. Então, lembrando que $\delta_k = 1 - Tr_k[{\rho_k}^2]$, podemos reescrever $I(t)$ em termos das entropias lineares do sistema:

$$I(t) = \delta_1(t) + \delta_2(t) - \delta_1(t)\delta_2(t) - \delta(t), \tag{3.67}$$

sendo $\delta(t)$ a entropia linear do sistema global, a qual em nossos casos será sempre nula, uma vez que o sistema global será sempre puro. Agora, o grau de emaranhamento para distribuições clássicas pode ser imediatamente definido, bastando que usemos a definição de entropia estatística clássica que temos proposto.

Apesar de não trazer muita informação intuitiva neste último formato, o grau de emaranhamento é manifestamente mais "democrático", uma vez que traz consigo a informação contida nas entropias de ambos os espaços. Além disso, no caso em que as entropias dos subespaços forem iguais, sejam elas quânticas ou clássicas, teremos

$$I(t) = 2\delta_k - {\delta_k}^2, \tag{3.68}$$

mostrando que a entropia linear é suficiente para exibir a dinâmica de emaranhamento do sistema, sendo portanto, um caso particular da medida I.

Utilizando essa nova medida, teremos para o caso $|\psi(0)\rangle = |0,1\rangle$, por exemplo,

$$I^{cl}(t) = \frac{\text{sen}^{\,2}2\lambda t}{64}\left(15 + \cos 4\lambda t\right), \tag{3.69}$$

$$I(t) = \frac{\text{sen}^{\,2}2\lambda t}{8}\left(7 + \cos 4\lambda t\right), \tag{3.70}$$

que mostra claramente que, apesar das diferenças em amplitude, temos agora as mesmas previsões para a separabilidade do sistema. De fato, na figura 3.9, vemos claramente a igualdade qualitativa entre as previsões dos formalismos quântico e estatístico.

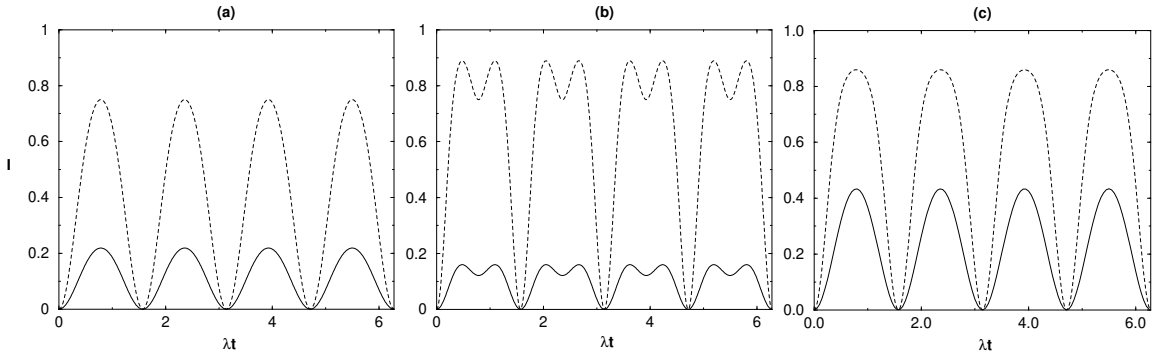

Figura 3.9: Graus de emaranhamento quânticos (linhas tracejadas) e clássicos (linhas sólidas) para as condições iniciais descritas de (a) a (c) (equivalente à figura 3.6). Agora, as previsões são qualitativamente iguais.

Ainda falta um ponto a ser investigado: o que acontece se utilizarmos como estado inicial clássico o produto das probabilidades marginais? Calculemos como exemplo o caso mais simples $|\psi(0)\rangle = |0,1\rangle$. Neste caso, os polinômios de Hermite tomam uma forma bastante

simples de modo que podemos escrever

$$\begin{aligned}\rho(0) &= |\langle q_1 q_2|\psi(0)\rangle|^2 \, |\langle p_1 p_2|\psi(0)\rangle|^2 \\ &= |\langle q_1|0\rangle|^2 \, |\langle p_1|0\rangle|^2 \, |\langle q_2|1\rangle|^2 \, |\langle p_2|1\rangle|^2 \\ &= \left(\frac{e^{-\frac{q_1^2}{\hbar}}}{\sqrt{\pi\hbar}}\right)\left(\frac{e^{-\frac{p_1^2}{\hbar}}}{\sqrt{\pi\hbar}}\right)\left(\sqrt{\frac{4}{\pi\hbar^3}}\; q_2 e^{-\frac{q_2^2}{\hbar}}\right)\left(\sqrt{\frac{4}{\pi\hbar^3}}\; p_2 e^{-\frac{p_2^2}{\hbar}}\right). \end{aligned} \tag{3.71}$$

Na figura 3.10, mostramos o novo comportamento clássico oferecido por este tipo de distribuição inicial. De fato, a única mudança significativa ocorre em relação à amplitude, de modo que o novo resultado fica consideravelmente mais próximo do quântico.

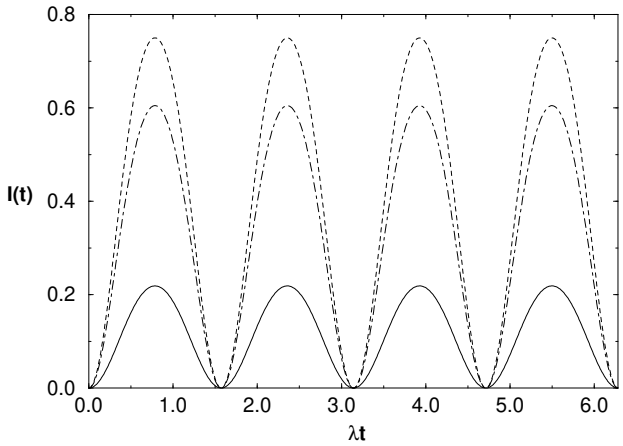

Figura 3.10: Grau de emaranhamento quântico (linha tracejada), e clássicos com distribuições iniciais baseadas na função Q (linha sólida) e nas probabilidades marginais (linha tipo traço-ponto) para o caso $|\psi(0)\rangle = |0,1\rangle$. O comportamento qualitativo é sempre o mesmo, mas as distribuições marginais se aproximam mais do resultado quântico em amplitude.

Uma das propostas iniciais para o estudo do formalismo estatístico era justamente verificar se ele seria capaz de reproduzir os resultados do formalismo quântico. Neste sentido, podemos dizer que no caso das interações bilineares, o formalismo estatístico teve grande sucesso como "substituto" da mecânica quântica, pelo menos do ponto de vista da medida do emaranhamento e do cálculo de valores esperados. De fato, a semelhança qualitativa entre os resultados aconteceu mesmo no caso de estados iniciais não-Gaussianos. Entretanto, ainda é muito cedo para levarmos adiante esta concepção de uma mecânica alternativa para explicar o emaranhamento quântico. No próximo capítulo, faremos o estudo de sistemas não-lineares, a partir do qual poderemos tomar uma postura mais definitiva sobre a entropia linear clássica e, em geral, sobre o formalismo estatístico.

Parte dos resultados descritos neste capítulo foram organizados num trabalho [71] em colaboração com os professores S. Vitiello, M. A. M. de Aguiar e K. Furuya, todos do DFMC - IFGW/UNICAMP.

Capítulo 4

Sistemas Integráveis Não-Lineares

Neste capítulo, continuaremos com a análise e comparação entre o formalismo quântico e estatístico, porém agora no campo dos sistemas não-lineares. Estudaremos essencialmente dois novos sistemas, que trazem alguns novos ingredientes quânticos: o fenômeno de *colapso e ressurgimento* e o *fenômeno da auto-interferência*. Quais serão os resultados oferecidos pelo formalismo estatístico nesses casos em que ocorrem fenômenos sem análogo clássico?

4.1 Oscilador Quártico 1-D

Seja o sistema Hamiltoniano

$$\mathcal{H}(q,p) = \omega\mathcal{H}_0(q,p) + V(q,p)\,, \tag{4.1}$$

sendo o potencial V adequadamente simétrico em q e p, isto é,

$$V(q,p) = V(p,q) = f(\lambda\,\mathcal{H}_0), \tag{4.2}$$

em que $\mathcal{H}_0$ é a Hamiltoniana quadrática do oscilador harmônico expressa por $\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2}\left(p^2+q^2\right)$. Nesse caso, o operador Liouvilliano clássico será dado por

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(q,p) &= \omega\Big(q\partial_p - p\partial_q\Big) + \lambda\, f'(\lambda\mathcal{H}_0)\Big(q\partial_p - p\partial_q\Big)\\ &= \Big(\omega + \lambda\, f'\Big)\mathcal{L}_0(q,p),\end{aligned} \tag{4.3}$$

em que f' denota a primeira derivada de f em relação a $\lambda\,\mathcal{H}_0$. Então, de acordo com os resultados previamente estabelecidos para o oscilador harmônico [vide eq. (2.44)], podemos integrar imediatamente as equações de movimento:

$$\begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = e^{-\mathcal{L}(q,p)t}\begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} = M(\tau)\begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}, \tag{4.4}$$

$$M(\tau) \equiv \begin{bmatrix} \cos\tau & \operatorname{sen}\tau \\ -\operatorname{sen}\tau & \cos\tau \end{bmatrix}, \qquad \tau = \tau(\omega,\lambda,q,p,t) = \big(\omega + \lambda\, f'\big)t.$$

Como consequência, obtém-se a evolução temporal da distribuição clássica inicial:

$$\begin{gathered}\rho(q,p,t) = e^{\mathcal{L}(q,p)t}\rho_0(q,p,0) = \rho_0(q\,\cos\tau - p\,\operatorname{sen}\tau, p\,\cos\tau + q\,\operatorname{sen}\tau, 0), \\ \tau = \big(w + \lambda\, f'\big)t.\end{gathered} \tag{4.5}$$

Em particular, podemos resolver um problema semelhante ao do oscilador anarmônico de Milburn, cujas versões clássica e quântica foram estudadas em seu trabalho de 1986 [76]. Iniciamos com a definição da Hamiltoniana clássica:

$$\begin{gathered}\mathcal{H} = \omega\mathcal{H}_0 + g\mathcal{H}_0^2, \\ \mathcal{H}_0 = \tfrac{q^2+p^2}{2}.\end{gathered} \tag{4.6}$$

Façamos agora a quantização do sistema,

$$\begin{gathered}(q,p) \to (\widehat{Q},\widehat{P}), \\ \big[\widehat{Q},\widehat{P}\big] = \imath\hbar,\end{gathered} \tag{4.7}$$

seguida da transformação para operadores bosônicos:

$$\widehat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\widehat{a} + \widehat{a}^\dagger) \qquad \text{e} \qquad \widehat{P} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}\frac{(\widehat{a} - \widehat{a}^\dagger)}{\imath}. \tag{4.8}$$

Finalmente temos o Hamiltoniano quântico escrito na forma que nos será adequada:

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}\right) + \hbar^2 g\left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}\right)^2, \tag{4.9}$$

na qual foram desprezados termos constantes que não contribuem para a dinâmica. Este é essencialmente o Hamiltoniano utilizado por Milburn para o estudo da dinâmica do oscilador anarmônico [76], com uma diferença importante na constante de interação. Aqui estamos construindo nossas versões clássica e quântica da dinâmica tendo em mente a seguinte prescrição para o limite clássico de sistemas quantizados a partir do próprio formalismo clássico:

$$\mathcal{H} = \lim_{\hbar\to 0}\langle\alpha|\widehat{H}|\alpha\rangle, \tag{4.10}$$

sendo que o processo oposto, o da quantização, foi definido acima. Então nossas constantes são todas definidas de forma a permitir que o ciclo se feche consistentemente (figura 4.1).

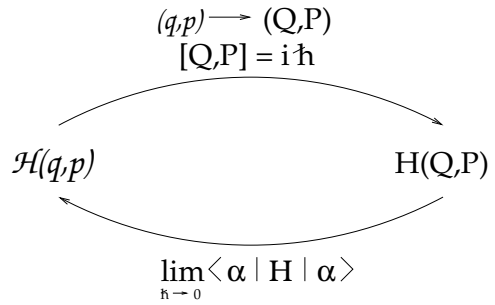

Figura 4.1: Esquema da definição do processo de quantização e de limite clássico.

Nossa intenção agora é obter as soluções analíticas das equações de movimento clássica e quântica, a fim de observarmos o regime semiclássico da mecânica quântica, obtendo alguma intuição sobre as correções quânticas sobre o movimento clássico e tentando definir o tempo de quebra de correspondência.

4.1.1 Solução Clássica

Em primeiro lugar trabalharemos com a dinâmica clássica, pois neste caso simples, a solução pode ser encontrada de forma imediata através das equações de Liouville. O cálculo se inicia pela determinação do operador Liouvilliano do sistema:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \{\mathcal{H}, .\} = (\partial_q \mathcal{H})\partial_p - (\partial_p \mathcal{H})\partial_q \\ &= \left[\omega t + gt(q^2+p^2)\right]\mathcal{L}_0(q,p), \end{aligned} \tag{4.11}$$

sendo $\mathcal{L}_0$ o operador Liouvilliano de momento angular que gera rotações no espaço de fase [definido em (2.38)]. Então a evolução de um ponto inicial (q_0, p_0) no espaço de fase é dada por

$$\underbrace{\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}}_{R(t)} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos\tau_c & \operatorname{sen}\tau_c \\ -\operatorname{sen}\tau_c & \cos\tau_c \end{pmatrix}}_{M[\tau_c]} \underbrace{\begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix}}_{R_0} \tag{4.12}$$

$$\tau_c = \omega t + g\Lambda t,$$

com $\Lambda = q_0^2 + p_0^2$. Então, lembrando que $M[x+y] = M[x]M[y] = M[y]M[x]$, reescrevemos a solução clássica de forma ainda mais compacta:

$$\blacktriangle \qquad R(t) = M[g\Lambda t]\, M[\omega t]\, R_0. \tag{4.13}$$

O sistema é unidimensional e evidentemente *integrável*, mas ainda assim é interessante observarmos a existência de mais uma constante de movimento utilizando a propriedade $M^T[x]M[x] = M[-x]M[x] = M[0] = \mathbf{1}$:

$$\begin{aligned} R^T(t)R(t) &= R_0^T\, M^T[\omega t]\, \underbrace{M^T[gt(q_0^2+p_0^2)]\, M[gt(q_0^2+p_0^2)]}_{\mathbf{1}}\, M[\omega t]\, R_0 \\ &= R_0^T\, \underbrace{M^T[\omega t]\, M[\omega t]}_{\mathbf{1}}\, R_0 \\ &= R_0^T R_0 = q_0^2 + p_0^2 = \Lambda. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Note-se que a constante Λ é proporcional à área do círculo de raio R_0 definido no espaço de fase clássico e, portanto, pode ser entendida como uma ação clássica característica desse sistema.

4.1.2 Solução Quântica

A grandeza quântica análoga ao vetor $R(t)$ clássico pode ser definida como

$$\langle \widehat{R}(t)\rangle_Q = \langle\psi(t)|\begin{pmatrix}\widehat{Q}\\ \widehat{P}\end{pmatrix}|\psi(t)\rangle = \langle\alpha_0|e^{\frac{\widehat{H}t}{\imath\hbar}}\begin{pmatrix}\widehat{Q}\\ \widehat{P}\end{pmatrix}e^{-\frac{\widehat{H}t}{\imath\hbar}}|\alpha_0\rangle, \tag{4.15}$$

em que usamos um estado inicial coerente definido em termos da condição inicial clássica $\alpha_0 = \frac{q_0+\imath p_0}{\sqrt{2\hbar}}$. Utilizando a transformação (4.8) e o Hamiltoniano diagonal (4.9), encontra-se facilmente a solução dinâmica do problema quântico:

$$|\psi(t)\rangle = \left[e^{-\imath(\frac{\omega}{2}+\frac{g\hbar}{4})t}\right]e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left[\alpha_0 e^{-\imath(\omega+2g\hbar)t}\right]^n}{\sqrt{n!}}e^{-\imath n^2 g\hbar t}|n\rangle, \tag{4.16}$$

$$\blacktriangle \qquad \langle \widehat{R}(t)\rangle_Q = A(t)\, M[\tau_Q]\, R_0,$$

$$\begin{cases} \tau_Q = (\omega+2\hbar g)t + \Lambda\dfrac{\operatorname{sen} 2\hbar g t}{2\hbar}, \\ \\ A(t) = e^{-\Lambda\frac{sen^2\hbar g t}{\hbar}}. \end{cases} \tag{4.17}$$

O limite clássico nesse caso é analítico, assintótico e imediato:

$$\lim_{\hbar\to 0}\tau_Q = \omega t + g\Lambda t = \tau_c,$$

$$\lim_{\hbar\to 0} A(t) = 1, \tag{4.18}$$

$$\therefore \lim_{\hbar\to 0}\langle\widehat{R}(t)\rangle_Q = M[g\Lambda t]M[\omega t]R_0 = R(t).$$

Regime Semiclássico

Podemos tentar ganhar alguma intuição sobre o regime semiclássico, ou seja, vamos tentar entender de forma mais clara como ocorrem as correções em $\hbar$ sobre o movimento clássico. Nesta direção, utilizamos as propriedades da matriz M e realizamos expansões em série de

Taylor da função *seno* que compõe τ_Q na equação (4.17):

$$\begin{aligned}
\langle\widehat{R}(t)\rangle_Q &= A(t)\,M\Big[\Lambda\frac{\operatorname{sen}2\hbar gt}{2\hbar}\Big]\,M[2\hbar gt]\,M[\omega t]\,R_0 \\
&= A(t)\,M\Big[\frac{\Lambda}{2\hbar}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{(2\hbar gt)^{2k+1}}{(2k+1)!}\Big]\,M[2hgt]\,M[\omega t]\,R_0 \\
&= A(t)\,\left(\prod_{k=0}^{\infty}M\Big[\frac{\Lambda}{2\hbar}\frac{(-1)^k(2\hbar gt)^{2k+1}}{(2k+1)!}\Big]\right)\,M[2hgt]\,M[\omega t]\,R_0 \\
&= A(t)\,\left(\prod_{k=0}^{\infty}M\Big[\frac{\Lambda}{2\hbar}\frac{(-1)^k(2\hbar gt)^{2k+1}}{(2k+1)!}\Big]\right)\,M[2hgt]\,\underbrace{M[g\Lambda t]\,M[\omega t]\,R_0}_{R(t)} \\
&= A(t)\,\left(\prod_{k=1}^{\infty}M\Big[\frac{\Lambda}{2\hbar}\frac{(-1)^k(2\hbar gt)^{2k+1}}{(2k+1)!}\Big]\right)\,M[2hgt]\,R(t) \\
&= A(t)\,\cdots M\Big[\underbrace{\frac{\Lambda}{2\hbar}\frac{(2\hbar gt)^5}{5!}}_{\tau_2}\Big]\,M\Big[\underbrace{-\frac{\Lambda}{2\hbar}\frac{(2\hbar gt)^3}{3!}}_{\tau_1}\Big]\,M[2hgt]\,R(t). \qquad (4.19)
\end{aligned}$$

Nesta expansão fica explícito um aspecto interessante: o movimento do centróide do pacote quântico é composto por um produto infinito de pequenas rotações (em ordens de $\hbar$) moduladas por $A(t)$ sobre o movimento clássico. Note-se que duas correções sucessivas são realizadas sempre em sentidos opostos, como um zigue-zague com amplitudes diferentes.

Tempos Característicos das Rotações

Uma vez que temos evidenciado as diversas correções da mecânica quântica ao movimento clássico, podemos também definir escalas de tempo em que cada correção seja desprezível em relação à precedente. Para tanto, definimos um *tempo característico de rotação* t_k do sistema como sendo o instante em que podemos desprezar a correção $M[\tau_{k+1}]$, ou seja,

$$\begin{aligned}
|\tau_{k+1}| &<< |\tau_k| \\
\Big|\frac{\Lambda}{2\hbar}\frac{(-1)^{k+1}(2\hbar gt)^{2k+3}}{(2k+3)!}\Big| &<< \Big|\frac{\Lambda}{2\hbar}\frac{(-1)^k(2\hbar gt)^{2k+1}}{(2k+1)!}\Big| \\
(2\hbar gt)^2 &<< \frac{(2k+3)!}{(2k+1)!} \\
t &<< \frac{1}{2g\hbar}\sqrt{(2k+3)(2k+2)}. \qquad (4.20)
\end{aligned}$$

E então definimos formalmente os *tempos característicos* como

$$t_k \equiv \frac{1}{g\hbar}\sqrt{k^2+\frac{5}{2}k+\frac{3}{2}} \qquad (4.21)$$

$$(k\in\mathbb{N}),$$

que dão uma estimativa da escala de tempo em que podemos truncar a aproximação semiclássica no termo k, desprezando ordens superiores para as rotações semiclássicas. Observe-se a dependência desses tempos com $\hbar$: no limite clássico, cada tempo diverge com $\hbar^{-1}$. Obviamente, existe ainda uma outra escala a ser discutida, aquela que está relacionada com o fator de modulação $A(t)$. Voltaremos a este ponto mais tarde, quando tratarmos do tempo de Ehrenfest.

4.1.3 Solução Estatística

Utilizando o formalismo estatístico definido nas seções anteriores, podemos calcular médias análogas às quânticas:

$$\begin{aligned}\langle R(t)\rangle_E &= \int_{-\infty}^{\infty} dq\,dp \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \rho(q,p,t) \\ &= A(t) \begin{pmatrix} \gamma_1 \cos\tau_E & \gamma_2 \operatorname{sen}\tau_E \\ -\gamma_2 \operatorname{sen}\tau_E & \gamma_1 \cos\tau_E \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix}}_{R_0}, \end{aligned} \tag{4.22}$$

com

$$\begin{cases} A(t) = \frac{e^{-\frac{\Lambda}{2\hbar}\frac{(2g\hbar t)^2}{1+(2g\hbar t)^2}}}{1+(2g\hbar t)^2}, \\ \gamma_1(t) = 1-(2g\hbar t)^2 - 4(g\hbar t)\ \mathrm{tg}\tau_E, \\ \gamma_2(t) = 1-(2g\hbar t)^2 - 4(g\hbar t)\ \cot\tau_E, \\ \tau_E = \tau_E(t) = \omega t + \frac{g\Lambda t}{1+(2g\hbar t)^2}, \\ \Lambda = q_0^2 + p_0^2. \end{cases} \tag{4.23}$$

Utilizando a notação das matrizes de rotação M, podemos reescrever essas equações num formato mais compacto:

▲ $$\langle R(t)\rangle_E = A(t)\Big\{[1-(2g\hbar t)^2] + 4g\hbar t M[\pi/2]\Big\} M[\tau_E] R_0,$$

$$\begin{cases} A(t) = \frac{e^{-\frac{\Lambda}{2\hbar}\frac{(2g\hbar t)^2}{1+(2g\hbar t)^2}}}{1+(2g\hbar t)^2}, \\ \tau_E = \omega t + \frac{g\Lambda t}{1+(2g\hbar t)^2}, \\ \Lambda = q_0^2 + p_0^2. \end{cases} \tag{4.24}$$

É importante notarmos que a mecânica clássica também deve ser o limite desse formalismo

para $\hbar \to 0$. De fato:

$$\lim_{\hbar\to 0} A(t) = 1,$$

$$\lim_{\hbar\to 0} \tau_E = \omega t + g\Lambda t = \tau_c, \tag{4.25}$$

$$\therefore \qquad \lim_{\hbar\to 0} \langle R(t)\rangle_E = M[g\Lambda t]M[\omega t]R_0 = R(t).$$

Regime "Semiclássico"

Expandindo τ_E em termos de $\hbar$, podemos escrever as soluções do centróide estatístico em termos do vetor clássico $R(t)$:

$$\begin{aligned}
\langle R(t)\rangle_E &= \underbrace{A(t)\Big\{[1-(2g\hbar t)^2] + 4g\hbar t M[\pi/2]\Big\}}_{\xi(t)} M[g\Lambda t \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k(2g\hbar t)^{2k}]M[\omega t]R_0 \\
&= \xi(t)M[g\Lambda t \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k(2g\hbar t)^{2k}]\underbrace{M[g\Lambda t]M[\omega t]R_0}_{R(t)} \\
&= \xi(t)\prod_{k=1}^{\infty} M\Big[\underbrace{(-1)^k g\Lambda t(2g\hbar t)^{2k}}_{\tau_k}\Big]R(t).
\end{aligned}$$

A exemplo do que ocorria quanticamente, o centróide estatístico também é constituído por infinitas correções (rotações do tipo zigue-zague) sobre o vetor clássico, além da modulação imposta pelo fator $\xi(t)$.

Tempos Característicos das Rotações

Utilizando exatamente o mesmo procedimento que utilizamos no formalismo quântico, podemos definir os *tempos característicos das rotações estatísticas* como

$$t_k = \frac{1}{2g\hbar}, \tag{4.26}$$

o qual, ao contrário do tempo quântico, não depende de k, isto é, o tempo entre duas correções sucessivas é sempre o mesmo.

4.1.4 Colapso e Ressurgimento

Do ponto de vista das diferenças entre os resultados quântico e estatístico, talvez o fenômeno mais curioso seja o do colapso e ressurgimento. Há uma série de trabalhos na literatura que apontam para a ocorrência desses fenômenos para grandezas como o número médio de fótons (energia média do oscilador) [77–79]. Aqui, veremos o fenômeno de colapso e ressurgimento nos próprios valores esperados quânticos, mas não nos valores esperados estatísticos. De fato, isto pode ser imediatamente constatado por simples inspeção do termo de modulação $A(t)$ nas equações (4.17) e (4.24). Podemos ainda, fazer o cálculo de $\Lambda(t) \equiv \langle R(t)\rangle^T\langle R(t)\rangle$ ($\Lambda(t)$ para o clássico, $\Lambda_Q(t)$ para o quântico e $\Lambda_E(t)$ para o estatístico),

uma grandeza que pode ser diretamente relacionada a uma ação (ação do centróide). Como resultado, obtemos

$$\begin{aligned}
\Lambda(t) &= R^T(t)R(t) = \Lambda, \\
\Lambda_Q(t) &= e^{-\frac{2\Lambda}{\hbar}\,\mathrm{sen}^{\,2} g\hbar t}\Lambda, \\
\Lambda_E(t) &= e^{-\frac{\Lambda}{\hbar}\frac{(2g\hbar t)^2}{1+(2g\hbar t)^2}}\Lambda,
\end{aligned} \tag{4.27}$$

sendo $\Lambda = q_0^2 + p_0^2$ uma constante de movimento clássica. Aqui, as diferenças entre os formalismos se tornam evidente. Fica bastante claro que a grandeza $\Lambda_E(t)$ jamais voltará ao valor inicial Λ, pelo contrário, à medida que o sistema caminha para o equilíbrio ($t \to \infty$), a ação do centróide estatístico tende assintoticamente a $e^{-\frac{\Lambda}{\hbar}}\Lambda$, sendo este valor tanto menor quanto mais próximos estivermos do limite clássico $\frac{\Lambda}{\hbar} \to \infty$.

Por outro lado, a ação do centróide quântico exibe *ressurgimentos*, cujos instantes de ocorrência podem ser calculados analiticamente observando-se os instantes em que a ação volta ao seu valor inicial:

$$\begin{aligned}
&\mathrm{sen}\,(g\hbar t) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad g\hbar t = n\pi, \quad n = 0, 1, 2... \\
&t_n^{(R)} = n\frac{\pi}{g\hbar}, \qquad (n \in \mathbb{N}).
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Então, os *tempos de ressurgimento* t_n, ficam assim definidos como múltiplos do *período de ressurgimento*:

$$\blacktriangle \qquad \tau_R = \frac{\pi}{g\hbar}. \tag{4.29}$$

O *período de colapso* é exatamente igual ao período de ressurgimento, mas os *tempos de colapso* estão obviamente "defasados" em relação aos tempos de ressurgimento:

$$t_n^{(C)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{g\hbar} \qquad (n \in \mathbb{N}) \tag{4.30}$$

Os comportamentos discutidos estão dispostos na figura 4.2.

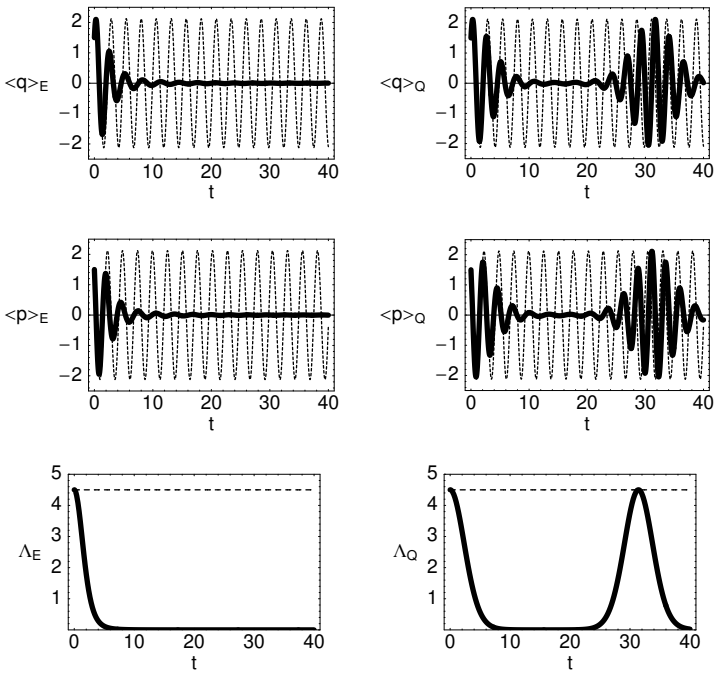

Figura 4.2: Valores esperados e ação do centróide (curvas sólidas) para o formalismo estatístico (coluna da esquerda) e para o formalismo quântico (coluna da direita). Os correspondentes clássicos estão apresentados com linhas tracejadas. Esses resultados foram obtidos para $\omega = 2$, $g = 0.1$, $q_0 = p_0 = 1.5$ e $\hbar = 1$, de modo que $\Lambda = 4.5$ e $\tau_R = \tau_C = 10\pi$.

4.1.5 Tempos de Quebra de Correspondência

Já vimos que podemos definir tempos característicos para rotações como sendo tempos em que as correções quânticas ficam significativas, fazendo com que ocorram defasagens em relação ao resultado clássico. Por outro lado, para grandezas como as ações definidas há pouco, este tipo de quebra de correspondência é totalmente insignificante. Muito mais relevante é observar as diferenças impostas pelos fatores de modulação. Podemos definir então tempos de quebra de correspondência entre os formalismos *quântico e clássico* (t_{QC}), *estatístico e clássico* (t_{EC}) e *quântico e estatístico* (t_{QE}) através das relações

$$\frac{\Lambda_Q(t_{QC})}{\Lambda(t_{QC})} = e^{\pm 1}, \qquad \frac{\Lambda_E(t_{EC})}{\Lambda(t_{EC})} = e^{\pm 1}, \qquad \frac{\Lambda_Q(t_{QE})}{\Lambda_E(t_{QE})} = e^{\pm 1}. \tag{4.31}$$

Estamos agora dentro do contexto das escalas de Ehrenfest, com as quais trabalharemos posteriormente de forma mais detalhada. No momento, basta que enxerguemos o problema do ponto de vista da comparação entre os três formalismos com os quais temos trabalhado.

Utilizando o resultado (4.27) para tempos curtos e pacotes coerentes localizados ($\hbar$ pequeno), obtemos as seguintes escalas:

$$t_{QC} = t_{QE} = \frac{1}{g\Lambda}\left(\frac{\Lambda}{2\hbar}\right)^{0.5}, \tag{4.32}$$

$$t_{EC} = \frac{1}{g\Lambda}\left(\frac{\Lambda}{4\hbar}\right)^{0.5}. \tag{4.33}$$

Surpreendentemente, de acordo com esses cálculos, os resultados quântico e clássico "caminham juntos" por mais tempo que os dos formalismos estatístico e clássico. De qualquer modo, se "ajustássemos" a largura da distribuição clássica (com $\sigma = \frac{\hbar}{2}$, por exemplo)[1], teríamos escalas idênticas de quebra de correspondência. Isso de fato, está em acordo com a idéia conceitual da escala de Ehrenfest como veremos adiante. Observe-se ainda que os tempos de quebra de correspondência divergem, como de fato se espera, à medida que tomamos o limite clássico ($\hbar \to 0$) ou o limite de interação fraca ($g\Lambda \to 0$).

4.1.6 Distribuições de Probabilidade no Espaço de Fase

Uma outra forma de entender porque ocorrem os ressurgimentos nos resultados quânticos mas não nos estatísticos é observando a evolução das distribuições de probabilidade no espaço de fase. No formalismo estatístico a distribuição é dada diretamente por $\rho(q,p,t)$ enquanto na mecânica quântica precisamos das distribuições de quasi-probabilidade, como por exemplo a função de Husimi

$$Q(q,p,t) \equiv \frac{\langle\alpha|\widehat{\rho}(t)|\alpha\rangle}{2\pi\hbar}\,, \tag{4.34}$$

sendo $\widehat{\rho}(t)$ o operador densidade quântico e $\alpha = \frac{q+\imath p}{\sqrt{2\hbar}}$. A normalização foi escolhida para que a comparação com o estatístico se fizesse em escalas e unidades apropriadas. Na figura 4.3, mostramos a evolução das distribuições estatística e quântica em três instantes: na primeira linha, temos o instante inicial (estados coerentes, com distribuições Gaussianas); na segunda linha, temos o instante do primeiro colapso ($t_0^{(C)} = \frac{\pi}{2g\hbar}$); e na terceira linha, temos o instante do primeiro ressurgimento ($t_1^{(R)} = \frac{\pi}{g\hbar}$). Note-se que a distribuição clássica se "enrola" cada vez mais e jamais volta a se organizar num formato Gaussiano, como ocorre com a distribuição quântica. Assim, é de se esperar que o centróide realmente convirja para um valor pequeno [$e^{-\frac{\Lambda}{2\hbar}}R_0$, conforme eq. (4.24)] à medida que o sistema evolui. Nos instantes de colapso o que ocorre com a distribuição quântica é a chamada *auto-interferência*, isto é, o pacote quântico acaba ficando deslocalizado em fase, fica espalhado, formando um anel, e acaba interferindo consigo próprio, construindo superposições macroscópicas, como pode ser observado na linha do meio da figura 4.3. Por outro lado, a distribuição clássica não consegue interferir consigo mesmo e acaba se interpenetrando, elongando e afinando seu tentáculo cada vez mais. No caso quártico bidimensional, exibiremos mais detalhes da evolução das densidades e veremos claramente a manifestação da auto-interferência. Agora, vamos mostrar que de fato, nos instantes de colapso, temos uma superposição de estados coerentes, ou seja, temos um estado de gato de Schrödinger.

De forma geral, vamos estudar tempos da forma $t_{r,s} = \frac{\pi}{g\hbar}\frac{r}{s}$, sendo r e s inteiros primos entre si. Nesses instantes, o vetor estado do sistema assume a forma

$$|\psi(t_{r,s})\rangle \;=\; e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left[\alpha_0\, e^{-\imath(\omega+g\hbar)t_{r,s}}\right]^n}{\sqrt{n!}}e^{-\imath\pi n^2\frac{r}{s}}|n\rangle. \tag{4.35}$$

Seguindo o exemplo de Banerji [80], usaremos a seguir a transformada de Fourier discreta

[1] De fato, esta escolha para a largura inicial da densidade estatística também é sugerida pelo cálculo das variâncias do estado inicial, como pode ser verificado no apêndice C.

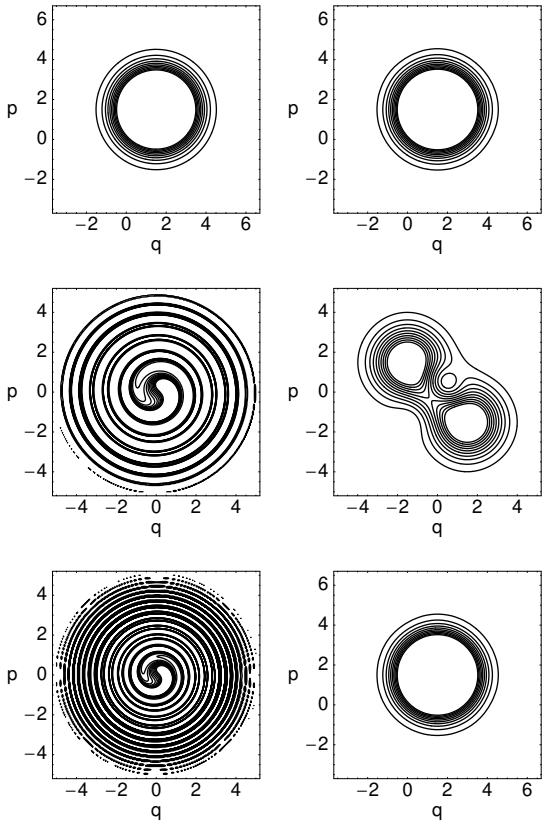

Figura 4.3: Curvas de nível das distribuições de probabilidade clássica (coluna da esquerda) e quântica (coluna da direita) no espaço de fase. Na primeira linha são mostradas as distribuições Gaussianas originais ($t = 0$); na segunda linha, temos o primeiro colapso ($t = \frac{\pi}{2g\hbar}$); e na terceira linha, temos o instante do primeiro ressurgimento quântico ($t = \frac{\pi}{g\hbar}$). Esses resultados foram obtidos para $\omega = 2$, $g = 0.1$, $q_0 = p_0 = 1.5$ e $\hbar = 1$.

dada por

$$e^{-\imath\pi n^2 \frac{r}{s}} = \sum_{q=0}^{l-1} a_q^{(r,s)} e^{-\imath 2\pi n \frac{q}{l}}, \tag{4.36}$$

sendo

$$l = \begin{cases} s, \text{ se } r \text{ é ímpar e } s \text{ é par, ou vice-versa} \\ 2s, \text{ se } r \text{ e } s \text{ são ambos ímpares} \end{cases} \tag{4.37}$$

e

$$a_q^{(r,s)} = \frac{1}{l} \sum_{k=0}^{l-1} e^{-\imath\pi k\left(k\frac{r}{s} - 2\frac{q}{l}\right)}. \tag{4.38}$$

Com essas expressões, a equação (4.35) assume a forma

$$\begin{aligned}
|\psi(t_{r,s})\rangle &= e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\alpha(t_{r,s})]^n}{\sqrt{n!}} \sum_{q=0}^{l-1} a_q^{(r,s)} e^{-\imath 2\pi n \frac{q}{l}} |n\rangle, \\
&= \sum_{q=0}^{l-1} a_q^{(r,s)} \left\{ e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\alpha(t_{r,s}) e^{-\imath 2\pi \frac{q}{l}}]^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \right\} \\
&= \sum_{q=0}^{l-1} a_q^{(r,s)} \left| \alpha(t_{r,s}) e^{-\imath 2\pi \frac{q}{l}} \right\rangle , \qquad (4.39)
\end{aligned}$$

com $\alpha(t_{r,s}) = \alpha_0 e^{-\imath(\omega + g\hbar)t_{r,s}}$. Com este resultado, podemos concluir que nos instantes $t_{r,s}$ (frações do tempo de ressurgimento), o estado do sistema é manifestamente uma superposição de vários estados coerentes, algo como um "multi-gato" de Schrödinger. Mais tarde, quando estivermos tratando o caso bidimensional, veremos claramente os vários picos Gaussianos através da função Q. Entretanto, nesta ocasião, não teremos mais os estados de gato, mas sim uma *mistura de estados de gato*.

Vamos agora discutir a reversibilidade do sistema, isto é, vamos tentar responder a seguinte questão: sob quais condições o sistema volta exatamente ao estado inicial? Inspecionando a eq. (4.40) em instantes que são múltiplos inteiros do período de ressurgimento ($t_k = k\frac{\pi}{g\hbar},\ k \in \mathbb{N}$), constata-se que

$$\begin{aligned}
|\psi(t_k)\rangle &= e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left[\alpha_0 e^{-\imath(\omega+g\hbar)t_k}\right]^n}{\sqrt{n!}} \underbrace{\left(e^{-\imath g\hbar t_k}\right)^{n^2}}_{(e^{-\imath\pi})^{kn^2} = (-1)^{kn}} |n\rangle \\
&= e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left[(-1)^k \alpha_0 e^{-\imath(\omega+g\hbar)t_k}\right]^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\
&= |(-1)^k \alpha_0 e^{-\imath k\pi \frac{\omega}{g\hbar}} e^{-\imath k\pi}\rangle \\
&= |\alpha_0 e^{-\imath k\pi \frac{\omega}{g\hbar}}\rangle \qquad (k \in \mathbb{N}), \qquad (4.40)
\end{aligned}$$

em que suprimimos a fase global. Nesta expressão fica evidente que existe uma condição que deve ser satisfeita para que o sistema volte ao estado inicial nos tempos de ressurgimento: $k\frac{\omega}{g\hbar}$ = inteiro par. No nosso caso, tal condição é satisfeita em todos os instantes de ressurgimento, visto que temos usado $\frac{\omega}{g\hbar} = 20$.

4.2 Oscilador Quártico 2-D + Interação RWA

Voltemos ao contexto das comparações entre os formalismos quântico e estatístico, agora para um sistema não-linear bidimensional, para os quais temos ainda a possibilidade de estudar as entropias. O modelo que estudaremos é particularmente interessante porque é integrável, de interesse experimental e portador de fenômenos sem análogo clássico.

É importante destacar que este trabalho foi realizado em conjunto com Liliana Sanz, aluna de doutorado da Profa. Kyoko Furuya no IFGW - UNICAMP. Uma parte dos resultados desta colaboração foi submetida à revista *J. Phys. A* [81].

A solução analítica do problema quártico unidimensional e dos problemas de interação bilinear nos levaram a definir um sistema bidimensional não-linear que levasse em consideração esses dois tipos de interação, mas que ainda assim, fosse analiticamente solúvel. Este sistema Hamiltoniano, que passaremos a chamar de "quártico", foi definido classicamente como

$$\mathcal{H} = \underbrace{\omega\left\{\mathcal{H}_0^{(1)} + \mathcal{H}_0^{(2)}\right\}}_{\text{osciladores livres}} + \underbrace{\lambda(q_1 q_2 + p_1 p_2)}_{\text{interação RWA}} + \underbrace{g\left\{\mathcal{H}_0^{(1)} + \mathcal{H}_0^{(2)}\right\}^2}_{\text{interação quártica}}, \tag{4.41}$$

sendo $\mathcal{H}_0^{(i)} = \frac{q_i^2+p_i^2}{2}$, conforme a notação utilizada anteriormente. Então, realizando o procedimento usual de quantização (descrito em seções anteriores) obtemos o Hamiltoniano quântico

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left\{\widehat{H}_0^{(1)} + \widehat{H}_0^{(2)}\right\} + \hbar\lambda\left(\widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_2 + \widehat{a}_1\widehat{a}_2^\dagger\right) + \hbar^2 g\left\{\widehat{H}_0^{(1)} + \widehat{H}_0^{(2)}\right\}^2, \tag{4.42}$$

com $\widehat{H}_0^{(i)} = \left(\widehat{a}_i^\dagger\widehat{a}_i + \frac{1}{2}\right)$.

4.2.1 Solução Clássica

O operador Liouvilliano deste sistema é dado por

$$\mathcal{L} = (\omega + g\Lambda)\left[\mathcal{L}_0(q_1,p_1) + \mathcal{L}_0(q_2,p_2)\right] + \lambda\left[\mathcal{L}_0(q_1,p_2) + \mathcal{L}_0(q_2,p_1)\right], \tag{4.43}$$

no qual a ação característica do sistema é agora dada por $\Lambda = q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + q_2^2$. Nesta expressão fica claro que o termo RWA é o responsável pelo acoplamento dos espaços. Pode-se mostrar que o termo em λ comuta com o outro termo, o que significa que podemos separar o problema, resolvendo-o na ordem que acharmos mais apropriada. Além disso, como a álgebra está totalmente baseada em operadores Liouvillianos do tipo $\mathcal{L}_0(x,y)$, cuja aplicação já nos é bastante familiar, podemos resolver o problema imediatamente:

$$\blacktriangle \qquad R(t) = \begin{bmatrix} M[g\Lambda t]\, M[\omega t] & \emptyset \\ \emptyset & M[g\Lambda t]\, M[\omega t] \end{bmatrix} R_\lambda(t), \tag{4.44}$$

com

$$R_\lambda(t) = \begin{bmatrix} \cos\lambda t\, M[0] & \operatorname{sen}\lambda t\, M[\frac{\pi}{2}] \\ \operatorname{sen}\lambda t\, M[\frac{\pi}{2}] & \cos\lambda t\, M[0] \end{bmatrix} R_0\,, \tag{4.45}$$

sendo M a matriz de rotação bidimensional que já utilizamos nas outras seções. Note-se que $R(t)$ e R_0 são agora vetores quadridimensionais que representam respectivamente a evolução do vetor condição incial e o próprio vetor condição inicial.

Através de uma álgebra matricial simples pode-se mostrar também que a *ação característica clássica* (que definimos como $\Lambda(t)$) é uma constante de movimento:

$$\Lambda(t) \equiv R^T(t)R(t) = q_{10}^2 + p_{10}^2 + q_{20}^2 + p_{20}^2 = \Lambda. \tag{4.46}$$

4.2.2 Solução Quântica

Para o caso de estados iniciais de número, ou seja, para autoestados do oscilador harmônico, o resultado para a função de onda evoluída já foi obtido no capítulo anterior. De fato, o novo termo quártico de interação é diagonal na base dos estados de número, contribuindo para a dinâmica apenas através de uma fase global. Assim, toda a dinâmica dos estados de número fica determinada pela interação RWA, a qual já estudamos em detalhes.

Por outro lado, o termo quártico traz contribuições interessantes para o caso de estados iniciais coerentes, a exemplo do que ocorre no caso unidimensional. Calculemos então a evolução de estados iniciais coerentes utilizando alguns resultados obtidos em seções anteriores. Começamos reescrevendo nosso Hamiltoniano quântico como

$$\widehat{H} = \omega\widehat{H}_0 + \lambda\widehat{V} + g\widehat{H}_0^2, \tag{4.47}$$

$$\begin{cases} \widehat{H}_0 = \hbar\left(\widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_1 + \widehat{a}_2^\dagger\widehat{a}_2 + 1\right), \\ \widehat{V} = \hbar\left(\widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_2 + \widehat{a}_1\widehat{a}_2^\dagger\right). \end{cases} \tag{4.48}$$

Observem-se agora as relações de comutação entre cada componente de $\widehat{H}$:

$$\begin{aligned} \left[\widehat{H}_0, \widehat{V}\right] &= \left[\widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_1 + \widehat{a}_2^\dagger\widehat{a}_2 + 1, \widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_2 + \widehat{a}_1\widehat{a}_2^\dagger\right] \\ &= \widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_2\left[\widehat{a}_1, \widehat{a}_1^\dagger\right] + \widehat{a}_2^\dagger\left[\widehat{a}_1^\dagger, \widehat{a}_1\right]\widehat{a}_1 + \widehat{a}_1^\dagger\left[\widehat{a}_2^\dagger, \widehat{a}_2\right]\widehat{a}_2 + \widehat{a}_2^\dagger\widehat{a}_1\left[\widehat{a}_2, \widehat{a}_2^\dagger\right] \\ &= \widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_2 - \widehat{a}_2^\dagger\widehat{a}_1 - \widehat{a}_1^\dagger\widehat{a}_2 + \widehat{a}_2^\dagger\widehat{a}_1 \\ &= 0, \end{aligned} \tag{4.49}$$

$$\left[\widehat{H}_0^2, \widehat{V}\right] = \left[\widehat{H}_0, \widehat{H}_0^2\right] = 0. \tag{4.50}$$

Podemos então separar o problema em duas partes:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{\frac{gt\widehat{H}_0^2}{\imath\hbar}} \underbrace{e^{\frac{\omega t\widehat{H}_0 + \lambda t\widehat{V}}{\imath\hbar}}|\psi(0)\rangle}_{\text{problema resolvido: eq.(3.33)}} \\ &= e^{\frac{gt\widehat{H}_0^2}{\imath\hbar}}|\beta_1(t), \beta_2(t)\rangle, \end{aligned} \tag{4.51}$$

em que omitimos as fases globais. Finalmente, encontramos a expressão para o estado do sistema no instante t:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{|\beta_1(t)|^2 + |\beta_2(t)|^2}{2}} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{[\beta_1(t)]^n}{\sqrt{n!}} \frac{[\beta_2(t)]^m}{\sqrt{m!}} e^{\frac{gt\widehat{H}_0^2}{\imath\hbar}}|n, m\rangle \\ &= e^{-\frac{|\beta_1(t)|^2 + |\beta_2(t)|^2}{2}} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{[\beta_1(t)]^n}{\sqrt{n!}} \frac{[\beta_2(t)]^m}{\sqrt{m!}} e^{-\imath\hbar gt(n+m+1)^2}|n, m\rangle \\ &= e^{-\frac{|\beta_1(t)|^2 + |\beta_2(t)|^2}{2}} \sum_{n,m=0}^{\infty} e^{-\imath\hbar gt(n+m)^2} \frac{\left[\beta_1(t)e^{-\imath 2g\hbar t}\right]^n}{\sqrt{n!}} \frac{\left[\beta_2(t)e^{-\imath 2g\hbar t}\right]^m}{\sqrt{m!}}|n, m\rangle, \end{aligned} \tag{4.52}$$

que está conectado à trajetória clássica através de $\beta_1(t)$ e $\beta_2(t)$, os quais foram definidos na equação (3.34). Agora podemos calcular o vetor "centróide" composto pelos valores esperados das coordenadas do espaço de fase seguindo a mesma notação utilizada no caso unidimensional:

$$\blacktriangle \qquad \langle \widehat{R}(t) \rangle_Q = A(t) \begin{bmatrix} M[\tau_Q] & \emptyset \\ \emptyset & M[\tau_Q] \end{bmatrix} R_\lambda(t), \tag{4.53}$$

$$\begin{cases} \tau_Q = (\omega + 3g\hbar)t + \Lambda \frac{\operatorname{sen} 2g\hbar t}{2\hbar} \\ \\ A(t) = e^{-\Lambda \frac{\operatorname{sen}^2 g\hbar t}{\hbar}}. \end{cases}$$

É importante destacarmos que apesar da aparência mais complicada, este resultado é bastante parecido com o do caso 1-D do ponto de vista da dinâmica do centróide. Veja que a dimensionalidade do problema só faz aumentar o tamanho das matrizes de rotação, mas não muda o seu caráter de rotação no espaço de fase. Além disso, o termo de modulação $A(t)$, que é o fator que utilizamos para calcular os tempos de colapso e ressurgimento e os tempos de quebra de correspondência, é praticamente o mesmo do caso 1-D, com a diferença importante na ação Λ, que agora é proporcional à área da hiperesfera definida pelo vetor $R(t)$ no espaço de fase quadridimensional do problema. Por causa disso, não repetiremos as análises e procedimentos para o cálculo de tempos característicos, tempos de colapso e ressurgimento, tempo de quebra de correspondência, limite clássico, etc. Em particular, vale a pena exibirmos o resultado analítico para o tempo de quebra de correspondência quântico-clássica definido na equação (4.31):

$$\blacktriangle \qquad t_{QC} = \frac{1}{g\Lambda} \left(\frac{\Lambda}{2\hbar} \right)^{0.5}. \tag{4.54}$$

4.2.3 Solução Estatística

Dentro do formalismo estatístico o resultado obtido foi

$$\blacktriangle \qquad \langle R(t) \rangle_E = A(t) \begin{bmatrix} \frac{x(t)M[\frac{\pi}{2}]+y(t)}{x^2(t)+y^2(t)} M[\tau_E] & \emptyset \\ \emptyset & \frac{x(t)M[\frac{\pi}{2}]+y(t)}{x^2(t)+y^2(t)} M[\tau_E] \end{bmatrix} R_\lambda(t),$$

$$\begin{cases} \tau_E = \omega t + \frac{g\Lambda t}{1+(2g\hbar t)^2}, \\ \\ A(t) = e^{-\frac{2\Lambda\hbar(gt)^2}{1+(2g\hbar t)^2}}, \\ \\ x(t) = 6(g\hbar t) - 8(g\hbar t)^3, \\ \\ y(t) = 1 - 12(g\hbar t)^2. \end{cases} \tag{4.55}$$

Também de forma análoga ao caso unidimensional, obtém-se a seguinte escala de quebra de correspondência estatístico-clássica [vide eq. (4.31)]:

$$\blacktriangle \qquad t_{EC} = \frac{1}{g\Lambda} \left(\frac{\Lambda}{4\hbar} \right)^{0.5}, \tag{4.56}$$

na qual somos remetidos à questão da escolha adequada da distribuição clássica inicial diante da diferença de um fator 2 em relação à escala t_{QC} (vide apêndice C).

4.2.4 Entropia e Emaranhamento

Vamos agora fazer uma análise que não era interessante no caso 1-D, pelo fato de que a entropia linear do subsistema era a própria entropia global, que para um sistema fechado puro deve ser sempre nula. Começamos pelo cálculo analítico da entropia linear quântica. Utilizando o resultado (4.52), podemos calcular a matriz densidade global do sistema e então traçar as variáveis de um dos osciladores. Então expressamos as matrizes densidade reduzidas na forma

$$\widehat{\rho}_{1,2}(t) = e^{-|\beta_1|^2-|\beta_2|^2} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\beta_{1,2}^n}{\sqrt{n!}} \frac{\beta_{1,2}^{*m}}{\sqrt{m!}} e^{|\beta_{2,1}|^2 e^{-2\imath\hbar g t(n-m)}} e^{-\imath\hbar g t\left[n^2-m^2+2(n-m)\right]} |n\rangle \langle m| . \quad (4.57)$$

Então, calculam-se analiticamente as entropias lineares $\delta_{1,2}(t) = 1 - Tr_{1,2}\left[\widehat{\rho}_{1,2}^2(t)\right]$ correspondentes a cada oscilador:

$$\delta_{1,2}(t) = 1 - e^{-2|\beta_{1,2}(t)|^2} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{|\beta_{1,2}(t)|^{2n}}{n!} \frac{|\beta_{1,2}(t)|^{2m}}{m!} e^{-4|\beta_{2,1}(t)|^2 \sin^2[\hbar g t(n-m)]}. \quad (4.58)$$

Dentro do formalismo estatístico não foi possível obter um resultado analítico para a entropia linear, de modo que os cálculos foram feitos numericamente. Na figura 4.4 são mostrados os resultados para as entropias quântica e clássica para alguns valores de $\hbar$.

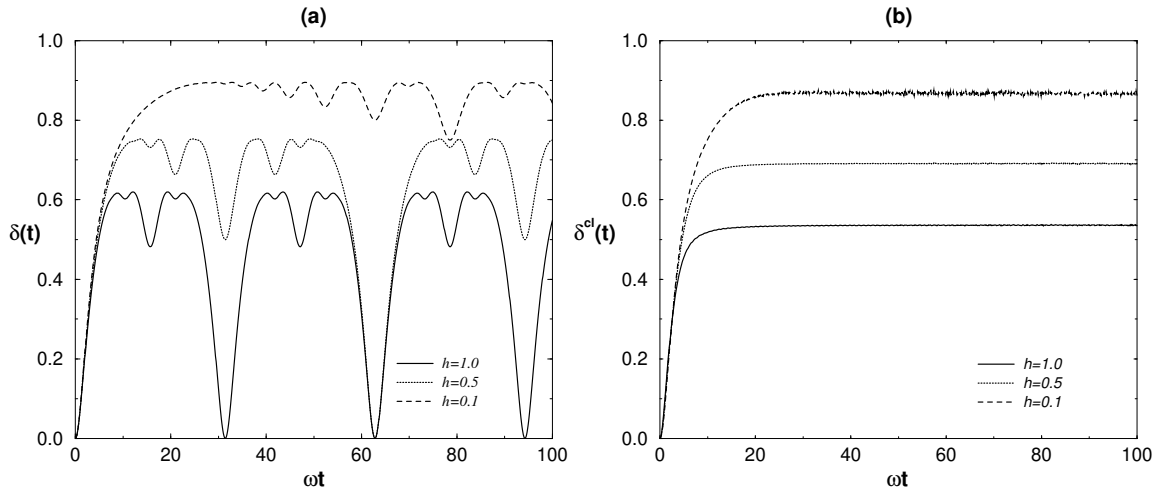

Figura 4.4: (a) Entropia linear quântica e (b) entropia linear clássica para diversos valores de $\hbar$ (regime semiclássico). Resultados obtidos com $\omega = 1$, $g = 0.1$, $\lambda = 0.2$, $q_i = p_i = 1.0$ e $\Lambda = 4$.

Nesses resultados, há alguns pontos que merecem destaque:

- A entropia quântica volta a se anular exatamente nos chamados *tempos de recoerência* $t_k = k\frac{\pi}{g\hbar}$ ($k \in \mathbb{N}$), os quais serão estudados mais detalhadamente a seguir. Assim, no limite clássico ($\hbar \to 0$), não haverá recoerências, de modo que a descrição quântica passa a ficar cada vez mais parecida com a estatística. De fato, como se observa, a entropia

clássica nunca sofre recoerência, o que já está sugerido de alguma forma nas equações do centróide e no comportamento "irreversível" das distribuições observadas no caso 1-D (como veremos a seguir, no caso 2-D os resultados são semelhantes).

- Se as recoerências são efeitos da reorganização quântica, como sugerem os resultados, então podemos conjecturar que o instante de sua aparição está conectado com o tempo de Ehrenfest. De fato, isso vem sendo confirmado nos estudos desenvolvidos por Liliana Sanz [82].

4.2.5 *Tempos de Recoerência e de Recorrência*

Do ponto de vista das entropias, é interessante analisarmos os instantes de recoerência total do sistema. A exemplo do que fizemos no caso 1-D, somos induzidos a definir $t_k = k\frac{\pi}{g\hbar}$ como *tempos de recoerência* do sistema para qualquer estado inicial diferente de $|0,0\rangle$. Nesses instantes ocorre

$$\begin{aligned}
|\psi(t_k)\rangle &= e^{-\frac{|\beta_1(t_k)|^2+|\beta_2(t_k)|^2}{2}} \sum_{n,m=0}^{\infty} \underbrace{e^{-\imath\pi k(n+m)^2}}_{e^{-\imath\pi k(n+m)}} \frac{\left[\beta_1(t_k)e^{-\imath k2\pi}\right]^n}{\sqrt{n!}} \frac{\left[\beta_2(t_k)e^{-\imath k2\pi}\right]^m}{\sqrt{m!}} |n,m\rangle \\
&= e^{-\frac{|\beta_1(t_k)|^2+|\beta_2(t_k)|^2}{2}} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\left[\beta_1(t_k)e^{-\imath\pi k}\right]^n}{\sqrt{n!}} \frac{\left[\beta_2(t_k)e^{-\imath\pi k}\right]^m}{\sqrt{m!}} |n,m\rangle \\
&= \left|\beta_1(t_k)e^{-\imath\pi k}\right\rangle \otimes \left|\beta_2(t_k)e^{-\imath\pi k}\right\rangle ,
\end{aligned} \tag{4.59}$$

e fica claro que os t_k são os instantes em que o sistema volta a ficar puro, ou seja, são instantes em que a entropia deve se anular. Além desses, para condições iniciais particulares que obedeçam a relação $q_1q_2 + p_1p_2 = 0$ (caso em que a interação RWA é nula inicialmente e que faz com que um dos $\beta_k(t)$ se anule), temos também os seguintes instantes de recoerência:

$$t = \frac{1}{\lambda}\arctan\left(-\frac{q_1}{p_2}\right) = \frac{1}{\lambda}\arctan\left(\frac{p_1}{q_2}\right). \tag{4.60}$$

Dentre esses instantes, podemos destacar aqueles em que o sistema volta exatamente ao estado inicial. Por inspeção do estado $|\psi(t_k)\rangle$, podemos concluir que a *recorrência* ocorrerá nos instantes t_k desde que sejam obedecidas as condições:

$$k\,\frac{\omega}{g\hbar} \in \mathbb{Z}, \tag{4.61}$$

$$k\,\frac{\lambda}{g\hbar} \in \mathbb{Z}. \tag{4.62}$$

4.2.6 Auto-Interferência

O comportamento das distribuições de probabilidade estatísticas é realmente muito parecido com o do caso 1-D: a distribuição se "enrola" à medida que o sistema evolui (ver figura 4.5), o que concorda com o comportamento de colapso permanente observado no centróide estatístico.

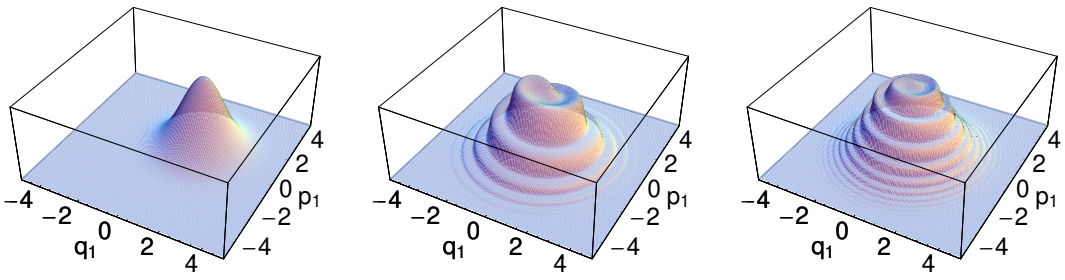

Figura 4.5: Distribuições estatísticas para o oscilador 1 em $t = 0$, $t = \frac{\pi}{2g\hbar}$ (tempo do primeiro colapso quântico) e $t = \frac{\pi}{g\hbar}$ (tempo do primeiro ressurgimento quântico). Resultados obtidos para $\omega = 1$, $g = 0.1$, $\lambda = 0.2$, $q_{i0} = p_{i0} = 1$, $\Lambda = 4$ e $\hbar = 1$.

Em contrapartida, como foi observado por Sanz e colaboradores [81], a distribuição quântica volta a se organizar, voltando inclusive a reproduzir o próprio estado inicial, evidenciando que o processo quântico é reversível (figuras 4.6 e 4.7). Estamos diante do chamado fenômeno de *auto-interferência*, já observado na literatura para sistemas não-lineares em uma [80] e duas dimensões [19].

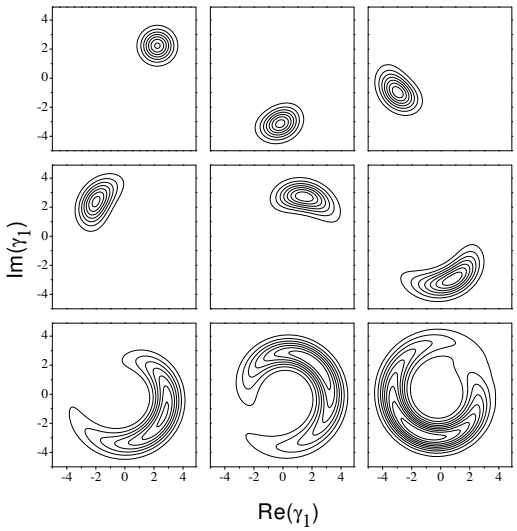

Figura 4.6: Curvas de contorno da função Q do subsistema 1 ($\gamma_1 = \frac{q_1 + \imath p_1}{\sqrt{2\hbar}}$) durante o processo de descoerência rápida do sistema, antes da aparição das primeiras oscilações na entropia. Os parâmetros usados foram $q_{i0} = p_{i0} = 1$, $\omega = 1$, $\lambda = 0.2$, $g = 0.1$ e $\hbar = 0.1$. A sequência temporal é exibida de cima para a direita.

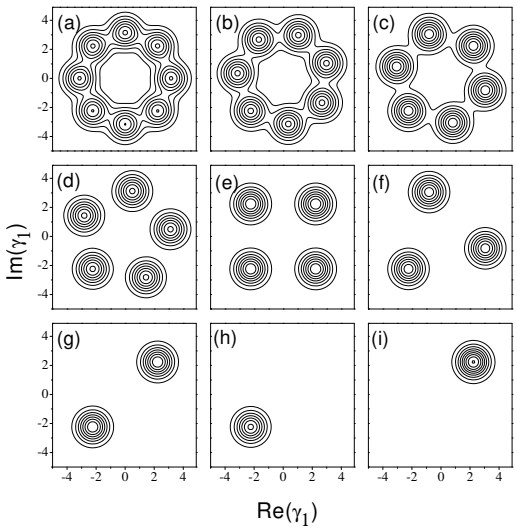

Figura 4.7: *Misturas de estados de gatos de Schrödinger* exibidas através de curvas de contorno da função Q do subsistema 1 ($\gamma_1 = \frac{q_1 + \imath p_1}{\sqrt{2\hbar}}$) durante o regime de auto-interferência. Os parâmtros usados foram $q_{i0} = p_{i0} = 1$, $\omega = 1$, $\lambda = 0.2$, $g = 0.1$ e $\hbar = 0.1$. A sequência temporal é (a) $t = \frac{t_1}{8}$, (b) $t = \frac{t_1}{7}$, (c) $t = \frac{t_1}{6}$, (d) $t = \frac{t_1}{5}$, (e) $t = \frac{t_1}{4}$, (f) $t = \frac{t_1}{3}$, (g) $t = \frac{t_1}{2}$, (h) $t = t_1$ (tempo de recoerência) e (i) $t = 2t_1$ (tempo de recorrência).

Trata-se da interferência do pacote de ondas consigo mesmo. Como pode ser verificado, esse fenômeno não pode ser simulado pela distribuição clássica, e portanto, jamais teremos reorganização e ou reversibilidade das distribuições clássicas. Nesse sentido, a escala de tempo inicial pode ser considerada essencialmente "clássica", pois as distribuições em ambos os formalismos se comportam de forma semelhante. Porém, no regime de auto-interferência, deve ocorrer a quebra de correspondência entre os formalismos. Desse ponto de vista, é bastante razoável associarmos o instante do início do regime de auto-interferência com o tempo de Ehrenfest. De fato, como já mencionamos, essa conjectura foi testada por Liliana Sanz, que verificou que o instante de ocorrência das primeiras oscilações da entropia pode ser descrito por uma escala proporcional a $\hbar^{-0.5}$, que concorda com os resultados analíticos que temos obtido para o tempo de quebra de correspondência.

4.2.7 Expoentes Clássicos e Taxas de Descoerência

A conjectura de Zurek e Paz [15] prediz que a taxa de descoerência (definida como a derivada temporal da entropia de Von Neumann) de um sistema caótico em contato com um reservatório é dada pela soma dos expoentes de Lyapunov positivos do sistema. Para um sistema regular, a entropia crescerá a uma taxa que tende a zero assintoticamente antes da escala de tempo de equilíbrio do sistema. Nosso objetivo aqui, é mostrar que na escala de Ehrenfest a taxa de descoerência pode ser proporcional a um expoente característico diferente do usual expoente de Lyapunov.

Antes de definirmos o novo expoente, é interessante observarmos que o expoente de Lyapunov dependente do tempo[2] não é adequado para descrever a taxa de descoerência do sistema

[2]Estamos considerando $\lambda_{max}(t) = \frac{1}{t} \ln \left(\frac{|r_1(t) - r_2(t)|}{|r_1(0) - r_2(0)|} \right)$ como sendo o expoente de Lyapunov dependente do tempo. A diferença em relação ao expoente de Lyapunov usual é que aqui não tomamos o limite $t \to \infty$ [83].

(que é integrável mas não-linear) a tempos curtos. Em sua definição usual, o maior expoente de Lyapunov dependente do tempo, tem o comportamento mostrado na figura 4.8.

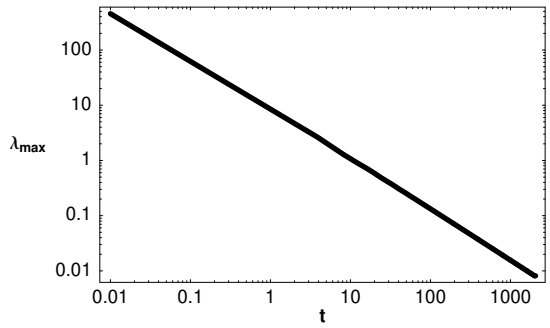

Figura 4.8: Maior expoente de Lyapunov para o sistema quártico 2-D em função do tempo. Cálculo realizado com $\omega = 1$, $\lambda = 0.2$, $g = 0.1$ e $q_i = p_i = 1.0$. A condição inicial vizinha foi calculada como $(q_1 + d_0, p_1 + d_0, q_2 + d_0, p_2(E))$, sendo $d_0 = 10^{-8}$ e $p_2(E)$ foi calculado sobre a mesma superfície de energia constante (E=2.8).

De fato, $\lim_{t\to\infty} \lambda_{max}(t) = 0$, como se espera, visto que o sistema é integrável. Além disso, seu comportamento a tempos curtos não se aproxima de forma alguma da taxa de descoerência do sistema, como veremos adiante. Então somos levados a propor um novo expoente, o qual chamaremos de *expoente característico* (EC) e denotaremos por $\lambda_c(t)$. Esta quantidade tem uma forma matemática bastante parecida com a do expoente de Lyapunov, mas é conceitualmente diferente. Trata-se de um "medidor" do afastamento entre trajetórias vizinhas localizadas sobre diferentes superfícies de energia, ao contrário do que ocorre com o expoente de Lyapunov. Sua definição matemática é

$$\lambda_c(t) = \lim_{\Delta\to 0} \frac{1}{t} \ln \frac{|\vec{R}(\vec{r}_1, t) - \vec{R}(\vec{r}_2, t)|}{\Delta}, \tag{4.63}$$

na qual $\vec{R}(\vec{r}_k, t)$ é a evolução temporal do vetor condição inicial $\vec{r}_k$ e $\Delta = |\vec{R}(\vec{r}_1, 0) - \vec{R}(\vec{r}_2, 0)|$ é o módulo do vetor distância inicial entre as trajetórias vizinhas. Para implementarmos a hipótese de diferentes superfícies de energia, escolhemos as condições $\vec{R}(\vec{r}_1, t) = \vec{R}(\vec{r}_0 + \vec{\Delta}, t)$ e $\vec{R}(\vec{r}_2, t) = \vec{R}(\vec{r}_0, t)$, com $\vec{\Delta} = \delta_0(1, 1, 1, 1)$. Então, o EC pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\lambda_c(t) &= \lim_{\delta_0\to 0} \frac{1}{t} \ln \left\{ \frac{|\vec{R}(\vec{r}_0 + \vec{\Delta}, t) - \vec{R}(\vec{r}_0, t)|}{2\delta_0} \right\} \\
&= \lim_{\delta_0\to 0} \frac{1}{t} \ln \left\{ \sqrt{\frac{1}{4} \left[\frac{\vec{R}(\vec{r}_0 + \vec{\Delta}, t) - \vec{R}(\vec{r}_0, t)}{\delta_0} \right]^2} \right\} \\
&= \frac{1}{t} \ln \sqrt{\frac{1}{4} \left[\nabla_{\vec{r}_0} \vec{R}(\vec{r}_0, t) \right]^2}
\end{aligned}$$

$$\blacktriangle \qquad \lambda_c(t) = \frac{1}{t} \ln \left(\frac{|\nabla_{\vec{r}_0} \vec{R}(\vec{r}_0, t)|}{2} \right), \tag{4.64}$$

em que definimos o seguinte gradiente: $\nabla_{\vec{r}_0} = \frac{\partial}{\partial q_{10}} + \frac{\partial}{\partial p_{10}} + \frac{\partial}{\partial q_{20}} + \frac{\partial}{\partial p_{20}}$. É importante notar que a álgebra realizada para se obter tal resultado pressupõe que o fluxo Hamiltoniano seja descrito por funções bem comportadas que comutem com a tomada do limite $\delta_0 \to 0$.

O resultado (4.64) é interessante porque sugere um expoente que está diretamente conectado ao gradiente do vetor R, o qual, como já vimos, define a ação clássica $\Lambda = R^T R$. Além disso, como a energia do sistema está definida em termos da ação Λ, podemos dizer que o EC é proporcional a um *gradiente de ação* $\nabla_\Lambda R(t)$ ou a um *gradiente de energia* $\nabla_E R(t)$.

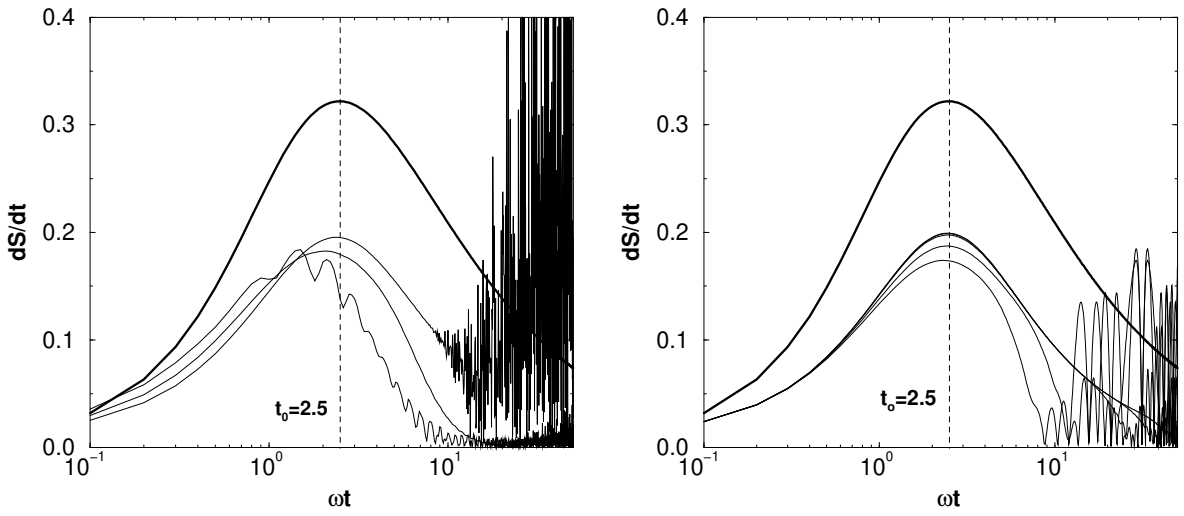

Figura 4.9: Módulo da taxa de descoerência $\frac{dS}{dt} = -\frac{d}{dt}\ln(1-\delta)$ para diversos valores de $\hbar$ (linhas finas partidas) e expoente característico EC para o sistema quártico 2-D. Cálculo realizado com $\omega = 1$, $\lambda = 0.2$, $g = 0.1$ e $q_i = p_i = 1.0$. As curvas apresentam um máximo em $t_0 = \frac{1}{g\Lambda} = 2.5$.

Na figura 4.9, na qual mostramos os resultados numéricos que comparam a taxa de descoerência com o EC, evidenciam-se comportamentos qualitativos bastante semelhantes, ao contrário do que acontecia ao usarmos a definição usual do expoente de Lyapunov dependente do tempo. O cálculo foi feito com os dados das entropias mostradas na figura 4.4. Apesar das imprecisões numéricas no cálculo da entropia estatística, podemos dizer que também as entropias estatística e quântica devem coincidir na escala de tempo de Ehrenfest. Nesta escala, o comportamento da entropia parece não depender de $\hbar$, o que nos faz pensar sobre a possibilidade da descoerência (a tempos curtos) estar conectada a algum mecanismo clássico. Em princípio, o EC parece ser uma grandeza adequada para tal descrição, mas é preciso encontrar algum sinal teórico de que isso seja verdade, pois em princípio há um sem número de expoentes que podem ser definidos de forma análoga ao EC. De qualquer modo, o EC parece ser uma boa escolha, podendo inclusive ser calculado analiticamente no caso 1-D. Neste caso, verifica-se analiticamente a existência de uma máximo global em $t_0 = \frac{1}{g\Lambda}$.

4.2.8 Emaranhamento Clássico?!

Talvez a pergunta mais contundente a respeito dos cálculos que realizamos até aqui seja: qual o significado da "entropia clássica"? Ou ainda: existe emaranhamento clássico? Analisemos então os conceitos e resultados apresentados.

Em toda a literatura, o emaranhamento é entendido como uma assinatura da mecânica quântica. Somente na presença de correlações quânticas não-locais é que fenômenos como a teleportação podem se manifestar. Há consenso também sobre o fato de que a entropia de Von Neumann do subsistema é uma medida confiável de emaranhamento quando o sistema global é puro. Mas a entropia linear tem um comportamento qualitativo idêntico ao da entropia de Von Neumann, de modo que podemos afirmar que a entropia linear também mede emaranhamento.

De outro lado, temos o formalismo estatístico-clássico, que nos permite definir distribuições de probabilidade clássicas e evoluí-las através da equação de Liouville. Neste contexto, definimos uma quantidade que chamamos de *entropia linear clássica*, com formato matemático totalmente inspirado na definição quântica. Mais tarde, por conveniência, definimos ainda o *grau de emaranhamento clássico*, como uma proposta mais geral para o cálculo do emaranhamento clássico.

Os cálculos que realizamos em sistemas bidimensionais com interações bilineares, apresentaram resultados qualitativamente idênticos para as entropias quântica e clássica. Mais tarde, fizemos a comparação das entropias num sistema bidimensional com interação quártica capaz de produzir efeitos quânticos de *auto-interferência*. Neste caso, as diferenças entre os formalismos foram evidentes e incontestáveis.

Diante deste quadro, somos levados a acreditar que a entropia linear clássica representa uma medida quantitativa do *emaranhamento* de distribuições clássicas, sem qualquer conexão teórica (a priori) com o emaranhamento quântico propriamente dito. De fato, é de se esperar que distribuições clássicas deixem sua condição de separabilidade inicial quando regidas por dinâmicas Hamiltonianas que contenham algum tipo de interação entre os graus de liberdade. A entropia linear clássica emerge então como uma proposta de medida quantitativa deste fenômeno. Quando a entropia clássica é nula, temos distribuições desacopladas, isto é, a probabilidade de encontrar o subsistema 1 no estado (q_1, p_1), não depende do estado (q_2, p_2) do subsistema 2. Por outro lado, se a entropia clássica é diferente de zero, então teremos probabilidades condicionais, isto é, para cada estado (q_2, p_2) do subsistema 2 associa-se uma distribuição de probabilidades para o subsistema 1.

Note-se ainda, que a entropia clássica não é um componente semiclássico da entropia quântica. Pelo menos não a priori. Apesar da definição clássica ter sido inspirada no formato matemático de seu análogo quântico, não houve, da nossa parte, qualquer tentativa (bem sucedida) de dedução da entropia clássica a partir de aproximações semiclássicas sobre a entropia quântica.

Nesse contexto, as semelhanças entre os resultados, observadas nos casos das interações bilineares, e as diferenças incontestáveis verificadas no caso da interação quártica, atestam apenas que nossa definição clássica é uma boa escolha para a medida do emaranhamento clássico. De fato, como ficou evidente no caso da interação quártica, a entropia clássica descreveu adequadamente a descoerência provocada pelo "enrolamento" das distribuições clássicas, assim como a entropia quântica descreveu adequadamente a auto-interferência do pacote quântico.

Finalmente, destacamos que a expressão *emaranhamento clássico* é de fato um abuso de linguagem, uma vez que a palavra emaranhamento é usada em geral para descrever um fenômeno puramente quântico. Por outro lado, ela cumpre o papel de chamar a atenção para o tipo de manifestação clássica que estudamos ao longo deste trabalho.

Capítulo 5

Sistemas Abertos

Neste capítulo faremos uma breve discussão sobre sistemas abertos, baseando-nos em princípios simples e bem conhecidos para este tipo de tratamento segundo o formalismo quântico. Por outro lado, proporemos o cálculo de uma equação mestra clássica na representação de Liouville-Markov por primeiros princípios, evitando argumentos heurísticos comumente usados. O estudo será baseado em um sistema simples e já bastante estudado do ponto de vista quântico: um oscilador harmônico em contato com um reservatório composto de N osciladores harmônicos, cada qual com uma frequência característica, com interação RWA "fraca" entre o oscilador e o banho. Finalizamos com a comparação entre a função de Wigner e a distribuição clássica no caso de amortecimento fraco e temperatura nula.

5.1 Dedução da Equação Mestra Clássica

Seja o sistema Hamiltoniano fechado [84]

$$\mathcal{H} = \underbrace{\omega_0 \left(\frac{p^2 + q^2}{2} \right)}_{\mathcal{H}_s} + \underbrace{\sum_{k=1}^{N} \omega_k \left(\frac{{p_k}^2 + {q_k}^2}{2} \right)}_{\mathcal{H}_r} + \underbrace{\sum_{k=1}^{N} g_k \left(q q_k + p p_k \right)}_{V}, \tag{5.1}$$

em que $\mathcal{H}_s$ denota a Hamiltoniana do sistema de interesse (no caso um oscilador harmônico), $\mathcal{H}_r$ denota o reservatório (formado por um conjunto de N osciladores harmônicos) e V é o termo de interação. Então, se chamarmos a Hamiltoniana livre de $\mathcal{H}_l$, isto é, se $\mathcal{H}_l = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_r$, poderemos escrever o operador Liouvilliano total do sistema na forma

$$\mathcal{L} \quad = \quad \mathcal{L}_l + \mathcal{L}_v, \tag{5.2}$$

com

$$\bullet\ \mathcal{L}_l = \mathcal{L}_s + \mathcal{L}_r = \{\mathcal{H}_s, \cdot\} + \{\mathcal{H}_r, \cdot\}$$
$$= \omega_0 \mathcal{L}_0(q,p) + \sum_{k=1}^{N} \omega_k \mathcal{L}_0(q_k, p_k), \tag{5.3}$$

$$\bullet\ \mathcal{L}_v = \{V, \cdot\}$$
$$= \underbrace{\left(\sum_k g_k q_k\right)}_{R_1} \underbrace{\partial_p}_{S_1} + \underbrace{\left(\sum_k g_k p_k\right)}_{R_2} \underbrace{(-\partial_q)}_{S_2} + \underbrace{(-p)}_{S_3} \underbrace{\left(\sum_k g_k \partial_{q_k}\right)}_{R_3} + \underbrace{q}_{S_4} \underbrace{\left(\sum_k g_k \partial_{p_k}\right)}_{R_4}$$
$$= \sum_{i=1}^{4} S_i R_i, \tag{5.4}$$

em que S_i e R_i denotam respectivamente operadores do sistema e do reservatório. A equação de Liouville pode agora ser escrita compactamente na forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (\mathcal{L}_l + \mathcal{L}_v)\,\rho, \tag{5.5}$$

cuja solução formal é

$$\rho(t) = e^{\mathcal{L}_l t}\rho(0) + e^{\mathcal{L}_l t} \int_0^t d\tau e^{-\mathcal{L}_l \tau} \mathcal{L}_v \rho(\tau), \tag{5.6}$$

sendo $\rho(t)$ uma função de todas as variáveis do espaço de fase. Supondo que estamos trabalhando no limite fracamente interagente, podemos fazer a iteração da equação acima apenas até a segunda ordem na perturbação e obter

$$\rho(t) \cong e^{\mathcal{L}_l t}\rho(0) + e^{\mathcal{L}_l t} \int_0^t d\tau\, e^{-\mathcal{L}_l \tau} \mathcal{L}_v e^{\mathcal{L}_l \tau} \rho(0) + e^{\mathcal{L}_l t} \int_0^t d\tau\, e^{-\mathcal{L}_l \tau} \mathcal{L}_v e^{\mathcal{L}_l \tau} \int_0^\tau d\tau'\, e^{-\mathcal{L}_l \tau'} \mathcal{L}_v e^{\mathcal{L}_l \tau'} \rho(0). \tag{5.7}$$

Em comparação com o processo quântico, fica evidente neste resultado a possibilidade de se definir algo como uma *representação de interação* dentro do formalismo estatístico. Isso pode ser feito através das seguintes propostas para "estados" e "operadores":

$$\begin{aligned} \rho^I(t) &= e^{-\mathcal{L}_l t}\rho(t), \\ \mathcal{O}^I(t)[\,\cdot\,] &= e^{-\mathcal{L}_l t}\mathcal{O}e^{\mathcal{L}_l t}[\,\cdot\,], \end{aligned} \tag{5.8}$$

sendo $[\,\cdot\,]$ uma indicação de que $\mathcal{O}^I(t)$ é um superoperador que atuará sobre uma função colocada no lugar do ponto. Com isso, a equação (5.7) pode ser reescrita como

$$\rho^I(t) \cong \rho(0) + \int_0^t d\tau\, \mathcal{L}_v^I(\tau)\rho(0) + \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau'\, \mathcal{L}_v^I(\tau)\mathcal{L}_v^I(\tau')\rho(0). \tag{5.9}$$

Note-se que os operadores na respresentação de interação dependem do tempo através da aplicação do operador Liouvilliano livre $\mathcal{L}_l$, o qual é composto da soma de todos os operadores de momento angular $\mathcal{L}_0(q_k, p_k)$ [vide eq. (2.38)], que comutam entre si, e cuja aplicação é conhecida dos capítulos anteriores. Então, realizando as devidas aplicações e usando as definições indicadas em (5.4), obtemos

$$\mathcal{L}_v^I(t) = \textstyle\sum_i S_i(t) R_i(t) = \vec{S}(t) \cdot \vec{R}(t), \tag{5.10}$$

$$\vec{S}(t) = \Big(S_1(t), S_2(t), S_3(t), S_4(t)\Big), \qquad \vec{R}(t) = \Big(R_1(t), R_2(t), R_3(t), R_4(t)\Big), \tag{5.11}$$

$$\begin{bmatrix} S_3(t) \\ -S_4(t) \\ -S_2(t) \\ S_1(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M[\omega_0 t] & \emptyset \\ \emptyset & M[\omega_0 t] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \\ \partial_q \\ \partial_p \end{bmatrix}, \tag{5.12}$$

$$\begin{bmatrix} R_1(t) \\ R_2(t) \\ R_3(t) \\ R_4(t) \end{bmatrix} = \sum_{k=1}^{N} g_k \begin{bmatrix} M[\omega_k t] & \emptyset \\ \emptyset & M[\omega_k t] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_k \\ p_k \\ \partial_{q_k} \\ \partial_{p_k} \end{bmatrix}, \tag{5.13}$$

sendo M a matriz de rotação bidimensional associada ao operador momento angular $\mathcal{L}_0$ e $\emptyset$ a matriz bidimensional com todos os elementos nulos. É importante que se diga que se todos os osciladores do banho estiverem em ressonância com o oscilador de interesse ($\omega_k = \omega_0$), então $[\mathcal{L}_l, \mathcal{L}_v] = 0$, de modo que $\mathcal{L}_v^I(t) = \mathcal{L}_v$ e, consequentemente, $e^{\mathcal{L}t} = e^{\mathcal{L}_l t} e^{\mathcal{L}_v t} = e^{\mathcal{L}_v t} e^{\mathcal{L}_l t}$.

O próximo passo é traçar o grau de liberdade do reservatório. Então, supondo a separabilidade inicial entre o sistema e o reservatório, isto é, $\rho(0) = \rho_s(0) \otimes \rho_r(0)$, partimos de (5.9) com (5.10) e escrevemos

$$\begin{aligned}
\rho_s^I(t) &= Tr_r[\rho^I(t)] \\
&\cong Tr_r[\rho(0)] + \int_0^t d\tau\, Tr_r\left[\mathcal{L}_v^I(\tau)\rho(0)\right] + \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau'\, Tr_r\left[\mathcal{L}_v^I(\tau)\mathcal{L}_v^I(\tau')\rho(0)\right] \\
&\cong \rho_s(0) + \sum_i \int_0^t d\tau\, S_i(\tau)\rho_s(0) Tr_r\left[R_i(\tau)\rho_r(0)\right] \\
&+ \sum_{i,j} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau'\, S_i(\tau) S_j(\tau')\rho_s(0) Tr_r\left[R_i(\tau)R_j(\tau')\rho_r(0)\right] \\
&\cong \rho_s(0) + \sum_i \int_0^t d\tau\, S_i(\tau) \left\langle R_i(\tau)\right\rangle \rho_s(0) \\
&+ \sum_{i,j} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau'\, S_i(\tau) S_j(\tau') \left\langle R_i(\tau)R_j(\tau')\right\rangle \rho_s(0),
\end{aligned} \tag{5.14}$$

em que

$$Tr_r[\cdot] = \prod_{k=1}^{N} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dq_k dp_k \right) [\cdot] \tag{5.15}$$

denota o traço sobre o reservatório. Chegamos ao ponto em que se torna necessário especificar o operador densidade do reservatório no instante inicial. A exemplo do que é feito na dedução da equação mestra quântica, utilizamos a distribuição de Boltzmann para um banho em equilíbrio à temperatura T,

$$\rho_r(0) = \rho_r(\mathcal{H}_r) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}_r}}{Tr_r\left[e^{-\beta \mathcal{H}_r}\right]}, \tag{5.16}$$

com $\beta = \frac{1}{kT}$. Note-se que neste formato, $\rho_r(0)$ é uma função par das variáveis do reservatório, de modo que $\langle R_i(\tau) \rangle = 0$. Estudemos agora as funções de correlação quadráticas considerando $R_i = \sum_k g_k r_k^i$ e $h_k = \omega_k \left(\frac{p_k^2 + q_k^2}{2} \right)$:

$$\langle R_i(\tau) R_j(\tau') \rangle = Tr_r \left\{ \left[\sum_k g_k^2 r_k^i(\tau) r_k^j(\tau') + \sum_{k \neq l} g_k g_l r_k^i(\tau) r_l^j(\tau') \right] \frac{\prod_j \left(e^{-\beta h_j} \right)}{Tr_r[e^{-\beta \mathcal{H}_r}]} \right\}, \tag{5.17}$$

nas quais separamos, na parcela à esquerda, as funções de correlação entre operadores do mesmo oscilador e à direita as correlações entre operadores de espaços diferentes. Acontece que neste último caso teremos novamente uma integral de funções ímpares em intervalos simétricos, de modo que este termo se anulará. Então, no termo restante, simplificamos as integrais que não são compatíveis com o oscilador k e obtemos

$$\langle R_i(\tau) R_j(\tau') \rangle = \sum_k g_k^2 \frac{\int dq_k dp_k \, r_k^i(\tau) r_k^j(\tau') e^{-\beta h_k}}{\int dq_k dp_k \, e^{-\beta h_k}}. \tag{5.18}$$

Utilizando as propriedades dos operadores Liouvillianos e usando o fato de que cada oscilador tem o volume de seu espaço de fase conservado, podemos escrever

$$\begin{aligned}
\langle R_i(\tau) R_j(\tau') \rangle &= \sum_k g_k^2 \frac{\int dq_k(\tau') dp_k(\tau') \left[e^{-\mathcal{L}_0(q_k,p_k)(\tau - \tau')} r_k^i(\tau') \right] r_k^j(\tau') e^{-\beta h_k(\tau')}}{\int dq_k dp_k \, e^{-\beta h_k}} \\
&= \sum_k g_k^2 \frac{\int dq_k dp_k \left[e^{-\mathcal{L}_0(q_k,p_k)(\tau - \tau')} r_k^i \right] r_k^j e^{-\beta h_k}}{\int dq_k dp_k \, e^{-\beta h_k}} \\
&= \sum_k g_k^2 \frac{\int dq_k dp_k \, r_k^i(\tau - \tau') r_k^j e^{-\beta h_k}}{\int dq_k dp_k \, e^{-\beta h_k}} \\
&= \langle R_i(\tau - \tau') R_j \rangle,
\end{aligned} \tag{5.19}$$

resultado idêntico àquele obtido para as funções de correlação quânticas. Este resultado aponta para o fato de que esses valores médios são *estacionários*, isto é, dependem apenas da diferença $\tau - \tau'$. Agora a equação (5.14) pode ser reescrita como

$$\rho_s^I(t) \cong \rho_s(0) + \sum_{i,j=1}^{4} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' \, S_i(\tau) S_j(\tau') \, \langle R_i(\tau - \tau') R_j \rangle \, \rho_s(0). \tag{5.20}$$

Vamos agora explicitar a dependência temporal dos operadores do sistema escrevendo-os na forma

$$S_i(\tau) = e^{\imath\omega_0\tau}s_i + e^{-\imath\omega_0\tau}s_i^*, \tag{5.21}$$

$$\begin{cases} s_1 = \dfrac{\partial_p + \imath\partial_q}{2}, & s_2 = \dfrac{-\partial_q + \imath\partial_p}{2}, \\ s_3 = \dfrac{-p - \imath q}{2}, & s_4 = \dfrac{q - \imath p}{2}, \end{cases} \tag{5.22}$$

de modo que

$$S_i(\tau)S_j(\tau) = e^{\imath\omega_0(\tau+\tau')}s_is_j + e^{-\imath\omega_0(\tau+\tau')}s_i^*s_j^* + e^{\imath\omega_0(\tau-\tau')}s_is_j^* + e^{-\imath\omega_0(\tau-\tau')}s_i^*s_j. \tag{5.23}$$

Agora fazemos uma mudança de variáveis,

$$\begin{cases} \eta = \tau - \tau', \\ \tau = \xi + \eta, \\ d\tau d\tau' = d\eta d\xi, \end{cases} \tag{5.24}$$

e voltamos à equação (5.20) para escrever

$$\begin{aligned} \rho_s^I(t) &\cong \rho_s(0) + \sum_{i,j=1}^{4} \int_0^t d\xi \int_0^{t-\xi} d\eta \\ &\times \left[s_is_je^{\imath\omega_0(2\xi+\eta)} + s_i^*s_j^*e^{-\imath\omega_0(2\xi+\eta)} + s_is_j^*e^{\imath\eta} + s_i^*s_je^{-\imath\eta} \right] \langle R_i(\eta)R_j\rangle \, \rho_s(0). \end{aligned} \tag{5.25}$$

A exemplo do que ocorre no formalismo quântico, aqui também precisamos fazer a aproximação Markoviana, a qual é uma condição suficiente para garantir que a energia que vai para o reservatório não volte para o sistema. Por definição, um sistema é Markoviano se o seu futuro é determinado apenas pelo seu presente e não pelo seu passado. Matematicamente, esta condição é implementada exigindo-se que as correlações do reservatório sejam "localizadas" temporalmente (ver figura 5.1), de modo que possamos aproximar

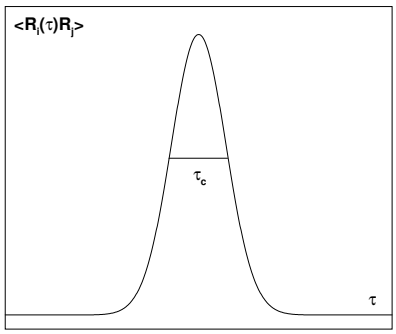

Figura 5.1: O sistema é Markoviano se $\tau_c \ll \tau$, isto é, se o tempo de correlação for muito menor que o tempo total da evolução.

$$\int_0^{t-\xi} d\eta[\ldots] \approx \int_0^{\infty} d\eta[\ldots]. \tag{5.26}$$

Então, com a aproximação Markoviana, obtemos

$$\rho_s^I(t) \quad \cong \quad \rho_s(0) + \sum_{i,j=1}^{4} \left[s_i s_j I(2\omega_0) w_{ij}^{+} + s_i^* s_j^* I(-2\omega_0) w_{ij}^{-} + s_i s_j^* w_{ij}^{+}\, t + s_i^* s_j w_{ij}^{-}\, t \right] \rho_s(0), \tag{5.27}$$

sendo

$$\begin{aligned} I(\omega) &= \int_0^t d\xi e^{\imath\omega\xi}, \\ w_{ij}^{\pm} &= \int_0^{\infty} d\eta e^{\pm\imath\omega_0} \langle R_i(\eta) R_j \rangle. \end{aligned} \tag{5.28}$$

Novamente, copiamos o procedimento quântico supondo que o período característico do sistema de interesse é muito menor que o tempo total da evolução ($\tau_0 = \frac{2\pi}{\omega_0} \ll t$), de modo que podemos escrever

$$I(2\omega_0) = \int_0^t d\xi e^{\pm\imath 2\omega_0\xi} \approx t\ \delta_{\omega_0,0} = 0. \tag{5.29}$$

Usando esta aproximação e tomando o limite de t pequeno (para se obter a derivada temporal) na equação (5.27), obtemos finalmente a equação mestra Markoviana clássica na representação de interação:

$$\blacktriangle \qquad \frac{\partial \rho_s^I(t)}{\partial t} = \sum_{i,j=1}^{4} \left(s_i\, s_j^*\, w_{ij}^{+} \;+\; s_i^*\, s_j\, w_{ij}^{-} \right) \rho_s^I(t), \tag{5.30}$$

para a qual foram definidas as *densidades espectrais*

$$w_{ij}^{\pm} = \int_0^{\infty} d\eta e^{\pm\imath\omega_0} \langle R_i(\eta) R_j \rangle \tag{5.31}$$

e as *funções de correlação* do reservatório

$$\langle R_i(\tau - \tau') R_j \rangle \quad = \quad \sum_k g_k^2 \frac{\int dq_k dp_k\, r_k^i(\tau - \tau') r_k^j e^{-\beta h_k}}{\int dq_k dp_k\, e^{-\beta h_k}}. \tag{5.32}$$

Utilizando a equação (5.8) podemos escrever a equação mestra clássica na "representação de Liouville":

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} = \mathcal{L}_s \rho_s + e^{\mathcal{L}_s t} \frac{\partial \rho_s^I}{\partial t}, \tag{5.33}$$

$$\blacktriangle \qquad \frac{\partial \rho_s(t)}{\partial t} = \mathcal{L}_s \rho_s(t) + e^{\mathcal{L}_s t}\left[\sum_{i,j=1}^{4}\Big(s_i\, s_j^*\, w_{ij}^{+} \;+\; s_i^*\, s_j\, w_{ij}^{-}\Big)\right] e^{-\mathcal{L}_s t}\rho_s(t). \tag{5.34}$$

Esta é portanto a equação mestra clássica na representação de Markov-Liouville. Note-se que a dinâmica reduzida foi mapeada na forma de uma evolução unitária (primeiro termo do lado direito do sinal de igual) mais um termo não-unitário oriundo da interação com o reservatório, sendo este último descrito também em termos de operadores do sistema de interesse [ver equação (5.22)].

5.2 O "Gato Frio" com Dissipação

Nesta seção vamos resolver explicitamente o problema clássico correspondente ao caso de um gato de Schrödinger evoluindo em contato com um reservatório a temperatura nula. Continuamos copiando a receita quântica para o cálculo. Começamos supondo que os modos do reservatório são muito próximos uns dos outros de forma que podemos definir uma densidade de modos $\eta(\omega_k)$ e subsituir o somátorio por uma integral de acordo com

$$\sum_k \{\ldots\} \qquad \rightarrow \qquad \int_0^\infty d\omega_k \eta(\omega_k)\{\ldots\}. \tag{5.35}$$

Além disso, utilizaremos a fórmula da *parte principal de Cauchy*:

$$\int_0^\infty e^{\pm \imath \Omega \tau} d\tau = \pi\delta(\Omega) \pm \mathcal{P}\frac{1}{\Omega}. \tag{5.36}$$

Com essas ferramentas e utilizando $T = 0$, realiza-se um longo e tedioso cálculo algébrico que leva ao seguinte resultado para a equação mestra clássica:

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \omega_0 \mathcal{L}_0 \rho(t) + e^{\mathcal{L}_0 t}\Big[\frac{\gamma}{2}\left(\partial_q q + \partial_p p\right) + \Delta\omega \mathcal{L}_0\Big] e^{-\mathcal{L}_0 t}\rho(t), \tag{5.37}$$

com

$$\gamma \;=\; 2\pi g^2(\omega_0)\eta(\omega_0), \tag{5.38}$$

$$\Delta\omega \;=\; -\mathcal{P}\int_0^\infty d\omega_k \eta(\omega_k)\frac{g^2(\omega_k)}{\omega_k - \omega_0}. \tag{5.39}$$

Nesta etapa abandonaremos o subíndice "s" para simplificarmos a notação. Agora, utilizando-se as propriedades do operador Liouvilliano de momento angular $\mathcal{L}_0$, mostra-se que

- $e^{\mathcal{L}_0 t}\mathcal{L}_0 e^{-\mathcal{L}_0 t}\rho(t) = \mathcal{L}_0\rho(t),$ (5.40)

- $e^{\mathcal{L}_0 t}\Big(\partial_q q + \partial_p p\Big)e^{-\mathcal{L}_0 t}\rho(t) = \Big(\partial_q q + \partial_p p\Big)\rho(t) = \Big(2 + q\partial_q + p\partial_p\Big)\rho(t).$ (5.41)

Finalmente, chega-se a

$$\blacktriangle \qquad \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \Big(\omega_0 + \Delta\omega\Big)\mathcal{L}_0\rho(t) + \frac{\gamma}{2}\Big(q\partial_q + p\partial_p + 2\Big)\rho(t), \tag{5.42}$$

em que $\Delta\omega$ é o análogo clássico do *Lamb shift*, o qual em geral é desprezado por ser muito menor que a frequência do oscilador. Notando-se que o dissipador $\mathcal{D} = q\partial_q + p\partial_p$ comuta com o Liouvilliano de momento angular $\mathcal{L}_0$, escreve-se a solução desta equação diferencial na forma

$$\rho(t) = e^{\gamma t} e^{\frac{\gamma}{2} t\mathcal{D}} e^{\omega_0 t\mathcal{L}_0} \rho_0(q,p). \tag{5.43}$$

Mas já conhecemos a aplicação de todos os operadores Liouvillianos envolvidos, de modo que podemos escrever

$$\blacktriangle \qquad \rho(t) = e^{\gamma t}\rho_0\Big(e^{\frac{\gamma t}{2}}\left[q\cos\omega_0 t - p\,\mathrm{sen}\,\omega_0 t\right], e^{\frac{\gamma t}{2}}\left[p\cos\omega_0 t + q\,\mathrm{sen}\,\omega_0 t\right]\Big). \tag{5.44}$$

Quanticamente a equação mestra do oscilador harmônico em contato com um banho a temperatura nula é bastante conhecida (ver apêndice B) e se apresenta na forma

$$\frac{d\widehat{\rho}}{dt} = \frac{[\widehat{H}_0, \widehat{\rho}]}{\imath\hbar} + \frac{\gamma}{2}\left(2\widehat{a}\widehat{\rho}\widehat{a}^\dagger - \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\widehat{\rho} - \widehat{\rho}\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\right), \tag{5.45}$$

com $\widehat{H}_0 = \hbar\omega_0\left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \frac{1}{2}\right)$. Mais interessante é observarmos a equivalente Fokker-Planck desta equação, isto é, sua projeção em estados coerentes:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}Q(\alpha^*,\alpha,t) &= -\imath\omega_0\Big(\alpha^*\partial_{\alpha^*} - \alpha\partial_\alpha\Big)Q(\alpha^*,\alpha,t) + \frac{\gamma}{2}\Big(\partial_{\alpha^*}\alpha^* + \partial_\alpha\alpha\Big)Q(\alpha^*,\alpha,t)\\ &+ \gamma\partial_{\alpha^*}\partial_\alpha Q(\alpha^*,\alpha,t),\end{aligned} \tag{5.46}$$

sendo $Q(\alpha^*,\alpha,t) = \langle\alpha|\widehat{\rho}(t)|\alpha\rangle$. Usando a parametrização usual, podemos reescrever esta equação em termos das variáveis de espaço de fase:

$$\blacktriangle \qquad \frac{\partial\mathcal{Q}}{\partial t} = \omega_0\mathcal{L}_0\mathcal{Q} + \frac{\gamma}{2}\Big(q\partial_q + p\partial_p + 2\Big)\mathcal{Q} + \frac{\gamma\hbar}{2}\nabla^2\mathcal{Q}, \tag{5.47}$$

sendo agora $\mathcal{Q} = \mathcal{Q}(q,p,t)$. Numa comparação imediata com a equação clássica (5.42), fica clara a diferença entre os dois formalismos: quanticamente temos um termo de difusão (dado pelo Laplaciano), o qual será o grande responsável pelo processo de descoerência, além de garantir a manutenção do princípio da incerteza.

Como estamos interessados em observar o processo de descoerência, nada mais adequado do que calcularmos a evolução de um estado de gato. Porém, qual é o correspondente clássico de um tal estado? O estado clássico mais próximo de um gato de Schrödinger seria uma mistura de dois estados Gaussianos com larguras mínimas, isto é, o oscilador tem a probabilidade de estar em qualquer um dos pontos sobre os quais estão centradas as Gaussianas clássicas mas jamais terá qualquer probabilidade de ser encontrado "tanto em um ponto quanto no outro", como é possível quanticamente. Assim, teremos inicialmente

$$\rho_0(q,p) = \frac{1}{2}\left(\frac{e^{-\frac{(q-q_0)^2}{\hbar}}e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\hbar}}}{\pi\hbar} + \frac{e^{-\frac{(q+q_0)^2}{\hbar}}e^{-\frac{(p+p_0)^2}{\hbar}}}{\pi\hbar}\right), \tag{5.48}$$

$$\widehat{\rho}(0) = \frac{|\alpha_0\rangle\langle\alpha_0| + |-\alpha_0\rangle\langle-\alpha_0| \pm |\alpha_0\rangle\langle-\alpha_0| \pm |-\alpha_0\rangle\langle\alpha_0|}{2\left(1 \pm e^{-2|\alpha_0|^2}\right)}, \tag{5.49}$$

sendo o sinal "+" utilizado para o caso de um gato par e "−" para um gato ímpar. Agora, utilizamos a fórmula (5.44) para evoluir a função clássica e obtemos $\widehat{\rho}(t)$ através de métodos usuais de superoperadores. No final, calculamos a função de Wigner definida por

$$W(q,p,t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx \left\langle q + \frac{x}{2}\middle|\widehat{\rho}(t)\middle| q - \frac{x}{2}\right\rangle e^{-\imath\frac{xp}{\hbar}} \tag{5.50}$$

para fazermos a comparação entre as distribuições no espaço de fase. A função Q poderia ter sido escolhida para a comparação, mas as intereferências não seriam vizualizadas tão facilmente. Na figura 5.2, as diferenças entre as distribuições quânticas e clássicas podem ser vistas num regime de amortecimento fraco ($\omega_0 \gg \gamma$). Note-se que em apenas um quarto do período do oscilador, as interferências praticamente desaparecem, e o resultado quântico fica muito parecido com o clássico. Porém, depois de alguns períodos do oscilador, uma outra diferença entre as distribuições se acentua: a distribuição clássica não conserva a largura do pacote e no equilíbrio ($t \to \infty$) tende a deltas de Dirac sobre as trajetórias clássicas. Essa parece ser a grande diferença em relação às propostas para equações mestras clássicas, que em geral são obtidas com argumentos heurísticos sobre as equações mestras quânticas ou sobre as equações de Fokker-Planck [85]. Além disso, aqui não temos qualquer termo de difusão na mestra clássica, o qual deve aparecer somente a temperaturas finitas e não-nulas. Nesse sentido, poderíamos dizer que a descoerência recupera o princípio da correspondência, no sentido de igualar as distribuições quântica e clássica? Parece que a resposta é não, pelo menos à temperatura nula. Mais uma vez, conforme é advogado "implicitamente" por Zurek, o princípio da correspondência é garantido se considerarmos o limite de altas temperaturas e baixa dissipação. Finalmente, é preciso dizer que através do nosso procedimento totalmente baseado em primeiros princípios, podemos deduzir a equação de Langevin clássica ao tomarmos as derivadas temporais das médias clássicas $\langle q(t)\rangle$ e $\langle p(t)\rangle$, como se espera de qualquer descrição de sistemas dissipativos [70].

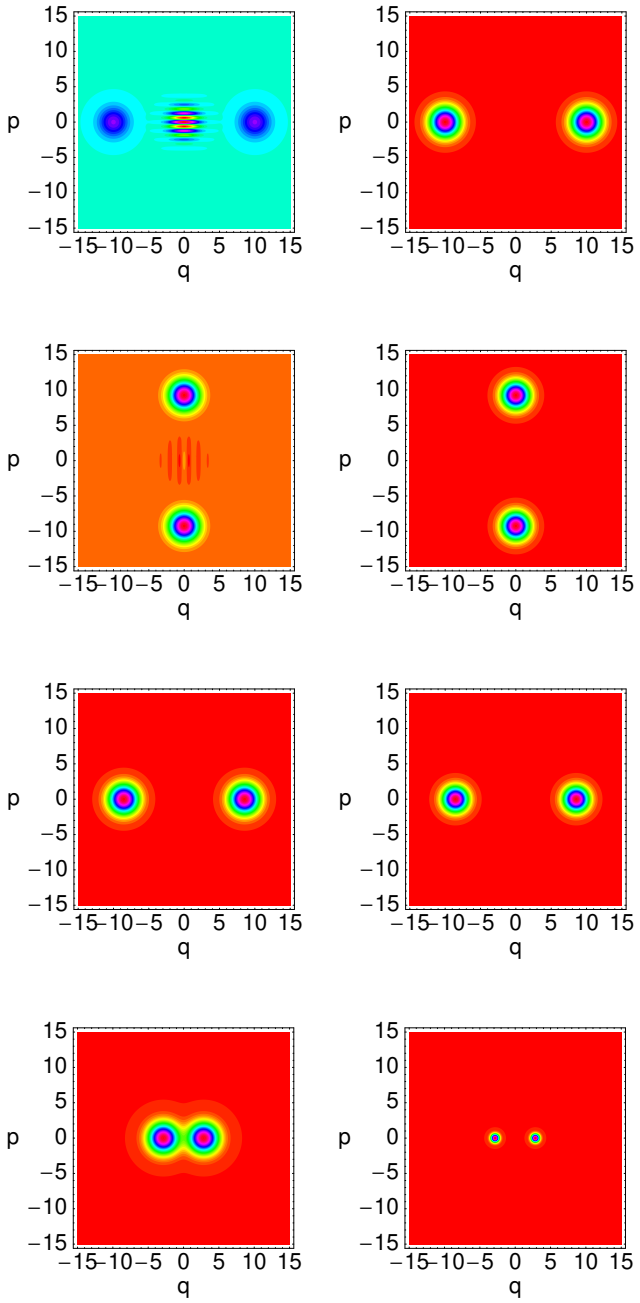

Figura 5.2: Função de Wigner (coluna da esquerda) e distribuição clássica (coluna da direita) nos intantes $t = 0$ (primeira linha), $t = \frac{\tau_0}{4}$ (segunda linha), $t = \frac{\tau_0}{2}$ (terceira linha) e $t = 4\tau_0$ (quarta linha), para $p_0 = 0$, $q_0 = 10$, $\hbar = 4$, $\gamma = 1$, $\omega_0 = 10$ e $\tau_0 = \frac{2\pi}{\omega_0}$.

Capítulo 6

Escala Temporal Clássica

Neste capítulo faremos uma discussão a respeito da escala de Ehrenfest, ou seja, a escala em que vale o princípio da correspondência. Conforme notou Ehrenfest (ver artigo traduzido no apêndice A), para distribuições suficientemente localizadas, o centróide quântico evolui segundo as equações de movimento clássicas. Depois desse tempo de quebra de correspondência, efeitos essencialmente quânticos devem começar a acontecer. Mas então o que dizer dos sistemas macroscópicos, para os quais as equações de movimento clássicas "sempre" valem? Como pode haver a quebra da correspondência para tais sistemas? A reposta para esta questão foi dada por Zurek que propôs que a interação com o meio ambiente deve liquidar interferências quânticas numa escala de tempo pequeníssima, menor que a de Ehrenfest. Assim, antes do tempo de quebra de correspondência, ocorre a destruição das interferências, e o princípio da correspondência continua válido. Por outro lado, isso também não estaria nos dizendo que em situações experimentais em que somos limitados pelo tempo de descoerência, podemos utilizar equações de movimento clássicas? Seja como for, a estimativa dessas escalas é de vital interesse para o entendimento da transição entre os mundos quântico e clássico. Nesse sentido, propomos uma receita bastante simples (via estados coerentes) para a estimativa do tempo de Ehrenfest em sistemas integráveis e mostramos, em um exemplo simples, que o método de fato reproduz resultados conhecidos. Antes, entretanto, estudamos a questão da quantização simétrica e ordenada, propondo operadores Liouvillianos que quantizam e ordenam operadores bosônicos.

6.1 Operador de Quantização *Simétrica e Ordenada*

Sejam as variáveis clássicas a e b definidas por

$$a = \langle\alpha|\widehat{A}|\alpha\rangle \qquad \text{e} \qquad b = \langle\alpha|\widehat{B}|\alpha\rangle, \tag{6.1}$$

em que $|\alpha\rangle$ é um estado coerente e $\widehat{A}$ e $\widehat{B}$ são operadores que satisfazem a relação de comutação $[\widehat{A},\widehat{B}] = c\mathbf{1}$, sendo c um número comutativo. Este é o caso, por exemplo, do par canônico $(\widehat{Q},\widehat{P})$ e dos operadores bosônicos $(\widehat{a},\widehat{a}^\dagger)$. Seja agora $\mathbb{Q}$ o *operador de quantização simétrica e ordenada* tal que

$$\mathbb{Q}(a) = \widehat{A} \qquad \text{e} \qquad \mathbb{Q}(b) = \widehat{B}. \tag{6.2}$$

Note-se que $\mathbb{Q}$ é na realidade uma aplicação que mapeia números comutativos em operadores quânticos, de modo que o termo "operador" acaba sendo um abuso de linguagem. Para a

quantização simétrica e ordenada de monômios clássicos da forma $a^n b^m$, propomos o seguinte formato para o operador $\mathbb{Q}$:

$$\blacktriangle \qquad \mathbb{Q}(a^n\, b^m) = \mathcal{S}_{\mathbb{Q}(a),\mathbb{Q}(b)}\, \mathbb{Q}(a)^n\, \mathbb{Q}(b)^m, \tag{6.3}$$

no qual definimos o *simetrizador* $\mathcal{S}$ como

$$\blacktriangle \qquad \mathcal{S}_{\widehat{X},\widehat{Y}} = e^{-\frac{1}{2}[\widehat{X},\widehat{Y}]\partial_{\widehat{X}}\partial_{\widehat{Y}}}, \tag{6.4}$$

descrito em termos dos índices mudos $\widehat{X}$ e $\widehat{Y}$ que representam os operadores $\widehat{A}$ e $\widehat{B}$. Note-se que a proposta (6.3) satisfaz as condições (6.2) impostas ao operador $\mathbb{Q}$. Na notação que estamos usando, $\partial_{\widehat{X}\ (\widehat{Y})}$ denota a derivada parcial em relação ao operador $\widehat{X}$ $(\widehat{Y})$ e, portanto, $\mathcal{S}$ é essencialmente um superoperador "clássico" uma vez que $[\partial_{\widehat{X}}, \partial_{\widehat{Y}}] = [\partial_{\widehat{X}}, \widehat{Y}] = [\widehat{X}, \partial_{\widehat{Y}}] = 0$. Apesar do formato compacto das relações (6.3) e (6.4), devemos sempre aplicar $\mathcal{S}_{\widehat{X},\widehat{Y}}$ na sua forma expandida, isto é,

$$\mathcal{S}_{\widehat{X},\widehat{Y}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{1}{2}[\widehat{X},\widehat{Y}]\right)^k}{k!} \partial_{\widehat{X}}^k \partial_{\widehat{Y}}^k. \tag{6.5}$$

Se por um lado a simetrização é feita com o auxílio do operador $\mathcal{S}$, o ordenamento é obtido automaticamente através da escolha do par (a, b) em cada situação, como veremos posteriormente através de um exemplo simples. De fato, o resultado da quantização não deve depender, por exemplo, das escolhas $(a, b) = (q, p)$ ou $(a, b) = (p, q)$. Partindo desta consideração e efetuando simples trocas de índices na equação (6.3), somos levados a

$$\begin{aligned} \mathbb{Q}(a^n\, b^m) &= \mathbb{Q}(b^m\, a^n) \\ \therefore\ \mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}}\, \widehat{A}^n\, \widehat{B}^m &= \mathcal{S}_{\widehat{B},\widehat{A}}\, \widehat{B}^m\, \widehat{A}^n. \end{aligned} \tag{6.6}$$

Como consequência, obtemos as regras de ordenamento

$$\blacktriangle \qquad \widehat{A}^n\, \widehat{B}^m = \mathcal{S}^2_{\widehat{B},\widehat{A}}\, \widehat{B}^m\, \widehat{A}^n, \tag{6.7}$$

$$\blacktriangle \qquad \widehat{B}^m\, \widehat{A}^n = \mathcal{S}^2_{\widehat{A},\widehat{B}}\, \widehat{A}^n\, \widehat{B}^m, \tag{6.8}$$

nas quais usamos a propriedade $\mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}}\mathcal{S}_{\widehat{B},\widehat{A}} = \mathcal{S}_{\widehat{B},\widehat{A}}\mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}} = 1$, que atesta que $\mathcal{S}$ é um superoperador unitário. Além disso, utilizando as fórmulas de ordenamento (6.7) e (6.8) vemos que a proposta de quantização leva sempre a uma expansão *hermiteana* em termos de $\widehat{A}$ e $\widehat{B}$:

$$\begin{aligned} \mathbb{Q}(a^n\, b^m) &= \mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}} \left(\widehat{A}^m \widehat{B}^m\right) = \frac{\mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}} \left(\widehat{A}^n \widehat{B}^m\right) + \mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}} \left(\widehat{A}^n \widehat{B}^m\right)}{2} \\ &= \frac{\mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}} \left(\widehat{A}^n \widehat{B}^m\right) + \mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}} \left(\mathcal{S}^2_{\widehat{B},\widehat{A}}\, \widehat{B}^m \widehat{A}^n\right)}{2} = \frac{\mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}} \left(\widehat{A}^n \widehat{B}^m\right) + \mathcal{S}_{\widehat{B},\widehat{A}} \left(\widehat{B}^m \widehat{A}^n\right)}{2} \\ &= \frac{\mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}} \left(\widehat{A}^n \widehat{B}^m\right) + \left[\mathcal{S}_{\widehat{A},\widehat{B}} \left(\widehat{A}^n \widehat{B}^m\right)\right]^\dagger}{2} = \text{expansão hermiteana}, \end{aligned} \tag{6.9}$$

na qual lembramos que $\mathcal{S}$ é um superoperador clássico e por isso não tem sua posição trocada quando calculamos o adjunto.

Há que se ressaltar que as fórmulas (6.7) e (6.8) já apareceram na literatura, mas em formas e contextos diferentes. Louisell [86] tem a seguinte proposta para ordenar os operadores bosônicos usuais. Define-se em primeiro lugar o operador de ordenamento normal $\widehat{N}$ de modo que

$$\widehat{N}\left\{\widehat{a}^n\left(\widehat{a}^\dagger\right)^m\right\} = \left(\widehat{a}^\dagger\right)^m\widehat{a}^n. \tag{6.10}$$

Então, a fórmula de ordenamento é dada afinal por

$$\widehat{a}^n\left(\widehat{a}^\dagger\right)^m = \widehat{N}\left\{(\widehat{a}+\partial_{\widehat{a}^\dagger})^n\left(\widehat{a}^\dagger\right)^m\right\}. \tag{6.11}$$

Utilizando a fórmula do operador deslocamento ($e^{\alpha\partial_x}f(x) = f(x+\alpha)$), podemos mostrar que nossa proposta é idêntica àquela de Louisell. De fato, partindo de (6.11), escrevemos

$$\begin{aligned}\widehat{a}^n\left(\widehat{a}^\dagger\right)^m &= \widehat{N}\left\{(\widehat{a}+\partial_{\widehat{a}^\dagger})^n\left(\widehat{a}^\dagger\right)^m\right\}\\ &= \widehat{N}\left\{e^{\partial_{\widehat{a}}\partial_{\widehat{a}^\dagger}}\left[\widehat{a}^n\left(\widehat{a}^\dagger\right)^m\right]\right\} = e^{\partial_{\widehat{a}}\partial_{\widehat{a}^\dagger}}\left[\widehat{N}\left\{\widehat{a}^n\left(\widehat{a}^\dagger\right)^m\right\}\right]\\ &= e^{\partial_{\widehat{a}}\partial_{\widehat{a}^\dagger}}\left[\left(\widehat{a}^\dagger\right)^m\widehat{a}^n\right],\end{aligned} \tag{6.12}$$

que é exatamente o resultado que se obtém através da fórmula (6.3).

6.1.1 Um exemplo simples

Como tais regras foram deduzidas de forma bastante informal e simplesmente apresentadas sem qualquer justificativa, vamos fazer um cálculo bastante simples ilustrando a aplicação de $\mathbb{Q}$. Seja o produto clássico q^2p. O processo usual de simetrização e ordenamento utilizando a relação de comutação $\widehat{Q}\widehat{P}-\widehat{P}\widehat{Q} = \imath\hbar$, levaria a

$$\begin{aligned}q^2p \;\rightarrow\; & \frac{\widehat{Q}^2\widehat{P}+\widehat{P}\widehat{Q}^2+\widehat{Q}\widehat{P}\widehat{Q}}{3} = \frac{\widehat{Q}^2\widehat{P}+\left(\widehat{Q}\widehat{P}-\imath\hbar\right)\widehat{Q}+\widehat{Q}\left(\widehat{Q}\widehat{P}-\imath\hbar\right)}{3}\\ = & \frac{2\widehat{Q}^2\widehat{P}+\widehat{Q}\left(\widehat{Q}\widehat{P}-\imath\hbar\right)-2\imath\hbar\widehat{Q}}{3} = \frac{3\widehat{Q}^2\widehat{P}-3\imath\hbar\widehat{Q}}{3}\\ = & \widehat{Q}^2\widehat{P}-\imath\hbar\,\widehat{Q},\end{aligned} \tag{6.13}$$

em que se propõe inicialmente um operador *totalmente simétrico* [87], e se obtém ao final um formato simétrico e devidamente ordenado. Agora, utilizando a fórmula (6.3), com a escolha $(a,b) = (q,p)$, obtemos

$$\begin{aligned}\mathbb{Q}(q^2p) &= \underbrace{\left[1+\left(-\frac{\imath\hbar}{2}\right)\partial_{\widehat{Q}}\partial_{\widehat{P}}+\frac{1}{2}\left(-\frac{\imath\hbar}{2}\right)^2\partial^2_{\widehat{Q}}\partial^2_{\widehat{P}}+\cdots\right]}_{\mathcal{S}_{\widehat{Q},\widehat{P}}}\widehat{Q}^2\widehat{P}\\ &= \widehat{Q}^2\widehat{P}-\imath\hbar\,\widehat{Q}.\end{aligned} \tag{6.14}$$

Finalizamos este seção enfatizando que o operador $\mathbb{Q}$ promove a quantização do monômio clássico através de correções em $\hbar$ oriundas da não comutatividade dos operadores envolvidos. De fato, se não aparecer qualquer produto de operadores, então o processo de quantização leva a funções de operadores idênticas às clássicas.

6.2 Quantização na Escala Temporal Clássica

De acordo com os livros didáticos de mecânica quântica, quando queremos estudar o análogo quântico de um sistema que tem uma Hamiltoniana clássica bem definida, devemos "quantizar" o sistema clássico através das regras de quantização usuais, ou seja, devemos trocar (q,p) por operadores $(\widehat{Q},\widehat{P})$ que agora obedecem a uma relação de comutação: $[\widehat{Q},\widehat{P}] = \imath\hbar$. Assim, com o auxílio da equação de Schrödinger, podemos dizer que toda a dinâmica quântica fica estabelecida para o tal sistema, uma vez que a quantização define o próprio Hamiltoniano quântico.

Diante desse quadro, podemos nos colocar algumas questões. (1) A quantização é feita na representação de Heisenberg ou de Schrödinger? (2) Há alguma diferença? (3) Normalmente, o caminho que percorremos é: quantizamos e depois resolvemos as equações de movimento de Heisenberg. Mas o que aconteceria se resolvêssemos classicamente as equações de movimento e depois fizéssemos a quantização? (4) Há afinal algum sentido nessas questões?

Como nos falta certeza sobre qualquer um dos pontos, vamos optar por seguir o caminho mais simples, o usual: faremos algum cálculo e tentaremos interpretar o resultado. Vamos em primeiro lugar atacar o ponto (3), isto é, vamos supor que temos uma equação de movimento clássica e então faremos sua quantização através do procedimento ilustrado na seção anterior. No final, tomaremos o valor esperado em estados coerentes e nos perguntaremos se estamos diante do resultado previsto pela mecânica quântica usual.

6.2.1 Quantização de Funções Clássicas

Vamos então utilizar o operador de quantização $\mathbb{Q}$ para quantizar uma função clássica e calcular seu valor esperado em estados coerentes. Seja então $\mathcal{O}$ uma função das variáveis q e p do espaço de fase clássico, que pode ser expandida em série de Taylor na seguinte forma:

$$\mathcal{O}(q,p,t) = \sum_{n,m=0}^{\infty} c_{nm}(t) q^n p^m. \tag{6.15}$$

De acordo com nossa proposta de quantização, temos duas direções possíveis a seguir. Na tentativa de dar confiabilidade às fórmulas de quantização, vamos percorrer ambos os caminhos e mostrar que o resultado final é o mesmo.

Processo 1

Como estamos interessados em calcular valores esperados em estados coerentes, é mais simples realizarmos o processo de quantização de (α,α^*) para $(\widehat{a},\widehat{a}^\dagger)$. Neste caso, com a escolha adequada para o ordenamento, teremos uma forma final ordenada segundo nossas necessidades, o que facilitará enormemente o cálculo. Utilizemos então as transformações bem conhecidas

$$\begin{cases} \alpha = \dfrac{q+\imath p}{\sqrt{2\hbar}} \\ \\ \alpha^* = \dfrac{q-\imath p}{\sqrt{2\hbar}} \end{cases} \qquad \text{e} \qquad \begin{cases} q = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2}}\,(\alpha+\alpha^*) \\ \\ p = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2}}\left(\dfrac{\alpha-\alpha^*}{\imath}\right). \end{cases} \tag{6.16}$$

Agora, reescrevemos $\mathcal{O}$ de forma "ordenada" (como pressupõe nosso método) em termos de α e α^* utilizando expansões binomiais:

$$\mathcal{O} = \sum_{n,m=0}^{\infty} h_{nm}(t) \sum_{k=0}^{n}\sum_{l=0}^{m} \binom{n}{k}\binom{m}{l} (\alpha^*)^{n-k+m-l}\, \alpha^{k+l}, \tag{6.17}$$

em que definimos $h_{nm}(t) = \frac{c_{nm}(t)}{\imath}\left(\sqrt{\hbar/2}\right)^{n+m}$. Apliquemos então a regra de quantização para os operadores bosônicos:

$$\widehat{\mathcal{O}} = \sum_{n,m=0}^{\infty} h_{nm}(t) \sum_{k=0}^{n}\sum_{l=0}^{m} \binom{n}{k}\binom{m}{l} e^{\frac{1}{2}\partial_{\widehat{a}^\dagger}\partial_{\widehat{a}}} \left[\left(\widehat{a}^\dagger\right)^{n-k+m-l} \widehat{a}^{k+l}\right]. \tag{6.18}$$

Finalmente, calculamos o valor esperado em estados coerentes de modo a obter

$$\begin{aligned}
\frac{\langle\alpha_1|\widehat{\mathcal{O}}|\alpha_2\rangle}{\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle} &= \sum_{n,m=0}^{\infty} h_{nm}(t) \sum_{k=0}^{n}\sum_{l=0}^{m} \binom{n}{k}\binom{m}{l} \frac{\langle\alpha_1| e^{\frac{1}{2}\partial_{\widehat{a}^\dagger}\partial_{\widehat{a}}} \left[\left(\widehat{a}^\dagger\right)^{n-k+m-l} \widehat{a}^{k+l}\right] |\alpha_2\rangle}{\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle} \\
&= \sum_{n,m=0}^{\infty} h_{nm}(t) \sum_{k=0}^{n}\sum_{l=0}^{m} \binom{n}{k}\binom{m}{l} e^{\frac{1}{2}\partial_{\alpha_1^*}\partial_{\alpha_2}} \left[(\alpha_1^*)^{n-k+m-l}\, \alpha_2^{k+l}\right] \\
&= e^{\frac{1}{2}\partial_{\alpha_1^*}\partial_{\alpha_2}} \sum_{n,m=0}^{\infty} c_{nm}(t) \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\,(\alpha_2 + \alpha_1^*)\right]^n \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1^*}{\imath}\right)\right]^m \\
&= e^{\frac{1}{2}\partial_{\alpha_1^*}\partial_{\alpha_2}} \sum_{n,m=0}^{\infty} c_{nm}(t) \left[\frac{\langle\alpha_1|\widehat{Q}|\alpha_2\rangle}{\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle}\right]^n \left[\frac{\langle\alpha_1|\widehat{P}|\alpha_2\rangle}{\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle}\right]^m,
\end{aligned}$$

$$\blacktriangle \qquad \frac{\langle\alpha_1|\widehat{\mathcal{O}}|\alpha_2\rangle}{\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle} = e^{\frac{1}{2}\partial_{\alpha_1^*}\partial_{\alpha_2}} \mathcal{O}\left(\frac{\langle\alpha_1|\widehat{Q}|\alpha_2\rangle}{\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle}, \frac{\langle\alpha_1|\widehat{P}|\alpha_2\rangle}{\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle}, t\right). \tag{6.19}$$

Este resultado pode ser escrito em termos das variáveis do espaço de fase q_k e p_k, mas o resultado é pouco esclarecedor. Muito mais instrutivo e útil é o resultado do caso particular em que $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_0$:

$$\blacktriangle \qquad \langle\alpha_0|\widehat{\mathcal{O}}|\alpha_0\rangle = e^{\frac{1}{2}\partial_{\alpha_0^*}\partial_{\alpha_0}} \mathcal{O}\left(\langle\alpha_0|\widehat{Q}|\alpha_0\rangle, \langle\alpha_0|\widehat{P}|\alpha_0\rangle, t\right), \tag{6.20}$$

que pode ser reescrito em função das variáveis do espaço de fase [vide transformações (6.16)] na forma

$$\blacktriangle \qquad \langle\alpha_0|\widehat{\mathcal{O}}|\alpha_0\rangle = e^{\frac{\hbar}{4}\nabla_0^2} \mathcal{O}\left(q_0, p_0, t\right), \tag{6.21}$$

sendo $\nabla_0^2 = \partial_{q_0}^2 + \partial_{p_0}^2$ e $\langle\alpha_0|\binom{\widehat{Q}}{\widehat{P}}|\alpha_0\rangle = \binom{q_0}{p_0}$.

Processo 2

Agora o cálculo será feito através da quantização de q e p diretamente. Partimos da função clássica (6.15), aplicamos o operador $\mathbb{Q}$ e em seguida fazemos a transformação usual para os

operadores bosônicos:

$$\begin{aligned}\widehat{\mathcal{O}} &= \sum_{n,m}^{\infty} c_{n,m}(t) e^{-\frac{\imath\hbar}{2}\partial_{\widehat{Q}}\partial_{\widehat{P}}} \left(\widehat{Q}^n \widehat{P}^m\right) \\ &= \sum_{n,m}^{\infty} h_{n,m}(t) e^{\frac{1}{4}\left(\partial^2_{\widehat{a}} - \partial^2_{\widehat{a}^\dagger}\right)} \left[\left(\widehat{a}+\widehat{a}^\dagger\right)^n \left(\widehat{a}-\widehat{a}^\dagger\right)^m\right], \end{aligned} \tag{6.22}$$

sendo que $h_{n,m}(t)$ foi definido no processo 1. Os operadores envolvidos nos cálculos até aqui estão escritos na representação de Schrödinger, pois não dependem do tempo. A seguir, notamos que

$$\begin{aligned}\left(\widehat{a}\pm\widehat{a}^\dagger\right)^n &= \mathcal{S}_{\widehat{a}^\dagger,\widehat{a}}\left[\left(\widehat{a}\pm\widehat{a}^\dagger\right)^n\right]_{\text{“clássico”}} \\ &= \sum_{k=0}^{n} (\pm 1)^{n-k} \binom{n}{k} e^{\frac{1}{2}\partial_{\widehat{a}}\partial_{\widehat{a}^\dagger}} \left(\widehat{a}^{\dagger\, n-k}\widehat{a}^k\right). \end{aligned} \tag{6.23}$$

Então,

$$\begin{aligned}\widehat{\mathcal{O}} &= \sum_{n,m=0}^{\infty}\sum_{k,l=0}^{n,m} (-1)^{m-l} h_{n,m} \binom{n}{k}\binom{m}{l} e^{\frac{1}{4}\left(\partial^2_{\widehat{a}} - \partial^2_{\widehat{a}^\dagger}\right)} \\ &\quad \times e^{\frac{1}{2}\partial_{\widehat{a}_2}\partial_{\widehat{a}_1^\dagger}} e^{\frac{1}{2}\partial_{\widehat{a}_4}\partial_{\widehat{a}_3^\dagger}} \left(\widehat{a}_1^{\dagger\, n-k}\widehat{a}_2^k \widehat{a}_3^{\dagger\, m-l}\widehat{a}_4^l\right), \end{aligned} \tag{6.24}$$

em que utilizamos subíndices numéricos para identificar as aplicações dos operadores Liouvillianos. Para obter a forma normal definitiva, utilizamos a fórmula (6.8) para escrever

$$\widehat{a}_2^k \widehat{a}_3^{\dagger\, m-l} = e^{\partial_{\widehat{a}_2}\partial_{\widehat{a}_3^\dagger}} \left(\widehat{a}_3^{\dagger\, m-l}\widehat{a}_2^k\right). \tag{6.25}$$

Com isso, obtemos

$$\begin{aligned}\widehat{\mathcal{O}} &= \sum_{n,m}^{\infty}\sum_{k,l=0}^{n,m} (-1)^{m-l} h_{n,m} \binom{n}{k}\binom{m}{l} e^{\frac{1}{4}\left(\partial^2_{\widehat{a}} - \partial^2_{\widehat{a}^\dagger}\right)} \\ &\quad \times e^{\frac{1}{2}\partial_{\widehat{a}_2}\partial_{\widehat{a}_1^\dagger}} e^{\frac{1}{2}\partial_{\widehat{a}_4}\partial_{\widehat{a}_3^\dagger}} e^{\partial_{\widehat{a}_2}\partial_{\widehat{a}_3^\dagger}} \left(\widehat{a}_1^{\dagger\, n-k}\widehat{a}_3^{\dagger\, m-l}\widehat{a}_2^l \widehat{a}_4^k\right). \end{aligned} \tag{6.26}$$

Estamos prontos para tomar o valor esperado em estados coerentes. Como os operadores Liouvillianos não alteram o ordenamento, ocorrerá algo como

$$\left\langle \alpha_1 \left| \mathcal{S}^k_{\widehat{a}^\dagger,\widehat{a}}\left(\widehat{a}^{\dagger\, n}\widehat{a}^m\right)\right| \alpha_2\right\rangle = \langle\alpha_1|\alpha_2\rangle e^{\frac{k}{2}\partial_{\alpha_1^*}\partial_{\alpha_2}}\left(\alpha_1^{*\, n}\alpha_2^m\right), \tag{6.27}$$

de modo que poderemos reorganizar alguns somatórios e obter a forma final

▲ $$\frac{\langle\alpha_1|\widehat{\mathcal{O}}|\alpha_2\rangle}{\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle} = e^{\frac{1}{4}\left(\partial^2_{\alpha_2} - \partial^2_{\alpha_1^*}\right)} \sum_{n,m=0}^{\infty} c_{n,m}(t) \left\{ e^{\partial_a\partial_d} e^{\frac{1}{2}\partial_a\partial_b} e^{\frac{1}{2}\partial_c\partial_d} \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a+b)\right]^n \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\frac{(c-d)}{\imath}\right]^m \right\}_{\substack{a=c=\alpha_2 \\ b=d=\alpha_1^*}} \tag{6.28}$$

Apesar de ser aparentemente diferente de (6.19), podemos mostrar que os resultados são idênticos. Façamos a conta para o caso em que $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_0 = \frac{q_0 + \imath p_0}{\sqrt{\hbar}}$, partindo da seguinte transformação de variáveis:

$$\begin{pmatrix} q_x \\ p_x \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\imath & \imath \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \qquad \text{e} \qquad \begin{pmatrix} q_y \\ p_y \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\imath & \imath \end{bmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}. \tag{6.29}$$

Assim, teremos

- $\partial_a \partial_b = \dfrac{\hbar}{2} \left(\partial^2_{q_x} + \partial^2_{p_x} \right),$
- $\partial_c \partial_d = \dfrac{\hbar}{2} \left(\partial^2_{q_y} + \partial^2_{p_y} \right),$
- $\partial_a \partial_d = \dfrac{\hbar}{2} \left[\left(\partial_{q_x} \partial_{q_y} + \partial_{p_x} \partial_{p_y} \right) + \imath \left(\partial_{q_x} \partial_{p_y} - \partial_{q_y} \partial_{p_x} \right) \right].$

Devido à transformação, esses superoperadores agirão agora sobre o termo $q_x^n p_y^m$, sendo que depois da aplicação devemos fazer $q_x = q_y = q_0$ e $p_x = p_y = p_0$. É preciso notar entretanto que operadores do tipo ∂_{q_y} e ∂_{p_x} não têm em "quem" atuar, de modo que podemos reescrever a equação (6.28) como

$$\begin{aligned} \langle \alpha_0 | \widehat{\mathcal{O}} | \alpha_0 \rangle &= e^{-\frac{\imath\hbar}{2} \partial_{q_0} \partial_{p_0}} \sum_{n,m=0}^{\infty} c_{n,m}(t) \left\{ e^{\frac{\imath\hbar}{2} \partial_{q_x} \partial_{p_y}} e^{\frac{\hbar}{4} \partial^2_{q_x}} e^{\frac{\hbar}{4} \partial^2_{p_y}} \left(q_x^n p_y^m \right) \right\}_{\substack{q_x = q_0 \\ p_y = p_0}} \\ &= \sum_{n,m=0}^{\infty} c_{n,m}(t) \underbrace{e^{-\frac{\imath\hbar}{2} \partial_{q_0} \partial_{p_0}} e^{\frac{\imath\hbar}{2} \partial_{q_0} \partial_{p_0}}}_{1} e^{\frac{\hbar}{4} \left(\partial^2_{q_0} + \partial^2_{p_0} \right)} \left(q_0^n p_0^m \right) \end{aligned}$$

$$\blacktriangle \qquad \langle \alpha_0 | \widehat{\mathcal{O}} | \alpha_0 \rangle = e^{\frac{\hbar}{4} \nabla_0^2} \mathcal{O}(q_0, p_0, t), \tag{6.30}$$

sendo $\nabla_0^2 = \partial^2_{q_0} + \partial^2_{p_0}$ e $\langle \alpha_0 | \binom{\widehat{Q}}{\widehat{P}} | \alpha_0 \rangle = \binom{q_0}{p_0}$. Esta fórmula sim é notoriamente idêntica à (6.21).

Concluímos esta seção enfatizando o processo: partimos de uma função clássica, com dependência temporal supostamente conhecida, que foi expandida em série de Taylor e em seguida quantizada de acordo com nossas receitas e através de dois processos distintos. Em seguida, tomamos o valor esperado em estados coerentes, os quais são estados Gaussianos, e obtivemos o resultado final sem qualquer menção ou imposição sobre a dependência temporal da função clássica.

6.2.2 Limite Clássico Via Estados Coerentes

Algumas fórmulas interessantes podem ser obtidas com o auxílio das fórmulas de quantização derivadas da proposta do operador $\mathbb{Q}$. Através delas e tomando-se o valor esperado em estados coerentes, mostra-se que

$$\left\langle e^{\frac{\imath\hbar}{2} \partial_{\widehat{Q}} \partial_{\widehat{P}}} \widehat{Q}^n \widehat{P}^m \right\rangle = e^{\frac{\hbar}{4} \nabla_0^2} q_0^n p_0^m, \tag{6.31}$$

como já fizemos há pouco em outro contexto. Por outro lado, pode-se mostrar ainda, que o valor esperado do produto não-hermiteano $\widehat{Q}^n \widehat{P}^m$ é dado por

$$\left\langle \widehat{Q}^n \widehat{P}^m \right\rangle = e^{\frac{\hbar}{4} \nabla_0^2} \left(e^{\frac{\imath\hbar}{2} \partial_{q_0} \partial_{p_0}} q_0^n p_0^m \right). \tag{6.32}$$

Este resultado é interessante porque traz explicitamente (entre parênteses) a transformada de Weyl [88, 89] do operador cujo valor esperado se está calculando. Uma consequência direta da equação (6.32) é que

$$\left\langle \frac{[\widehat{Q}^n, \widehat{P}^m]}{\imath\hbar} \right\rangle = e^{\frac{\hbar}{4}\nabla_0^2} \frac{2}{\hbar} \operatorname{sen}\left(\frac{\hbar}{2}\partial_{q_0}\partial_{p_0}\right) q_0^n p_0^m. \tag{6.33}$$

Há principalmente dois pontos a serem destacados nessas relações. Em primeiro lugar, por se tratar de uma espécie de projeção em estados coerentes, temos sempre a presença do operador de suavização Gaussiana $e^{\frac{\hbar}{4}\nabla_0^2}$. Por outro lado, operadores envolvendo o produto cruzado $\partial_{q_0}\partial_{p_0}$ estão sempre relacionados à questão da não-comutatividade entre $\widehat{Q}$ e $\widehat{P}$. Nesse sentido, podemos supor que o produto *totalmente simetrizado* [87] é o mais clássico possível [vide eq. (6.31)]. Outro ponto interessante é o fato de que todos os resultados acima estão expressos em termos de expansões semiclássicas, e se reduzem assintoticamente ao mesmo produto $q_0^n p_0^m$ no limite clássico ($\hbar \to 0$).

6.2.3 Médias Gaussianas Clássicas

No formalismo de Liouville, define-se a seguinte média clássica no espaço de fase:

$$\langle \mathcal{O}(q_0, p_0, t)\rangle = \int dqdp\ \rho(q,p,t)\, \mathcal{O}(q,p,0), \tag{6.34}$$

na qual o ponto (q_0, p_0) indica a condição clássica inicial sobre a qual foi construída a distribuição $\rho(q,p,0)$. No caso de uma distribuição Gaussiana por exemplo, q_0 e p_0 seriam o centro da distribuição. De acordo com este formalismo a evoluções temporais da distribuição ρ e da função $\mathcal{O}$ são dadas por

$$\rho(q,p,t) = e^{\mathcal{L}t}\rho(q,p,0) = \rho(q(-t),p(-t),0), \tag{6.35}$$

$$\mathcal{O}(q,p,t) = e^{-\mathcal{L}t}\mathcal{O}(q,p,0). \tag{6.36}$$

As médias estatísticas podem ainda ser feitas de uma forma análoga à versão de Heisenberg para a mecânica quântica, a saber: evolui-se a função $\mathcal{O}_0$ e mantem-se constante a função densidade. Nesta direção, utilizando-se o fato de que o fluxo Hamiltoniano preserva o volume do espaço de fase em qualquer instante,

$$dq(t)dp(t) = dq(t')dp(t'), \tag{6.37}$$

pode-se escrever

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{O}(q_0,p_0,t)\rangle &= \int dqdp\ \rho(q,p,t)\,\mathcal{O}(q,p,0) \\
&= \int dqdp\,\rho(q(-t),p(-t),0)\, e^{-\mathcal{L}t}\mathcal{O}(q(-t),p(-t),0) \\
&= \int dq(-t)dp(-t)\,\rho(q(-t),p(-t),0)\, e^{-\mathcal{L}t}\mathcal{O}(q(-t),p(-t),0) \\
&= \int dqdp\,\rho(q,p,0)\, e^{-\mathcal{L}t}\mathcal{O}(q,p,0) \\
&= \int dqdp\,\rho(q,p,0)\,\mathcal{O}(q,p,t),
\end{aligned} \tag{6.38}$$

em que foi realizada uma troca das variáveis de integração $q(-t)$ e $p(-t)$ para q e p, respectivamente.

Neste ponto, implementamos a idéia da distribuição inicial Gaussiana

$$\rho(q,p,0) = \frac{e^{-\frac{(q-q_0)^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}} \frac{e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}}, \tag{6.39}$$

sendo o ponto (q_0, p_0) o centro da Gaussiana. Então, fazemos uma mudança de variáveis, $(q - q_0) = \eta$ e $(p - p_0) = \zeta$, e utilizamos o operador deslocamento $e^{a\partial_x} x^n = (x + a)^n$ para reescrever $\langle \mathcal{O} \rangle$ na forma

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}(q_0,p_0,t) \rangle &= \int d\eta d\zeta \frac{e^{-\frac{\eta^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}} \frac{e^{-\frac{\zeta^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}} \mathcal{O}(q_0+\eta, p_0+\zeta, t) \\ &= \int d\eta d\zeta \frac{e^{-\frac{\eta^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}} \frac{e^{-\frac{\zeta^2}{\sigma}}}{\sqrt{\pi\sigma}} e^{\eta\partial_{q_0}} e^{\zeta\partial_{p_0}} \mathcal{O}(q_0,p_0,t). \end{aligned} \tag{6.40}$$

A idéia é que agora a função $\mathcal{O}$ não depende mais das variáveis de integração e, portanto, completando quadrados, podemos fazer a integral Gaussiana formalmente de modo obter

$$\blacktriangle \qquad \langle \mathcal{O}(q_0,p_0,t) \rangle = e^{\frac{\sigma}{4}\nabla_0^2} \mathcal{O}(q_0,p_0,t). \tag{6.41}$$

Este resultado será idêntico ao resultado obtido no formalismo quântico das seções anteriores se identificarmos σ com $\hbar$.

Há um ponto importante a ser destacado. No cálculo acima não foi feita qualquer hipótese sobre a função $\mathcal{O}$. Isso quer dizer que a fórmula (6.41) deve se aplicar a qualquer média realizada com funções Gaussianas! Nesse sentido, é como se tivéssemos transformado a integral da função $\mathcal{O}$ com pesos Gaussianos num formato diferencial decorrente da aplicação do operador Liouvilliano Laplaciano. A grande vantagem desta nova representação é que ela consegue colocar em evidência toda a dependência com a largura da Gaussiana. Então, usando $\sigma = \hbar$, ao expandirmos o operador Liouvilliano em série teremos automaticamente a expansão "semiclássica" em $\hbar$. Em outras palavras, a aplicação do operador Liouvilliano $e^{\frac{\sigma}{4}\nabla_0^2}$ tem o efeito de *suavizar* a função sobre a qual ele atua através de uma média Gaussiana. Observe-se ainda que no limite de $\sigma \to 0$, o operador Liouvilliano se transforma no operador unidade, o que corresponde ao caso em que a distribuição Gaussiana se torna uma delta de Dirac.

Em princípio, o mesmo procedimento pode ser aplicado no cálculo de médias envolvendo distribuições iniciais Poissonianas, porém algum cuidado adicional deve ser tomado no momento de se analisar os regimes de $\sigma \ll 1$, uma vez que a largura da distribuição também aparece no denominador das funções envolvidas.

6.2.4 Representações de Schrödinger e Heisenberg

O que dizer então diante da completa equivalência entre os resultados (6.30) e (6.41)? Sabemos que os resultados quântico e estatístico não devem ser iguais, pelo menos não para interações não-lineares e para escalas de tempo grandes. O fato é que a quantização que realizamos para obter o resultado quântico foi feita sobre uma equação de movimento resolvida classicamente, e aí está o "problema". Note-se que quando obtivemos a função quântica

correspondente, é como se tivéssemos feito uma quantização de operadores de Schrödinger. Vamos tentar ilustrar esse fato. Imaginemos que nossa função de partida f fosse $q_t(q,p,t)$, a solução da equação de movimento para a coordenada q do espaço de fase. Nesse caso, nosso processo de quantização levaria a

$$\widehat{Q}_t(\widehat{Q},\widehat{P},t) = \sum_{n,m} c_{n,m}(t) e^{-\frac{\imath\hbar}{2}\partial_{\widehat{Q}}\partial_{\widehat{P}}} \widehat{Q}^n \widehat{P}^m, \tag{6.42}$$

em que usamos o subíndice "t" para denotar os operadores na representação de Heisenberg. Depois disso, toma-se o valor esperado em estados coerentes ($\langle\alpha_0|\widehat{Q}|\alpha_0\rangle$) e chega-se ao resultado já apresentado, pois a função já está expandida em termos de $\widehat{Q}$ e $\widehat{P}$ (representação de Schrödinger) e sabemos como calcular o valor esperado.

Por outro lado, se realizássemos em primeiro lugar a quantização da equação de movimento (o que se faz normalmente) teríamos algo como

$$\dot{q}_t = g(q_t,p_t) = \sum_{n,m} g_{n,m} q_t^n p_t^m \tag{6.43}$$

$$\Downarrow$$

$$\dot{\widehat{Q}}_t = \sum_{n,m} g_{n,m} e^{-\frac{\imath\hbar}{2}\partial_{\widehat{Q}_t}\partial_{\widehat{P}_t}} \widehat{Q}_t^n \widehat{P}_t^m, \tag{6.44}$$

em que $q_t = q_t(q,p,t)$ e $\widehat{Q}_t = \widehat{Q}_t(\widehat{Q},\widehat{P},t)$ (representação de Heisenberg). O que aconteceria agora se tomássemos o valor esperado em estados coerentes? Neste caso, não saberíamos como calcular o valor esperado, pois não temos uma expansão em termos dos operadores de Schrödinger, como tínhamos antes. E se tentarmos propor uma expansão para $\widehat{Q}_t$ e $\widehat{P}_t$ em termos de $\widehat{Q}$ e $\widehat{P}$ veremos o quão complicado pode ser tentar resolver a equação de movimento. De fato, sabemos resolver algo como $\langle\alpha_0|\widehat{Q}_t|\alpha_0\rangle$, como já fizemos, mas $\langle\alpha_0|\widehat{Q}_t^n|\alpha_0\rangle$ por exemplo, já seria muito mais complicado.

Nesse sentido, de acordo com o que foi mostrado, parece que a quantização de equações de movimento clássicas que propusemos corresponde a um tipo de "quantização clássica", que deve ser válida somente na escala de Ehrenfest, na qual andam juntos o centróide quântico e clássico, ou para o caso de interações quadráticas e/ou bilineares. De fato, como argumentamos, nossa quantização foi feita na representação de Schrödinger, a qual deve se aproximar da regra correta de quantização, a de Heisenberg, somente em tempos curtíssimos, quando ambas as representações coincidem.

6.2.5 "Trajetória Quântica Coerente"

O que aconteceria se de fato um sistema quântico pudesse ter o valor esperado de seu centróide $\widehat{R}_t = \binom{\widehat{Q}_t}{\widehat{P}_t}$ escrito como

$$\langle\widehat{R}_t\rangle = e^{\frac{\hbar}{4}\nabla^2} R_Q \ ? \tag{6.45}$$

Como o operador de *suavização* $e^{\frac{\hbar}{4}\nabla^2}$ traz consigo as correções do pacote, significa que R_Q traria consigo toda a informação da dinâmica. Neste caso, teríamos uma equação no espaço de fase "despida" do pacote coerente, o que corresponderia a algo como uma *trajetória quântica*

coerente. Tendo em mente esta argumentação e utilizando a equação acima, poderíamos então dizer que, se existir, a trajetória quântica coerente será dada por

$$R_Q = e^{-\frac{\hbar}{4}\nabla^2}\langle \widehat{R}_t \rangle. \tag{6.46}$$

Em outras palavras, é como se fosse possível encontrar uma equação de movimento clássica que, ao ser quantizada na escala clássica, resultasse no próprio valor esperado quântico. Note-se que na prática o cálculo pode ser feito através da aplicação do operador de suavização sobre o valor esperado quântico. Obviamente, ainda é preciso discutir se há convergência no processo. De qualquer modo, o cálculo é imediato e simples em alguns casos. Por exemplo, se o valor esperado quântico depender de q e p de forma apenas linear, como ocorre nos casos do oscilador harmônico e das interações bilineares, então a trajetória quântica será idêntica à clássica. Por outro lado, o que dizer dos casos não-lineares? Ou ainda, quais seriam os autovalores e autovetores do operador de suavização? Essa é uma questão que não será tratada nesta tese.

6.3 Tempo de Ehrenfest

De acordo com o teorema de Ehrenfest [7], para estados suficientemente localizados o centróide quântico evolui segundo equações de movimento clássicas. Esta proposição implica que

$$\langle \dot{\widehat{P}} \rangle = -\left\langle \partial_{\widehat{Q}} V(\widehat{Q}) \right\rangle \approx -\partial_{\langle \widehat{Q} \rangle} V(\langle \widehat{Q} \rangle), \tag{6.47}$$

isto é, a variação temporal do momento médio é igual a força local. Então, nesta escala, o formalismo quântico pode ser "substituído" pelo formalismo estatístico ou de campo médio, ou seja, teremos uma pacote com largura praticamente constante e cujo centro acompanha a trajetória clássica. Isso está em rigoroso acordo com a proposta de Ballentine [90].

Seja $\mathbf{R}(t) = \big(q_1(t), p_1(t), \cdots, q_N(t), p_N(t)\big)$ o vetor composto pelas soluções das $2N$ equações de Hamilton que descrevem o movimento clássico no espaço de fase de um sistema composto por N subsistemas interagentes. Então, de acordo com os resultados (6.21) e (6.41), na escala de Ehrenfest podemos escrever o centróide quântico correspondente como

$$\langle \widehat{\mathbf{R}}(t) \rangle = e^{\frac{\hbar}{4}\boldsymbol{\nabla}^2}\mathbf{R}(t), \tag{6.48}$$

sendo $\boldsymbol{\nabla}^2 = \sum_{i=1}^{N} \nabla_i^2$ o operador Laplaciano N-dimensional do sistema, que atua sobre as condições iniciais $(q_1, p_1, \cdots, q_N, p_N)$. Agora devemos nos lembrar que a escala de Ehrenfest pressupõe a localização "suficiente" do pacote de ondas, de modo que levamos em consideração somente a primeira correção em $\hbar$. Logo

$$\langle \widehat{\mathbf{R}}(t) \rangle \approx \mathbf{R}(t) + \frac{\hbar}{4}\boldsymbol{\nabla}^2\mathbf{R}(t). \tag{6.49}$$

Finalmente, definimos matematicamente o tempo de Ehrenfest como

$$\frac{\Big|\Big|\langle \widehat{\mathbf{R}}(t_E) \rangle - \mathbf{R}(t_E)\Big|\Big|}{||\mathbf{R}(0)||} = 1, \tag{6.50}$$

ou, de forma equivalente,

$$\frac{\hbar}{4}\frac{||\boldsymbol{\nabla}^2\mathbf{R}(t_E)||}{||\mathbf{R}(0)||} = 1. \tag{6.51}$$

É importante notarmos que não precisamos em momento algum resolver as equações de movimento quânticas. A seguir, aplicaremos o procedimento descrito acima para calcularmos o tempo de Ehrenfest de um sistema de N osciladores não-lineares.

6.3.1 O Sistema "kártico" N-dimensional

Seja a Hamiltoniana clássica

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N}\omega_i\left(\frac{p_i^2+q_i^2}{2}\right) + g\left[\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{p_i^2+q_i^2}{2}\right)\right]^k, \tag{6.52}$$

a partir da qual definimos

$$\Lambda = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{p_i^2+q_i^2}{2}\right), \tag{6.53}$$

sendo g a única constante de acoplamento do sistema. Calculando o operador Liouvillano da evolução temporal do sistema obtemos

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \sum_{i=1}^{N}\{\mathcal{H},\cdot\}_{(q_i,p_i)} = \sum_{i=1}^{N}\left(\partial_{q_i}\mathcal{H}\partial_{p_i} - \partial_{p_i}\mathcal{H}\partial_{q_i}\right)\\ &= \sum_{i=1}^{N}\left(\omega_i + gk\Lambda^{k-1}\right)\mathcal{L}_0(q_i,p_i) \equiv \sum_{i=1}^{N}\mathcal{L}_i,\end{aligned} \tag{6.54}$$

em que $\mathcal{L}_0$ ó operador Liouvilliano de momento angular. Agora, podemos mostrar que $[\mathcal{L}_i,\mathcal{L}_j]=0$ utilizando o processo de derivação de parâmetros (vide apêndice). Em primeiro lugar, impomos que

$$\rho = e^{(\mathcal{L}_i+\mathcal{L}_j)t}\rho_0 = e^{a\mathcal{L}_i}e^{b\mathcal{L}_j}\rho_0, \tag{6.55}$$

sendo que a e b são parâmetros dependentes do tempo a serem determinados. Derivando ambos os lados em relação ao tempo, obtemos

$$\left(\mathcal{L}_i+\mathcal{L}_j\right)\rho = \dot{a}\,\mathcal{L}_i\rho + \dot{b}\,e^{a\mathcal{L}_i}\mathcal{L}_j e^{-a\mathcal{L}_i}\rho, \tag{6.56}$$

que pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_i+\mathcal{L}_j &= \dot{a}\,\mathcal{L}_i + \dot{b}\,e^{a\mathcal{L}_i}\mathcal{L}_j\\ &= \dot{a}\,\mathcal{L}_i + \dot{b}\,e^{a\left(\omega_i+gk\Lambda^{k-1}\right)\mathcal{L}_0(q_i,p_i)}\left[\left(\omega_j+gk\Lambda^{k-1}\right)\mathcal{L}_0(q_j,p_j)\right]\\ &= \dot{a}\,\mathcal{L}_i + \dot{b}\,\left(\omega_j + gke^{a\left(\omega_i+gk\Lambda^{k-1}\right)\mathcal{L}_0(q_i,p_i)}\left[\Lambda^{k-1}\right]\right)\mathcal{L}_0(q_j,p_j),\end{aligned} \tag{6.57}$$

em que usamos o fato de que $[\mathcal{L}_0(q_i,p_i),\mathcal{L}_0(q_j,p_j)]=0$. Como o operador momento angular não é capaz de evoluir ações simetricamente quadráticas[1], e como Λ é função somente de tais funções, então Λ é uma constante de movimento, e além disso

$$\mathcal{L}_i+\mathcal{L}_j \;=\; \dot{a}\,\mathcal{L}_i+\dot{b}\,\mathcal{L}_j, \tag{6.58}$$

$$\therefore \qquad a=b=t, \tag{6.59}$$

donde conclui-se, voltando-se a (6.55), que $[\mathcal{L}_i,\mathcal{L}_j]=0$. Agora, pode-se resolver analiticamente as equações de movimento clássicas:

$$\blacktriangle \quad R_i(t)=e^{\sum\limits_j \mathcal{L}_j t}R_i=\prod_j\left(e^{\mathcal{L}_j t}\right)R_i=M[\tau_i]R_i, \tag{6.60}$$
$$\tau_i=\omega_i t+gtk\Lambda^{k-1},$$

sendo M a matriz de rotação bidimensional e $R_i=\binom{q_i}{p_i}$ o vetor condição inicial. Por outro lado, a ação da soma de Laplacianos sobre a trajetória clássica produz

$$\left(\sum_j\nabla_j^2\right)R_i(t)=\begin{bmatrix} -2\left[gtk(k-1)\right]^2\Lambda^{2k-3} & 2gtk^2(k-1)\Lambda^{k-2} \\ -2gtk^2(k-1)\Lambda^{k-2} & -2\left[gtk(k-1)\right]^2\Lambda^{2k-3}\end{bmatrix}R_i(t). \tag{6.61}$$

Agora já podemos calcular os tempos de quebra de correspondência utilizando a equação (6.51). Observemos antes que não há acoplamento entre graus de liberdade distintos nas equações de movimento, de modo que podemos facilmente fazer o cálculo para o vetor $\mathbf{R}=(R_1,R_2,...,R_N)$ no espaço de fase. Depois de alguma álgebra, chega-se ao seguinte resultado:

$$t_E(N,k) \;=\; \frac{1}{g\sqrt{\frac{\hbar}{2}}k(k-1)\Lambda^{\frac{2k-3}{2}}}\left[\sqrt{1+\frac{\hbar^2k^4}{16\Lambda^2}}-\frac{\hbar k^2}{4\Lambda}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{6.62}$$

Este resultado, entretanto, ainda não está consistente com as aproximações que temos feito até aqui. De fato, ainda precisamos jogar fora todas as correções de ordens superiores a $\hbar^1$. Com isso, obtemos o seguinte resultado final:

$$\blacktriangle \quad t_E(N,k) \;\cong\; \frac{1}{g\sqrt{\frac{\hbar}{2}}k(k-1)\Lambda^{\frac{2k-3}{2}}}\left[1-\frac{\hbar k^2}{8\Lambda}\right]. \tag{6.63}$$

Na figura 6.1, mostramos resultados analíticos da relação (6.50) obtidos para o caso $N=k=2$ e a comparação com a escala de Ehrenfest dada pela equação (6.63).

Há uma série de pontos no resultado mostrado em (6.63) que merecem algum comentário.

- O tempo de Ehrenfest diverge para $k=1$, o que está em pleno acordo com o fato de não haver correções quânticas para o caso do oscilador harmônico. De fato, nesse regime, todas as não-linearidades deixam de existir, e nunca haverá divergência entre o centróide quântico e a trajetória clássica. O mesmo ocorre se $g=0$ ou $k=0$.

[1] De fato, $e^{\tau\mathcal{L}_0}(q^2+p^2)=q^2+p^2$. Este é exatamente o caso do oscilador harmônico em uma dimensão, com energia $\mathcal{H}=\omega\left(\frac{q^2+p^2}{2}\right)$ constante.

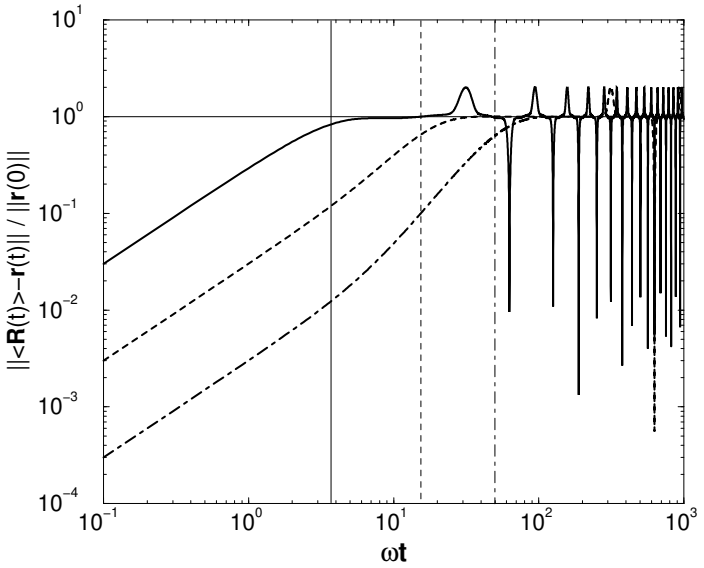

Figura 6.1: Distanciamento entre os centróides quântico e clássico em função de ωt para o oscilador quártico bidimensional ($N = k = 2$). Esses cálculos foram feitos analiticamente com $q_i = p_i = 1$ ($\Lambda = 2$), $\omega_i = \omega = 1$, $g = 0.1$ e $\hbar = 1$ (linha sólida), $\hbar = 0.1$ (linha tracejada) e $\hbar = 0.01$ (linha pontuada e tracejada). O tempo de Ehrenfest (6.63) para cada valor de $\hbar$ é representado por uma linha vertical no estilo correspondente.

- Identifica-se claramente a dependência em $\hbar$ para a escala de quebra de correspondência: $t_E \sim \hbar^{-0.5}$. De fato, há concordância com um resultado obtido na literatura para o caso de $N = 1$ e $k = 2$ [91] e com resultados preliminares obtidos pelo grupo da Profa. M. Carolina Nemes (UFMG - BH/MG). Além disso, conforme [8, 92], nosso resultado é proporcional a $\frac{1}{\Omega}\left(\frac{S}{\hbar}\right)^{\eta}$, sendo Ω uma frequência dinâmica e S uma ação característica do sistema. De fato, nosso resultado pode ser reescrito como

$$t_E = \frac{1}{k(k-1)} \left\{ \frac{1}{g\Lambda^{k-1}} \left(\frac{2\Lambda}{\hbar} \right)^{0.5} \right\}, \tag{6.64}$$

  no qual temos, por comparação, $\Omega = k(k-1)g\Lambda^{k-1}$.

- Para que a escala de Ehrenfest não seja negativa, o resultado exige que

$$\frac{8\Lambda}{k^2} > \hbar. \tag{6.65}$$

  Isso significa que não basta exigir que $\hbar$ seja pequeno, mas sim que ele respeite esta relação, que depende não só da ação do sistema, mas também do grau de não-linearidade expresso por k. Nesse sentido, podemos entender que a condição acima define qual seria o "parâmetro semiclássico adequado" para falarmos em limite clássico. Isto é, rigorosamente, o limite clássico não é obtido com $\hbar \to 0$ (**constante** de Planck), mas com $\frac{\hbar k^2}{8\Lambda} \to 0$.

- O resultado também indica o papel da não-linearidade para a escala de quebra de correspondência. O limite $\Lambda \to \infty$ mostra que o termo de interação do Hamiltoniano

passa a vencer o termo livre de tal forma que o sistema assume um caráter altamente não-linear. Então, se o acoplamento não for suficientemente fraco, de modo que a frequência $g\Lambda^{k-1}$ seja finita e da ordem de ω_i, teremos um tempo de Ehrenfest tendendo a zero.

Os resultados desta seção acabam de ser submetidos à publicação [93].

Entropia e Tempo de Ehrenfest

Nesta seção vamos mostrar que o tempo de Ehrenfest calculado através da ação do centróide está em acordo com a hipótese de uma escala "clássica" de tempos. Para tanto utilizaremos um procedimento de comparação entre as entropias estatísticas linear e de von Neumann. Começamos pela definição da seguinte média[2]:

$$\langle \mathcal{O}(\tau) \rangle_t^{(n)} \equiv \frac{Tr[\mathcal{O}(\tau)\rho^n(t)]}{Tr[\rho^n(t)]} \tag{6.66}$$

na qual $\rho(t)$ é a densidade de probabilidade no instante t e $\mathcal{O}(t)$ é uma função das coordenadas q e p do espaço de fase que pode, em geral, depender do tempo. Podemos agora reescrever as equações das entropias em função das médias definidas:

$$\begin{aligned} S(t) &= -Tr[\rho(t)\ln\rho(t)] + Tr[\rho(0)\ln\rho(0)] \\ &= -\langle \ln\rho(t)\rangle_t^{(1)} + \langle \ln\rho(0)\rangle_0^{(1)}. \end{aligned} \tag{6.67}$$

$$\delta(t) = 1 - \frac{Tr[\rho^2(t)]}{Tr[\rho^2(0)]} = 1 - \frac{\langle \rho(t)\rangle_t^{(1)}}{\langle \rho(0)\rangle_0^{(1)}}. \tag{6.68}$$

Vamos ainda reescrever a eq. (6.68) numa forma mais apropriada:

$$-\ln[1-\delta(t)] = -\ln\langle \rho(t)\rangle_t^{(1)} + \ln\langle \rho(0)\rangle_0^{(1)}. \tag{6.69}$$

De acordo com a definição usual, a escala de Ehrenfest é aquela na qual a mecânica quântica pode ser descrita por equações dinâmicas clássicas. Portanto, podemos supor que nesta escala vale a relação

$$\langle f(\mathcal{O})\rangle = f(\langle \mathcal{O}\rangle). \tag{6.70}$$

Se assim for, as equações (6.67) e (6.69) nos levarão à seguinte equação "clássica":

$$\blacktriangle \qquad S(t) + \ln[1-\delta(t)] = 0, \tag{6.71}$$

a qual deve valer para todo t definido dentro da escala do tempo Ehrenfest (calculado nas seções anteriores):

$$t_{EC} = \frac{\hbar^{-0.5}}{\sqrt{4g^2\Lambda}}, \tag{6.72}$$

sendo $\Lambda = q_{10}^2 + p_{10}^2 + q_{20}^2 + p_{20}^2$ a ação clássica do sistema. Na figura 6.2 vemos que de fato

[2] Aqui estaremos sempre considerando o formalismo estatístico, mas acreditamos que algo semelhante deva ocorrer no formalismo quântico.

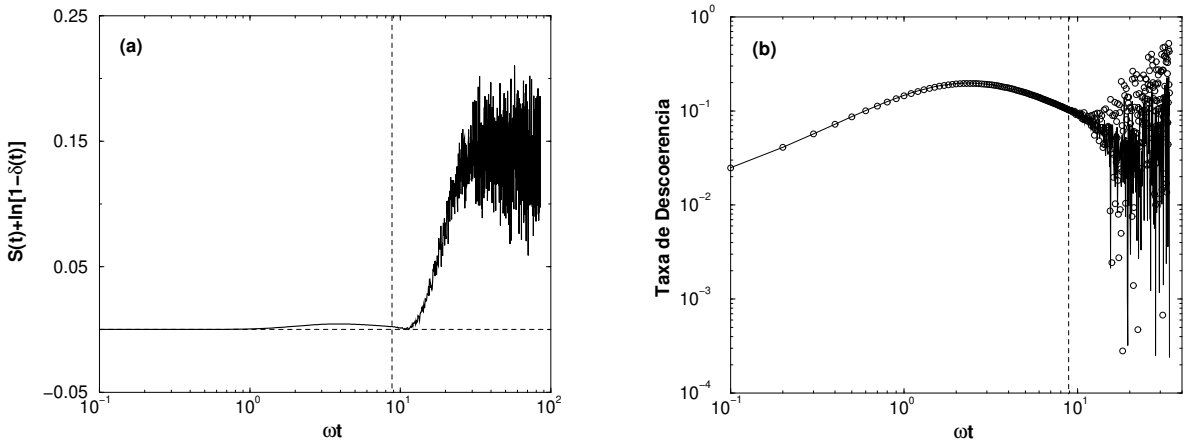

Figura 6.2: (a) A grandeza indicada no eixo está representada pela linha sólida. (b) Taxas de descoerência: $\frac{dS}{dt}$ (linha sólida) e $-\frac{d}{dt}\ln(1-\delta)$ (círculos). Em ambos os gráficos, a linha vertical tracejada representa o tempo de Ehrenfest: $t_E \approx 8.84$. Esses são resultados estatísticos obtidos para o sistema quártico (2-D) com os seguintes parâmetros: $q_{i0} = p_{i0} = 1$, $\Lambda = 4$, $\omega = 1$, $g = 0.1$, $\lambda = 0.2$ e $\hbar = 0.08$.

há uma boa concordância entre o tempo de Ehrenfest previsto na eq. (6.72) e a igualdade deduzida na eq. (6.71). Apesar de o cálculo ter sido feito somente dentro do formalismo estatístico, um argumento complementamente análogo pode ser estabelecido para as entropias quânticas, o que reforçaria a idéia de que a validade da eq. (6.71) pode ser uma boa receita para a estimativa do tempo de Ehrenfest. Podemos ainda testar mais uma vez essa argumentação se fizermos o mesmo cálculo para o caso da interação RWA, para a qual se espera que o tempo de Ehrenfest seja infinito. Neste caso então, a igualdade (6.71) deve valer sempre, e é isso o que ocorre de fato, como está mostrado na figura 6.3.

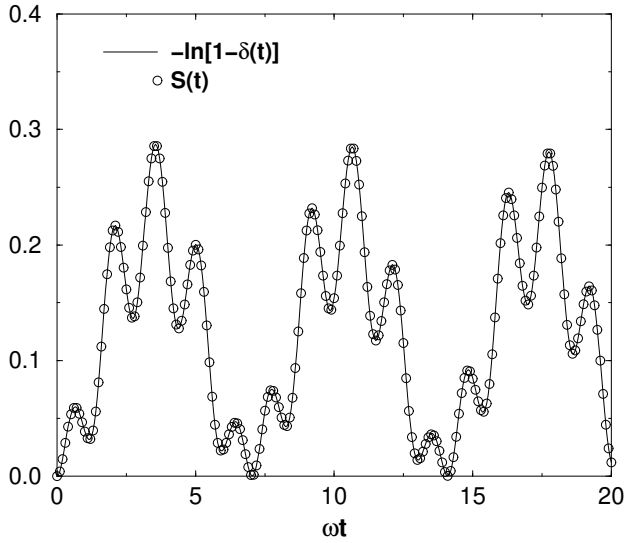

Figura 6.3: Teste de validade da equação (6.71) no formalismo estatístico em função do tempo para o caso da interação RWA com $\lambda = 0.9$ e $\omega = 1$. Este resultado sugere que o tempo de Ehrenfest deve ser infinito, o que de fato acontece nesse sistema.

Capítulo 7

Conclusões

No estudo da dinâmica de emaranhamento de sistemas Hamiltonianos bipartites globalmente fechados, observamos a dependência do processo de emaranhamento e descoerência com a condição clássica sobre a qual foi inicializada a dinâmica quântica de estados coerentes. Além disso, vimos como o efeito de borda, oriundo da finitude do espaço de spin, nos permite estudar as oscilações da entropia linear em conexão com a simetria da projeção da trajetória clássica no espaço de spin. Esses efeitos, conectam conceitos quânticos como a entropia linear, a descoerência e o emaranhamento, com aspectos completamente clássicos, como trajetórias no espaço de fase.

Uma vez "entendido" o efeito de borda, foi possível propor o cálculo de um comportamento médio para o processo de emaranhamento associado a uma trajetória clássica, independente do ponto (q_1, p_1, q_2, p_2, t) escolhido sobre a trajetória. Esta parece ser a medida mais adequada para a associação com um eventual expoente característico clássico. De fato, foi possível definir um comportamento assintótico exponencial para a entropia linear média, com o auxílio de dois parâmetros de ajuste A_0 e A_1 associados, respectivamente, ao valor do *patamar* (valor do emaranhamento do equilíbrio) e à *taxa de descoerência*. Foi observado que A_1 é maior para trajetórias pertencentes às regiões instáveis do espaço de fase, como a separatriz e o mar caótico. Para o parâmetro A_0, conectado ao valor máximo da entropia, verificou-se sua dependência em relação ao número total de estados acessíveis (definido em termos do spin total J), sendo portanto o mesmo para qualquer trajetória pertencente ao regime definido pelo par (E, J).

Para o MJC-N discutimos ainda o limite clássico da entropia linear. Por ser esta uma grandeza extensiva, nos pareceu adequado que a entropia assuma valores cada vez maiores à medida que aumentamos J, isto é, parece razoável que a entropia cresça acompanhando o crescimento no número de estados acessíveis. Por outro lado, se nos lembrarmos que a entropia é também uma medida de emaranhamento nos casos em que trabalhamos, então teremos um *paradoxo*, pois os resultados numéricos indicam que o emaranhamento cresce à medida que deixamos o sistema *mais clássico*. Esta é uma questão que não foi esclarecida neste trabalho e que consideramos importante para o real entendimento de grandezas que pretendem medir o emaranhamento.

Nesta tese apresentamos também a definição de uma medida para o emaranhamento de distribuições clássicas. A entropia linear clássica expressa de forma quantitativa o fato de que distribuições clássicas inicialmente separadas se *emaranham* em sistemas interagentes. Isso quer dizer que a distribuição de probabilidade de um dos subsistemas depende, ponto a ponto,

do espaço de fase do outro subsistema. Este tipo de *probabilidade condicional* ocorre também quanticamente, uma vez que o estado de um dos subsistemas depende da medida realizada sobre o outro subsistema. Note-se que nosso objetivo não é propor uma medida semiclássica para emaranhamento, mas sim quantificar o emaranhamento de distribuições clássicas, que em princípio pode ser bem diferente do quântico, o qual está relacionado às correlações quânticas não-locais. Apesar disso, nossa definição clássica foi tal que obtivemos resultados (quântico e clássico) idênticos para o caso de sistemas quadráticos com interação bilinear e estados iniciais Gaussianos. Mesmo utilizando estados iniciais não-Gaussianos, ainda foi possível comparar qualitativamente os resultados dos dois formalismos utilizando-se o *grau de emaranhamento*, o qual acaba sendo, por causa disso, uma medida mais geral de emaranhamento clássico. Mais tarde, diante dos resultados para o caso de interação quártica, concluímos que a entropia clássica é realmente uma medida adequada, não podendo (e nem deveria) se comparar ao resultado quântico em casos em que fenômenos sem análogo clássico (auto-interferência) estão presentes. De qualquer forma, ainda se faz necessário algum esforço no sentido de demonstrar propriedades matemáticas como concavidade, positividade, aditividade, etc., as quais devem ser satisfeitas por qualquer medida de entropia.

Ainda no âmbito das analogias entre os formalismo quântico e clássico, deduzimos por primeiros princípios uma equação mestra clássica para o tratamento de sistemas abertos Markovianos. A dedução seguiu os passos usuais dos livros-textos [74] para a dedução da mestra quântica, com modelagem Hamiltoniana baseada no processo Caldeira-Leggett [84]. Como aplicação direta, comparamos os cálculos quântico e clássico para o caso de um oscilador harmônico em contato com um banho de osciladores em equilíbrio à temperatura nula. Neste cálculo preliminar verificamos que a equação mestra clássica ofereceu resultados adequados, uma vez que simulou apropriadamente a dissipação e localização da probabilidade clássica, como se espera. Uma perspectiva interessante seria o cálculo à temperatura finita, para o qual deve ocorre difusão clássica. Além disso, seria interessante podermos verificar se esta equação mestra pode levar às equações clássicas de Langevin para o movimento Browniano [94].

O último resultado deste trabalho nasceu do estudo dos processos de quantização dos livros-textos, segundo o qual construímos o Hamiltoniano quântico para qualquer sistema com análogo clássico conhecido. Assim definimos um operador Liouvilliano clássico capaz de quantizar monômios de variáveis clássicas canonicamente conjugadas em forma automaticamente simetrizada e ordenada. Mais tarde, descobrimos que tal operador já havia aparecido em alguns trabalhos sobre a transformada de Weyl, em contextos ligeiramente diferentes. Como consequência direta da proposta de tal operador, ganhamos fórmulas de ordenamento normal e anti-normal. Aplicando então esse esquema de quantização às equações de movimento clássicas e tomando o valor esperado em estados coerentes, obtivemos a aproximação na escala de Ehrenfest para os valores esperados do centróide quântico, o que nos levou automaticamente a uma fórmula para o cálculo do tempo de Ehrenfest. Como exemplo, calculamos analiticamente a escala de quebra de correspondência para um sistema de N osciladores com interação diagonal de ordem k. O resultado deste cálculo analítico se mostrou bastante satisfatório, trazendo informação sobre a dependência da escala de Ehrenfest em relação à não-linearidade da interação, além de reproduzir resultados de casos particulares da literatura. Esses cálculos via estados coerentes se mostraram bastante promissores e podem constituir uma ferramenta interessante para o entendimento do limite clássico matemático da mecânica quântica.

Bibliografia

[1] O. Bohigas, M. J. Giannoni e C. Schmit, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1 (1984).

[2] E. J. Heller, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1015 (1984).

[3] E. B. Bogomolny, *Physica D* **31**, 169 (1988).

[4] *Quantum Chaos.* World Scientific, Singapore, 1991.

[5] *Chaotic Behavior in Quantum Systems: Theory and Application.* Plenum Press, New York, 1985.

[6] R. Aurich, J. Bolte e F. Steiner, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1356 (1994).

[7] P. Ehrenfest, *Zeit. Phys.* **45**, 455 (1927).

[8] W. H. Zurek e J. P. Paz, e-print: quant-ph/9612037 (1996).

[9] A. O. Caldeira e A. J. Leggett, *Phys. Rev. A* **31**, 1059 (1985).

[10] W. H. Zurek, *Phys. Today* **44**, 36 (1991).

[11] W. H. Zurek, *Phys. Rev. D* **24**, 1516 (1981).

[12] E. Joos e H. D. Zeh, *Zeit. Phys. B* **59**, 229 (1985).

[13] W. H. Zurek, *Phys. Today* **46**, 81 (1993).

[14] W. H. Zurek, *Prog. Theor. Phys.* **89**, 281 (1993).

[15] W. H. Zurek e J. P. Paz, *Physica A* **83**, 200 (1995).

[16] K. Furuya, M. C. Nemes e G. Q. Pellegrino, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5524 (1998).

[17] S. Habib, K. Shizume e W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4361 (1998).

[18] T. Hiroshima, *Phys. Rev. A* **63**, 022305 (2001).

[19] P. P. Munhoz. *Dinâmica do Modelo de Jaynes-Cummings com Meio Kerr e Diferentes Dessintonias.* Tese de Mestrado, IFGW - UNICAMP, 2002.

[20] M. V. S. Bonança. *Efeito do Caos na Evolução Temporal de Pacotes Semiclássicos.* Tese de Mestrado, IFGW - UNICAMP, 2002.

[21] F. K. Nohama. *Emaranhamento e Caos em Um Sistema de Dois Spins.* Tese de Mestrado, IFGW - UNICAMP, 2002.

[22] R. H. Dicke, *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954).

[23] M. Brune, S. Haroche, V. Lefevre, J. M. Raymond e N. Zagury, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 976 (1990).

[24] M. Brune, S. Haroche, J. M. Raymond, L. Davidovich e N. Zagury, *Phys. Rev. A* **45**, 5193 (1992).

[25] V. Burek, H. Moya-Cessa, P. L. Knight e S. J. D. Phoenix, *Phys. Rev. A* **45**, 8190 (1992).

[26] L. Davidovich, M. Brune, J. M. Raymond e S. Haroche, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4887 (1996).

[27] S. Haroche e J. P. Raimond. *Coherence and Quantum Optics VII.* Plenum Press, New York, 1996.

[28] M. A. M. de Aguiar, K. Furuya, C. H. Lewenkopf e M. C. Nemes, *Europhys. Letters* **15**, 125 (1991).

[29] M. A. M. de Aguiar, K. Furuya e M. C. Nemes, *Quantum Optics* **3**, 305 (1991).

[30] M. A. M. de Aguiar, K. Furuya, C. H. Lewenkopf e M. C. Nemes, *Ann. Phys.* **216**, 291 (1992).

[31] K. Hepp e E. H. Lieb, *Ann. Phys.* **76**, 306 (1973).

[32] M. B. Cibils, Y. Cuche, W. F. Wreszinski, J-P. Amiet e H. Beck, *J. Phys. A* **23**, 545 (1990).

[33] Valdecir Marvulle. *Sobre os Limites Clássico e Semiclássico do Modelo Spin-Bóson.* Tese de Doutorado, IF - USP, 1991.

[34] R. M. Angelo. *Estudo do Volume Caótico e Observações do Efeito de Borda para o Modelo do Maser Clássico.* Tese de Mestrado, IFGW - UNICAMP, 1999.

[35] G. Q. Pellegrino. *Aspectos de Integrabilidade e Caos Relacionados a Quebra de Simetria em Modelos de Poucos Spins.* Tese de Doutorado, IFGW - UNICAMP, 1994.

[36] Michael E. Fisher, *Am. J. Phys.* **32**, 343 (1964).

[37] K. Millard e H. S. Leff, *J. Math. Phys.* **12**, 1000 (1971).

[38] Magnus Manson, *Phys. Rev. B* **12**, 400 (1975).

[39] M. B. Cibils, Y. Cuche e G. Müller, *Z. Phys. B* **97**, 565 (1995).

[40] A. Barenco, *Contemp. Phys.* **37**, 375 (1996).

[41] M. B. Plenio, V. Vedral e P. L. Knight, *Phys. World* **9**, 19 (1996).

[42] N. Gisin, *Phys. Lett. A* **210**, 151 (1996).

[43] C. H. Bennett *et al*, *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).

[44] C. H. Bennett *et al*, *Phys. Rev. A* **54**, 3284 (1996).

[45] V. Vedral *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2275 (1997).

[46] A. Wehrl, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 221 (1978).

[47] H. Araki e E. H. Lieb, *Commun. Math. Phys.* **18**, 160 (1970).

[48] U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 74 (1957).

[49] W. H. Zurek e J. P. Paz, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2508 (1994).

[50] J. I. Kim, M. C. Nemes, A. F. R. de Toledo Piza e H. E. Borges, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 207 (1996).

[51] P. C. Lichtner e J. J. Griffin, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 1521 (1976).

[52] R. M. Angelo, K. Furuya, M. C. Nemes e G. Q. Pellegrino, *Phys. Rev. E* **60**, 5407 (1999).

[53] J. N. Bandyopadhyay e A. Lakshminarayan, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 060402-1 (2002).

[54] E. Schrödinger, *Proc. Cambridge Philos. Soc* **31**, 555 (1935).

[55] E. Schrödinger, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **32**, 446 (1936).

[56] M. C. Nemes e A. F. R. de Toledo Piza, *Physica A* **137**, 367 (1986).

[57] A. Ekert e P. L. Knight, *Am. J. Phys.* **63**, 415 (1995).

[58] R. M. Angelo, K. Furuya, M. C. Nemes e G. Q. Pellegrino, *Phys. Rev. A* **64**, 043801 (2001).

[59] J. P. Paz e W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5181 (1999).

[60] J. P. Paz e W. H. Zurek, e-print: quant-ph/0010011 (2000).

[61] D. Monteoliva e J. P. Paz, *Phys. Rev. E* **85**, 3373 (2000).

[62] Michael Berry, "Some Quantum-To-Classical Asymptotics", Les Houches, Session LII; Chaos et Physique Quantique/Chaos e Quantum Physics (1989).

[63] M. Baranger, M. A. M. de Aguiar, F. Keck, H. J. Korsch e B. Schellaaβ, *J. Phys. A - Math. e Gen.* **34**, 7227 (2001); e-print: quant-ph/0105153 (2001).

[64] A. D. Ribeiro. *Limite Semiclássico de Sistemas Caóticos via Estados Coerentes: o Papel das Órbitas Complexas.* Tese de Mestrado, IFGW - UNICAMP, 2000.

[65] S. R. A. Salinas. *Introdução à Física Estatística.* EdUSP, São Paulo, 1ª edição, 1997.

[66] A. Lakshminarayan, e-print: quant-ph/0107078 (2001).

[67] D. Collins e S. Popescu, *Phys. Rev. A* **65**, 032321 (2002); e-print: quant-ph/0107082.

[68] S. G. Mokarzel, A. N. Salgueiro e M. C. Nemes, *Phys. Rev. A* **65**, 044101 (2002).

[69] Zoubi *et al*, *Phys. Rev. A* **62**, 033801 (2000).

[70] A. O. Caldeira. *Alguns Aspectos da Dinâmica Quântica de uma Partícula Browniana.* Notas de Física, IFGW, 1994.

[71] R. M. Angelo, S. Vitiello, M. A. M. de Aguiar e K. Furuya, em preparação.

[72] Al Shenk. *Cálculo e Geometria Analítica.* Editora Campus, Rio de Janeiro, 4ª edição, 1984.

[73] Nelson Fiedler-Ferrara e Carmen P. Cintra do Prado. *Caos - Uma Introdução.* Editora Edgard Blücher Ltda, São Paulo, 1ª edição, 1994.

[74] W. H. Louisell. *Quantum Statistical Properties of Radiation.* John Wiley & Sons, USA, 1ª edição, 1973.

[75] S. Furuichi e M. Ohya, *Lett. Math. Phys.* **49**, 279 (1999).

[76] G. J. Milburn, *Phys. Rev. A* **33**, 674 (1986).

[77] J. H. Eberly, N. B. Narozhny e J. J. Sanchez - Mondragon, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1323 (1980).

[78] N. B. Narozhny, J. J. Sanchez - Mondragon e J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **23**, 236 (1981).

[79] G. S. Agarwal e R. R. Puri, *Phys. Rev. A* **39**, 2969 (1989).

[80] J. Banerji, *PRAMANA - J. Phys.* **56**, 267 (2001).

[81] L. Sanz, R. M. Angelo e K. Furuya, submetido ao *J. Phys. A* (2003).

[82] Liliana Sanz. *Aplicação das Funções de Quase-Probabilidade no Estudo da Dinâmica de Emaranhamento.* Tese de Doutorado (em preparação), IFGW - UNICAMP, 2003.

[83] Alfredo M. Ozório de Almeida. *Caos e Quantização.* Editora da UNICAMP, Campinas, 1ª edição, 1995.

[84] A. O. Caldeira e A. J. Leggett, *Physica A* **121**, 587 (1983).

[85] S. Habib *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 040402 (2002).

[86] W. H. Louisell. *Radiation and Noise in Quantum Eletronics.* McGraw-Hill, New York, 1964.

[87] K. E. Cahill e R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **177**, 1857 (1969).

[88] A. Royer, *Phys. Rev. A* **43**, 44 (1991).

[89] M. A. Marchiolli, *Rev. Bras. Ens. Física* **24**, 421 (2002).

[90] L. E. Ballentine e S. M. McRae, *Phys. Rev. A* **58**, 1799 (1998).

[91] G. P. Berman, A. M. Iomin e G. M. Zaslavsky, *Physica D* **4**, 113 (1981).

[92] G. P. Berman e G. M. Zaslavsky, *Physica A* **91**, 450 (1978).

[93] R. M. Angelo, L. Sanz e K. Furuya, submetido à *Phys. Rev. E* (2003).

[94] Ulrich Weiss. *Quantum Dissipative Systems*. World Scientific, Singapore, 1ª edição, 1993.

[95] J. G. Peixoto de Faria, "Técnicas de Desacoplamento de Exponenciais de Operadores Não-Comutativos", notas de aula, ICEx - UFMG, 2000.

[96] H. E. Borges. *Mecânica Estatística Quântica de Sistemas Abertos Markovianos: Uma Abordagem por Álgebras de Lie*. Tese de Doutorado, ICEx - UFMG, 1996.

[97] J. S. Mondragón e K. B. Wolf. *Lie Methods in Optics*. Springer-Verlag, Germany, 1985.

Apêndice A

Artigo de P. Ehrenfest

Neste apêndice apresentamos a tradução de Daniel Vogt sobre um artigo bastante interessante de P. Ehrenfest, no qual encontramos a demonstração original do *teorema de Ehrenfest*. É neste artigo também que se encontra a primeira estimativa do que se definiu mais tarde como o *tempo de Ehrenfest*, e por essa razão este artigo nos é particularmente interessante. Há também um motivo pedagógico para a inclusão desta tradução neste apêndice, visto que se trata de um tópico bastante fundamental em mecânica quântica. Que fique explicitada então nossa gratidão a este útil trabalho de tradução do colega Daniel.

Observação sobre a validade aproximada da mecânica clássica dentro da mecânica quântica.

Por **P. Ehrenfest** em Leiden, Países Baixos.

A partir da equação de Schrödinger, por meio de um breve cálculo elementar sem aproximações, deduz-se a relação

$$m\frac{d^2}{dt^2}\iiint \mathrm{d}\tau\, \Psi\Psi^* x = \iiint \mathrm{d}\tau\, \Psi\Psi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right),$$

que prevê, para um pacote de onda pequeno e que permanece pequeno (m da ordem de 1 g), a aceleração de suas coordenadas de posição se ajusta à força local $-\frac{\partial V}{\partial x}$ no sentido das equações de movimento newtonianas.

É desejável que se possa responder à seguinte questão de uma maneira na medida do possível elementar: qual retrospecto se dá do ponto de vista da mecânica quântica sobre as equações newtonianas fundamentais da mecânica clássica? Por meio de uma série de publicações recentes ficou essencialmente esclarecido que, e até que ponto, a mecânica clássica permanece válida com alta aproximação para fenômenos macroscópicos[1]. Permite-se, porém, apontar brevemente uma relação particularmente elementar que decorre da equação de Schrödinger sem nenhuma aproximação, porque ela talvez exponha a conexão entre mecânica ondulatória e mecânica clássica de um modo ainda mais cômodo.

É suficiente apresentar-se as equações para o caso de um único grau de liberdade, portanto para a seguinte forma da equação de Schrödinger

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = ih\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{A.1}$$

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + V(x)\Psi^* = -ih\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}. \tag{A.2}$$

Denomina-se então

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, x\Psi\Psi^* \equiv Q(t), \tag{A.3}$$

$$ih\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} \equiv P(t), \quad [2] \tag{A.4}$$

e calcula-se $\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t}$ e $\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t}$ com uso de (A.1) e (A.3). Por substituição e integração parcial resulta imediatamente (e sem aproximações):

$$\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}P, \tag{A.5}$$

$$m\frac{\mathrm{d}^2Q}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} = \int \mathrm{d}x\, \Psi\Psi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right). \tag{A.6}$$

[1] Louis de Broglie, Thèse 1924; Journ. de phys. et le Rad. (6) **7**, 1, 32, 1926; C. R. **180**, 498, 1925; **183**, 272, 1926. – L. Brillouin, Journ. de phys. et le Rad. **7**, 353, 1926. – E. Schrödinger, Naturwiss. **14**, 664, 1926. – P. Debye, Phys. ZS. **28**, 170, 1927. – W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **43**, 172, 1927. – E. H. Kennard, ZS. f. Phys. **44**, 326, 1927.

[2] O desenvolvimento de Ψ nas autofunções: $\Psi = \sum c_n e^{\frac{iE_n}{h}t}\varphi_n(x)$ fornece a relação para as matrizes $q_{nm} = e^{\frac{i}{h}(E_n - E_m)t}\int \mathrm{d}x\, x\varphi_n\varphi_m$ e p_{nm}.

Equação (A.6) mostra explicitamente: sempre que a largura do pacote de onda (probabilístico) $\Psi\Psi^*$ for bastante pequeno (em relação a distâncias macroscópicas), a aceleração (do centro de massa Q) do pacote de onda se ajusta à força $\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)$ "atuante na posição do pacote de onda" no sentido das equações newtonianas.

Observações: o gradual alargamento de um pacote de onda foi discutido detalhadamente por Heisenberg, obra citada. Seu cálculo para o exemplo do movimento unidimensional de um ponto material na ausência de forças pode tornar-se talvez mais familiar por meio de uma relação próxima com cálculos conhecidos sobre condução de calor. Para $V(x) = 0$ a equação de Schrödinger tem a estrutura de uma equação de condução de calor:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}, \tag{A.7}$$

com

$$a^2 = i\frac{h}{2m} \tag{A.8}$$

Substituindo na sua solução geral (ver, por exemplo, Riemann-Weber, v. II)

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\xi e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4a^2 t}} \Psi(0,\xi) \tag{A.9}$$

a condição inicial:

$$\Psi(0,\xi) = Ce^{\frac{\xi^2}{2\omega^2} + i\mu\xi}, \tag{A.10}$$

portanto

$$(\Psi\Psi^*)_{t=0} = C^2 e^{-\frac{\xi^2}{\omega^2}} \tag{A.11}$$

(μ uma constante real arbitrária), encontra-se, assim como Heisenberg obteve para a localização e distribuição do "pacote de onda" num tempo posterior:

$$\Psi\Psi^* = c(t)e^{-\frac{(x-\frac{h\mu}{m}t)^2}{\Omega^2}}, \tag{A.12}$$

onde

$$\Omega^2 = \omega^2 + \frac{h^2 t^2}{m^2 \omega^2}, \tag{A.13}$$

logo um deslocamento do pacote de onda com velocidade $h\mu/m$ e um alargamento crescente no tempo. A largura inicial dobra (i. e. $\Omega^2 = 4\omega^2$) após o tempo

$$T = \sqrt{3}\frac{m\omega^2}{h} \qquad \left(h = \frac{6{,}6 \times 10^{-27}}{2\pi}\right). \tag{A.14}$$

Para $m = 1$ g, $\omega = 10^{-3}$ cm tem-se $T = 10^{21}$ s; por sua vez para $m = 1{,}7 \times 10^{-24}$ g e $\omega = 10^{-8}$ cm tem-se $T = 10^{-13}$ s!

Apêndice B

Desacoplamento de Exponenciais de Operadores Não-Comutativos

O conteúdo que apresentaremos aqui foi integralmente retirado das referências [95–97].

As técnicas de desacoplamento de exponenciais de operadores não comutativos são extremamente úteis para a solução analítica de equações famosas como

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{\widehat{H}t}{\imath\hbar}}|\psi(0)\rangle \qquad \text{e} \qquad \widehat{\rho}(t) = e^{\widehat{\mathcal{L}}t}\widehat{\rho}(0), \tag{B.1}$$

sendo $\widehat{\mathcal{L}} = \frac{[\widehat{H},\cdot]}{\imath\hbar}$ o superoperador Liouvilliano. De forma bastante genérica, o desacoplamento é proposto na seguinte forma:

$$e^{\left(\sum\limits_{i=1}^{N}\alpha_i\widehat{O}_i\right)} = \prod_{i=1}^{N}\left(e^{\lambda_i\widehat{O}_i}\right), \tag{B.2}$$

sendo α_i e λ_i números complexos e $\widehat{O}_i$ operadores de um conjunto $\mathcal{A} = \{\widehat{O}_1, \widehat{O}_2, \cdots, \widehat{O}_N\}$ de uma *álgebra de Lie fechada* (finita) de N elementos que satisfaz a condição

$$\left[\widehat{O}_i, \widehat{O}_j\right] = \sum_{k=1}^{N} c_{ijk}\widehat{O}_k. \tag{B.3}$$

Uma das formas de desacoplamento mais conhecida é a fórmula deduzida por **B**aker-**C**ampbell-**H**ausdorff. Dado o superoperador $\left[\widehat{A}, \centerdot\right]$, que atua sobre o operador $\widehat{B}$ segundo a prescrição $\left[\widehat{A}, \centerdot\right]\widehat{B} = \left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]$, mostra-se que

$$\blacktriangle \qquad e^{\widehat{A}}\widehat{B}e^{-\widehat{A}} = e^{[\widehat{A},\cdot]}\widehat{B} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{[\widehat{A},\centerdot]^k}{k!}\widehat{B}. \tag{B.4}$$

A partir deste resultado são obtidas as seguintes *fórmulas* ***BCH***:

$$\blacktriangle \qquad \begin{cases} e^{\widehat{A}+\widehat{B}} = e^{\widehat{A}}e^{\widehat{B}}e^{\widehat{C}_2}e^{\widehat{C}_3}e^{\widehat{C}_4}\ldots, \\ \\ e^{\widehat{A}+\widehat{B}} = \ldots e^{-\widehat{C}_4}e^{-\widehat{C}_3}e^{-\widehat{C}_2}e^{\widehat{B}}e^{\widehat{A}}, \end{cases} \tag{B.5}$$

$$\widehat{C}_2 = -\frac{1}{2}\left[\widehat{A},\widehat{B}\right], \qquad \widehat{C}_3 = \frac{1}{6}\left[\widehat{A},\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]\right] + \frac{1}{3}\left[\widehat{B},\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]\right], \qquad \cdots$$

Um exemplo bastante simples da aplicação das fórmulas BCH pode ser dado para o *operador deslocamento* $\widehat{\mathcal{D}}$, definido por $\widehat{\mathcal{D}}(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle$. A aplicação das fórmulas leva a

$$\widehat{\mathcal{D}}(\alpha) = e^{\alpha\widehat{a}^\dagger - \alpha^*\widehat{a}} \equiv e^{\widehat{A}+\widehat{B}}, \tag{B.6}$$

com

$$\begin{cases} \widehat{C}_2 = -\frac{1}{2}\left[\alpha\widehat{a}^\dagger, -\alpha^*\widehat{a}\right] = -\frac{1}{2} \mid \alpha \mid^2 \mathbf{1}, \\ \widehat{C}_3 = \widehat{C}_4 = \cdots = \widehat{C}_N = \cdots = 0, \end{cases} \tag{B.7}$$

$$\therefore \qquad \widehat{\mathcal{D}}(\alpha) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha\widehat{a}^\dagger} e^{-\alpha^*\widehat{a}}. \tag{B.8}$$

Esta forma desacoplada é muito mais interessante para a solução de problemas. Note-se, por exemplo, que a demonstração da identidade $\widehat{\mathcal{D}}(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle$ pode ser feita de forma imediata.

B.1 Expansões Ordenadas

Há problemas em que pode ser bastante conveniente escolhermos um ordenamento adequado para o desacoplamento. Nesses casos, as fórmulas BCH não serão suficientes. Precisamos lançar mão então de técnicas especiais de desacoplamento, as quais passamos a descrever.

B.1.1 Técnica Matricial de Gilmore

Dada a álgebra $\mathcal{A} = \{\widehat{A}_1, \widehat{A}_2, \cdots, \widehat{A}_N\}$, trabalhamos com a forma matricial das expansões das exponenciais, para obter

$$e^{a_1\widehat{A}_1 + a_2\widehat{A}_2 + \cdots + a_N\widehat{A}_N} = e^{\bar{a}_1\widehat{A}_1} e^{\bar{a}_2\widehat{A}_2} \cdots e^{\bar{a}_N\widehat{A}_N}, \tag{B.9}$$

em que $\bar{a}_i = \bar{a}_i(a_1, a_2, \cdots, a_N)$. Esse método é bastante adequado aos casos em que a representação matricial é simples e de baixa dimensionalidade.

Exemplo: Álgebra $SU(2)$ do momento angular

Seja a seguinte representação **fiel** para as matrizes do grupo $SU(2)$

$$\widehat{S}_z \doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \qquad \widehat{S}_+ \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \widehat{S}_- \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{B.10}$$

que obedecem às regras usuais de comutação

$$\left[\widehat{S}_z, \widehat{S}_\pm\right] = \pm\widehat{S}_\pm \qquad \text{e} \qquad \left[\widehat{S}_+, \widehat{S}_-\right] = 2\widehat{S}_z. \tag{B.11}$$

Então, depois de alguma álgebra pode-se chegar a

$$e^{w_+\widehat{S}_+ + w_z\widehat{S}_z + w_-\widehat{S}_-} = \begin{pmatrix} \cosh k + \frac{1}{2k} w_z \operatorname{senh} k & \frac{w_+}{k}\operatorname{senh} k \\ \frac{w_-}{k}\operatorname{senh} k & \cosh k - \frac{1}{2k} w_z \operatorname{senh} k \end{pmatrix}. \tag{B.12}$$

Por outro lado, partindo também das matrizes dadas em (B.10), escrevemos

$$e^{\mu_+\widehat{S}_+}e^{\mu_z\widehat{S}_z}e^{\mu_-\widehat{S}_-} = \begin{pmatrix} e^{\mu_z/2}+\mu_+\mu_-e^{-\mu_z/2} & \mu_+e^{-\mu_z/2} \\ \mu_-e^{-\mu_z/2} & e^{-\mu_z/2} \end{pmatrix}. \tag{B.13}$$

Então, por comparação direta de (B.12) com (B.13), chegamos ao resultado final

$$\begin{cases} \mu_z = \ln\left(\frac{2k}{2k\cosh k - w_z \operatorname{senh} k}\right), \qquad \mu_\pm = w_\pm \frac{\operatorname{senh} k}{k}\mu_z, \\ \\ k = \sqrt{\frac{1}{4}w_z^2 + w_+w_-}. \end{cases} \tag{B.14}$$

B.1.2 Técnica de Transformação de Similaridade de Witschel

Esta técnica será apresentada através de um exemplo que desacopla o operador evolução temporal de um oscilador harmônico forçado, o qual é descrito pelo seguinte Hamiltoniano quântico:

$$\widehat{H} = \omega\widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \left(w_+\widehat{a}^\dagger + w_-\widehat{a}\right). \tag{B.15}$$

Para este sistema, define-se a álgebra de Lie $\mathcal{A} = \left\{\widehat{a}^\dagger\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger, \widehat{a}, \mathbf{1}\right\}$, à qual pertence o próprio $\widehat{H}$. Nosso objetivo, é obter a seguinte forma desacoplada ordenada:

$$e^{\widehat{H}} = e^{g_+\widehat{a}^\dagger}e^{g\widehat{a}^\dagger\widehat{a}}e^{g_-\widehat{a}}e^{g'}. \tag{B.16}$$

A técnica de transformação de similaridade está fundamentada em uma identidade bastante importante, que é demonstrada por

$$\begin{aligned} e^{[\widehat{A},\,\cdot\,]}e^{\widehat{B}} &= e^{\widehat{A}}e^{\widehat{B}}e^{-\widehat{A}} = e^{\widehat{A}}\left(\mathbf{1} + \widehat{B} + \frac{1}{2!}\widehat{B}e^{-\widehat{A}}e^{\widehat{A}}\widehat{B} + \cdots\right)e^{-\widehat{A}} \\ &= \mathbf{1} + e^{\widehat{A}}\widehat{B}e^{-\widehat{A}} + \frac{1}{2!}\left(e^{\widehat{A}}\widehat{B}e^{-\widehat{A}}\right)^2 + \cdots = e^{\{e^{\widehat{A}}\widehat{B}e^{-\widehat{A}}\}} = e^{\{e^{[\widehat{A},\,\cdot\,]}\widehat{B}\}} \\ &\therefore \qquad e^{[\widehat{A},\,\cdot\,]}e^{\widehat{B}} = e^{\{e^{[\widehat{A},\,\cdot\,]}\widehat{B}\}}. \end{aligned} \tag{B.17}$$

Utilizamos agora um parâmetro λ para escrever

$$e^{\widehat{H}} = e^{-\lambda\widehat{a}}e^{\lambda\widehat{a}}e^{\widehat{H}}e^{-\lambda\widehat{a}}e^{\lambda\widehat{a}} = e^{-\lambda\widehat{a}}\left(e^{\lambda[\widehat{a},\,\cdot\,]}e^{\widehat{H}}\right)e^{\lambda\widehat{a}} = e^{-\lambda\widehat{a}}e^{\{e^{\lambda[\widehat{a},\,\cdot\,]}\widehat{H}\}}e^{\lambda\widehat{a}}. \tag{B.18}$$

Agora notamos que

$$\begin{aligned} \lambda^0\,[\widehat{a},\,\boldsymbol{.}\,]^0\,\widehat{H} &= \widehat{H}, \\ \lambda^1\,[\widehat{a},\,\boldsymbol{.}\,]^1\,\widehat{H} &= \lambda\left[\widehat{a},\widehat{H}\right] = \lambda\,\omega\widehat{a} + \lambda\,w_+, \\ \lambda^2\,[\widehat{a},\,\boldsymbol{.}\,]^2\,\widehat{H} &= \lambda^2\left[\widehat{a},\left[\widehat{a},\widehat{H}\right]\right] = 0, \\ &\vdots \\ \lambda^n\,[\widehat{a},\,\boldsymbol{.}\,]^n\,\widehat{H} &= 0. \end{aligned} \tag{B.19}$$

Logo

$$e^{\widehat{H}} = e^{-\lambda\widehat{a}} \exp\left\{\omega\widehat{a}^{\dagger}\widehat{a} + w_{+}\widehat{a}^{\dagger} + \lambda\, w_{+} + (\lambda\,\omega + w_{-})\widehat{a}\right\} e^{\lambda\widehat{a}}. \tag{B.20}$$

Agora, escolhendo $\lambda = -\dfrac{w_{-}}{\omega}$, obtemos

$$e^{\widehat{H}} = e^{\frac{w_{-}}{\omega}\widehat{a}} \exp\left\{\omega\widehat{a}^{\dagger}\widehat{a} + w_{+}\widehat{a}^{\dagger}\right\} e^{-\frac{w_{-}}{\omega}\widehat{a}} e^{\frac{w_{+}w_{-}}{\omega}}. \tag{B.21}$$

Utilizamos então a técnica matricial para mostrar que

$$\exp\left\{\omega\widehat{a}^{\dagger}\widehat{a} + w_{+}\widehat{a}^{\dagger}\right\} = e^{\frac{w_{+}}{\omega}(e^{\omega}-1)\widehat{a}^{\dagger}} e^{\omega\widehat{a}^{\dagger}\widehat{a}}. \tag{B.22}$$

Então, utilizando este resultado, voltamos a (B.21), aplicamos as fórmulas BCH para fazer as comutações necessárias e obtemos o formato final desejado:

$$\blacktriangle \qquad e^{\widehat{H}} = e^{\frac{w_{+}}{\omega}(e^{\omega}-1)\widehat{a}^{\dagger}} e^{\omega\,\widehat{a}^{\dagger}\widehat{a}} e^{\frac{w_{-}}{\omega}(e^{\omega}-1)\widehat{a}} e^{\frac{w_{+}w_{-}}{\omega^{2}}(e^{\omega}-1-\omega)}. \tag{B.23}$$

B.1.3 Técnica de Derivação de Parâmetros de Wilcox

Definida a álgebra $\mathcal{A} = \{\widehat{A}_1, \widehat{A}_2, \cdots, \widehat{A}_n\}$, procuramos por

$$e^{\left(a_1\widehat{A}_1 + \cdots + a_n\widehat{A}_n\right)t} = e^{b_1(t)\widehat{A}_1} \cdots e^{b_n(t)\widehat{A}_n}. \tag{B.24}$$

Então, tomando a derivada em relação a t, obtemos

$$\begin{aligned}\left(a_1\widehat{A}_1 + \cdots + a_n\widehat{A}_n\right) e^{\left(a_1\widehat{A}_1 + \cdots + a_n\widehat{A}_n\right)t} &= \dot{b}_1\widehat{A}_1 e^{b_1\widehat{A}_1} \cdots e^{b_n\widehat{A}_n} \\ &+ \dot{b}_2 e^{b_1\widehat{A}_1}\widehat{A}_2 e^{b_2\widehat{A}_2} \cdots e^{b_n\widehat{A}_n} \cdots \\ &+ \dot{b}_n e^{b_1\widehat{A}_1} \cdots \widehat{A}_n e^{b_n\widehat{A}_n}.\end{aligned} \tag{B.25}$$

Agora utilizamos as fórmulas BCH para calcular

$$e^{b_1\widehat{A}_1}\widehat{A}_2 = e^{b_1\widehat{A}_1}\widehat{A}_2 e^{-b_1\widehat{A}_1} e^{b_1\widehat{A}_1} = \left(e^{b_1[\widehat{A}_1,\cdot]}\widehat{A}_2\right) e^{b_1\widehat{A}_1} = f_2\left(b_1(t), \{\widehat{A}_i\}\right) e^{b_1\widehat{A}_1}. \tag{B.26}$$

Da mesma forma obtém-se

$$\begin{cases} f_3 &= f_3\left(b_1(t), b_2(t), \{\widehat{A}_i\}\right), \\ &\vdots \\ f_n &= f_n\left(b_1(t), \cdots, b_n(t), \{\widehat{A}_i\}\right). \end{cases} \tag{B.27}$$

Então, voltamos à equação (B.25) para obter

$$\left(a_1\widehat{A}_1 + \cdots + a_n\widehat{A}_n\right) e^{\left(a_1\widehat{A}_1 + \cdots + a_n\widehat{A}_n\right)t} = \left(\dot{b}_1\widehat{A}_1 + \dot{b}_2 f_2 + \cdots + \dot{b}_n f_n\right) e^{b_1\widehat{A}_1} \cdots e^{b_n\widehat{A}_n}$$

$$\blacktriangle \qquad \left(a_1\widehat{A}_1 + \cdots + a_n\widehat{A}_n\right) = \left(\dot{b}_1\widehat{A}_1 + \dot{b}_2 f_2 + \cdots + \dot{b}_n f_n\right). \tag{B.28}$$

B.2 Aplicação: Solução da Equação Mestra a $T = 0$

Um problema bastante interessante que pode ser resolvido por meio das técnicas de desacoplamento é a equação mestra a temperatura nula. Trata-se de uma equação que representa a evolução temporal de um oscilador harmônico em contato com um reservatório de osciladores harmônicos, cada qual com sua frequência característica, em equilíbrio a temperatura T. Aqui resolveremos o caso mais simples, em que $T = 0$.

Estaremos interessados em resolver a equação

$$\widehat{\rho}(t) = e^{\widehat{\mathcal{L}}t}\widehat{\rho}(0), \tag{B.29}$$

analisando em particular o caso em que o estado inicial $\widehat{\rho}(0)$ representa um estado de gato de Schrödinger. O primeiro passo entretanto será desacoplar os superoperadores contidos no Liouvilliano $\widehat{\mathcal{L}}$, o qual, para a equação mestra a $T = 0$ [74], é descrito por

$$\widehat{\mathcal{L}} = -\imath\omega\left[\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\,\centerdot - \centerdot\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\right] + \frac{\gamma}{2}\big(2\widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger - \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\,\centerdot - \centerdot\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\big), \tag{B.30}$$

sendo ω a frequência natural do oscilador harmônico (sistema de interesse) e γ a constante de dissipação, oriunda da interação com o reservatório. Definamos então uma possível álgebra de Lie para o problema[1]:

$$\widehat{\mathcal{L}} = x\widehat{A} + y\widehat{B} + \gamma\widehat{C}, \tag{B.31}$$

$$\begin{cases} \widehat{A} = \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\centerdot \\ \widehat{B} = \centerdot\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a} \\ \widehat{C} = \widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger, \end{cases} \tag{B.32}$$

com $x = \left(-\imath\omega - \frac{\gamma}{2}\right)$ e $y = \left(-\imath\omega + \frac{\gamma}{2}\right)$. Para a álgebra definida por $\mathcal{A} = \{\widehat{A}, \widehat{B}, \widehat{C}, \mathbf{1}\}$, valem as seguintes relações de comutação:

$$\begin{aligned} \left[\widehat{A}, \widehat{B}\right] &= \left[\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\centerdot, \centerdot\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\right] = \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a} - \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a} = 0, \\ \left[\widehat{A}, \widehat{C}\right] &= \left[\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\centerdot, \widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger\right] = \widehat{a}^\dagger\widehat{a}\underbrace{\widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger}_{\widehat{C}} - \widehat{a}\widehat{a}^\dagger\underbrace{\widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger}_{\widehat{C}} = -\widehat{C}, \\ \left[\widehat{B}, \widehat{C}\right] &= \left[\centerdot\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a}, \widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger\right] = \underbrace{\widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger}_{\widehat{C}}\widehat{a}^\dagger\widehat{a} - \underbrace{\widehat{a}\,\centerdot\,\widehat{a}^\dagger}_{\widehat{C}}\widehat{a}\widehat{a}^\dagger = -\widehat{C}. \end{aligned} \tag{B.33}$$

Agora, aplicamos a técnica de derivação de parâmetros de Wilcox a fim de obtermos o seguinte desacoplamento ordenado:

$$\widehat{\rho}(t) = e^{(x\widehat{A}+y\widehat{B}+\gamma\widehat{C})t} = e^{a(t)\widehat{A}}e^{b(t)\widehat{B}}e^{c(t)\widehat{C}}. \tag{B.34}$$

[1] Somente a posteriori podemos concluir que esta é a escolha mais conveniente, mas certamente não é a única possível.

De acordo com a técnica de Wilcox, resta-nos então a seguinte equação para resolvermos:

$$x\widehat{A} + y\widehat{B} + \gamma\widehat{C} \;=\; \dot{a}\widehat{A} + \dot{b}\left(e^{a[\widehat{A},\cdot]}\widehat{B}\right) + \dot{c}\,\left[e^{a[\widehat{A},\cdot]}\left(e^{b[\widehat{B},\cdot]}\widehat{C}\right)\right]. \tag{B.35}$$

Utilizando as relações de comutação (B.33), calculamos

- $$e^{a[\widehat{A},\cdot]}\widehat{B} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\left[\widehat{A},\,\cdot\right]^n\widehat{B} = \widehat{B}, \tag{B.36}$$

- $$e^{b[\widehat{B},\cdot]}\widehat{C} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{b^n}{n!}\left[\widehat{B},\,\cdot\right]^n\widehat{C} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{b^n}{n!}(-1)^n\widehat{C} = e^{-b}\widehat{C}, \tag{B.37}$$

  em que usamos

$$\begin{aligned}
\left[\widehat{B},\,\cdot\right]^1\widehat{C} &= \;\;\left[\widehat{B},\widehat{C}\right] = (-1)\widehat{C},\\
\left[\widehat{B},\,\cdot\right]^2\widehat{C} &= -\left[\widehat{B},\widehat{C}\right] = (-1)^2\widehat{C},\\
&\;\;\vdots\\
\left[\widehat{B},\,\cdot\right]^n\widehat{C} &= (-1)^n\widehat{C}.
\end{aligned} \tag{B.38}$$

- $$e^{a[\widehat{A},\cdot]}\left(e^{b[\widehat{B},\cdot]}\widehat{C}\right) = \left(e^{a[\widehat{A},\cdot]}\widehat{C}\right)e^{-b} = e^{-a}e^{-b}\widehat{C} = e^{-(a+b)}\widehat{C}. \tag{B.39}$$

Com esses resultados, voltamos à equação (B.35) para escrever

$$x\widehat{A} + y\widehat{B} + \gamma\widehat{C} = \dot{a}\widehat{A} + \dot{b}\widehat{B} + \dot{c}e^{-(a+b)}\widehat{C},$$

$$\left\{\begin{array}{l}\dot{a} = x\\ \dot{b} = y\\ \dot{c} = \gamma e^{-(a+b)}\end{array}\right. \quad\rightarrow\quad \left\{\begin{array}{l}a(t) = -\left(\imath\omega + \frac{\gamma}{2}\right)t\\ b(t) = \left(\imath\omega - \frac{\gamma}{2}\right)t\\ c(t) = \left(1 - e^{-\gamma t}\right),\end{array}\right. \tag{B.40}$$

para escolhas convenientes de $a(0)$, $b(0)$ e $c(0)$. Ao final, obtem-se a seguinte forma desacoplada:

▲ $$\widehat{\rho}(t) = e^{-\left(\imath\omega+\frac{\gamma}{2}\right)t\,\widehat{a}^\dagger\widehat{a}\,\cdot}\; e^{\left(\imath\omega-\frac{\gamma}{2}\right)t\,\cdot\,a^\dagger\widehat{a}}\; e^{\left(1-e^{-\gamma\,t}\right)\widehat{a}\,\cdot\,\widehat{a}^\dagger}\;\widehat{\rho}(0). \tag{B.41}$$

Note-se que o desacoplamento é feito independentemente do formato do estado inicial. Além disso, a forma final pode ser aplicada facilmente a qualquer estado inicial para o qual se conheça sua expansão na base de estados de número, o que em geral é sempre possível.

B.2.1 Evolução Dissipativa do Gato de Schrödinger

Um caso bastante interessante e que nos ensina muito sobre o fenômeno da descoerência é o da evolução de um gato de Schrödinger. Seja o estado

$$| G_{\pm}\rangle = \frac{| \alpha_0\rangle \pm | - \alpha_0\rangle}{\sqrt{2\left(1 \pm e^{-2|\alpha_0|^2}\right)}}, \tag{B.42}$$

o qual representa um estado de gato *par* ("+") e ímpar ("−"). A matriz densidade de um tal estado puro é dada por

$$\widehat{\rho}(0) = \frac{| \alpha_0\rangle\langle\alpha_0 | + | -\alpha_0\rangle\langle -\alpha_0 | \pm \Big(| -\alpha_0\rangle\langle\alpha_0 | + | \alpha_0\rangle\langle -\alpha_0 |\Big)}{2\left(1 \pm e^{-2|\alpha_0|^2}\right)}, \tag{B.43}$$

na qual nota-se claramente a presença de termos não-diagonais "não-clássicos": as *coerências*. Utilizando a expansão dos estados coerentes na base dos estados de número, podemos aplicar a fórmula (B.41) para encontrar o estado evoluído

$$\widehat{\rho}(t) = \frac{| \alpha_t\rangle\langle\alpha_t | + | -\alpha_t\rangle\langle -\alpha_t | \pm \Gamma(t)\Big(| -\alpha_t\rangle\langle\alpha_t | + | \alpha_t\rangle\langle -\alpha_t |\Big)}{2\left(1 \pm e^{-2|\alpha|^2}\right)}, \tag{B.44}$$

com

$$\begin{cases} \alpha_t = \left(\alpha_0 e^{-\imath\omega t}\right) e^{-\frac{\gamma}{2}t}, \\ \\ \Gamma(t) = e^{-2|\alpha_0|^2\left(1-e^{-\gamma\, t}\right)}. \end{cases} \tag{B.45}$$

Este resultado nos ensina uma série de pontos interessantes sobre o fenômeno da descoerência, o grande responsável pelo processo de classicalização de estados não-clássicos e, consequentemente, pela garantia da validade do princípio da correspondência de Bohr [15].

Vejamos alguns regimes interessantes contemplados pelo resultado (B.44):

- A situação de equilíbrio ($t \to \infty$) é corretamente descrita por

$$\widehat{\rho}(\infty) \to |0\rangle\langle 0|, \tag{B.46}$$

  que representa o estado de vácuo do oscilador harmônico. De fato, à temperatura nula, é esperado que toda a energia do sistema escoe para o reservatório, num processo irreversível.

- O regime de evolução unitária coerente é recuperado no limite de $\gamma \to 0$.

- O processo de classicalização (descoerência) é descrito pelo parâmetro $\Gamma(t)$, que mostra como "morrem" as coerências à medida que o tempo passa. No equilíbrio ($t \to \infty$), o sistema se torna *clássico*: a superposição inicial de estados macroscópicos, concebível apenas no mundo quântico, evolui para uma mistura estatística de estados coerentes (na escala do tempo de descoerência), a qual representa essencialmente um estado clássico.

- Podemos estimar o tempo de descoerência τ_D do sistema como sendo o instante em que as coerências começam a ficar desprezíveis. Matematicamente, impomos que $\Gamma(\tau_D) \sim e^{-1}$. Então, utilizando a parametrização usual para o espaço de fase, $\alpha_0 = \frac{q_0 + ip_0}{\sqrt{2\hbar}}$, obtemos

$$\tau_D \cong \tau_R \frac{\hbar}{(p_0^2 + q_0^2)}, \tag{B.47}$$

sendo τ_R o tempo de relaxação definido como

$$\tau_R = \frac{1}{\gamma}. \tag{B.48}$$

Essas estimativas mostram que o tempo de descoerência será tanto menor (e muito menor que o tempo de relaxação) quanto mais próximo da condição clássica, $\frac{\hbar}{(p_0^2+q_0^2)} \to 0$, estiver o estado inicial. Além disso, através dos cálculos realizados nesta tese, somos induzidos a pensar que no regime semiclássico, o tempo de descoerência ($\sim \hbar$) será sempre muito menor que o tempo de Ehrenfest ($\sim \hbar^{-\eta}$). Porém, de forma mais precisa e realista, esta comparação terá sentido somente dentro de um modelo que ofereça a possibilidade de cálculo de ambas as escalas de tempo.

Apêndice C

Variâncias de Estados Coerentes

Neste apêndice faremos uma rápida discussão sobre as diferenças entre as variâncias iniciais ($t = 0$) calculadas nos formalismos quântico e estatístico para estados iniciais coerentes (distribuições Gaussianas).

C.1 Cálculos Quânticos

De acordo com o formalismo quântico usual, em $t = 0$ temos

$$\widehat{\rho}(0) = |\alpha_{10}\rangle\langle\alpha_{10}| \otimes |\alpha_{20}\rangle\langle\alpha_{20}|, \tag{C.1}$$

$$\begin{aligned}
\langle\widehat{Q}_i(0)\rangle &= Tr[\widehat{\rho}(0)\widehat{Q}_i] = Tr_i[\widehat{\rho}_i(0)\widehat{Q}_i] = \langle\alpha_{i0}|\widehat{Q}_i|\alpha_{i0}\rangle \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2}}\langle\alpha_{i0}|(\widehat{a}_i + \widehat{a}_i^\dagger)|\alpha_{i0}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\alpha_{i0} + \alpha_{i0}^*) \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2}}\left(\frac{q_{i0} + \imath p_{i0}}{\sqrt{2\hbar}} + \frac{q_{i0} - \imath p_{i0}}{\sqrt{2\hbar}}\right) \\
&= q_{i0},
\end{aligned} \tag{C.2}$$

em que utilizamos a relação usual entre os rótulos dos estados coerentes α_{i0} e as coordenadas do espaço de fase (q_{i0}, p_{i0}). Calculemos agora $\langle\widehat{Q}_i^2\rangle$ e depois a variância:

$$\begin{aligned}
\langle\widehat{Q}_i^2(0)\rangle &= Tr[\widehat{\rho}(0)\widehat{Q}_i^2] = Tr_i[\widehat{\rho}_i(0)\widehat{Q}_i^2] = \langle\alpha_{i0}|\widehat{Q}_i^2|\alpha_{i0}\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2}\langle\alpha_{i0}|(\widehat{a}_i^\dagger\widehat{a}_i^\dagger + \widehat{a}_{i0}\widehat{a}_i + 2\widehat{n}_i + \mathbf{1})|\alpha_{i0}\rangle = \frac{\hbar}{2}(\alpha_{i0}^{*2} + \alpha_{i0}^2 + 2n_{i0} + 1) \\
&= \frac{\hbar}{2}\left(\frac{q_{i0}^2 - p_{i0}^2 - 2\imath q_{i0}p_{i0}}{2\hbar} + \frac{q_{i0}^2 - p_{i0}^2 + 2\imath q_{i0}p_{i0}}{2\hbar} + 2\frac{q_{i0}^2 + p_{i0}^2}{2\hbar} + 1\right) \\
&= q_{i0}^2 + \frac{\hbar}{2}.
\end{aligned} \tag{C.3}$$

Então,

$$\blacktriangle \qquad \langle\widehat{Q}_i^2(0)\rangle - \langle\widehat{Q}_i(0)\rangle^2 = \frac{\hbar}{2}. \tag{C.4}$$

C.2 Cálculos Estatísticos

Vejamos o caso estatístico:

$$\begin{aligned}\rho(0) &= \frac{\langle \alpha_{10}, \alpha_{20}|\widehat{\rho}(0)|\alpha_{10}, \alpha_{20}\rangle}{(2\pi\hbar)^2} \\ &= \rho_1(0) \otimes \rho_2(0) \\ &= \prod_{k=1}^{2} \frac{e^{-\frac{(q_k - q_{k0})^2}{2\hbar}} e^{-\frac{(p_k - p_{k0})^2}{2\hbar}}}{2\pi\hbar}. \end{aligned} \tag{C.5}$$

Assim, em $t = 0$, tudo o que temos a fazer é resolver integrais Gaussianas:

$$\langle q_i^n(0)\rangle = \int dq_i dp_i q_i^n \rho_i(0) = \int dq_i \, q_i^n \frac{e^{-\frac{(q_i - q_{i0})^2}{2\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \tag{C.6}$$

$$\langle q_i(0)\rangle = q_{i0}, \qquad \langle q_i^2(0)\rangle = q_{i0}^2 + \hbar,$$

$$\blacktriangle \qquad \langle q_i^2(0)\rangle - \langle q_i(0)\rangle^2 = \hbar. \tag{C.7}$$

Esses cálculos parecem indicar que a mecânica clássico-estatística precisa ser sempre "calibrada" inicialmente, isto é, as condições iniciais devem ser escolhidas de forma a reproduzirem os resultados quânticos. De fato, neste caso, poderíamos reproduzir os resultados para a variância quântica utilizando a seguinte largura clássica:

$$\hbar_{\text{clássico}} = \frac{\hbar}{2}. \tag{C.8}$$

De certo modo, isso é análogo à normalização da entropia linear, que é escolhida para que $\delta_i(0) = 0$.