

Universidade Estadual de Campinas

**Efeito do Caos na Evolução Temporal
de Pacotes Semiclássicos**

por

Marcus Vinicius Segantini Bonança

Orientadora: Profa. Dra. Kyoko Furuya

Dissertação submetida ao Instituto de Física “Gleb Wataghin”
para obtenção do título de **Mestre em Física**.

Campinas, São Paulo, Brasil
08/03/2002

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a Profa. Kyoko por ter me dado a oportunidade de estudar este problema tão interessante. Gostaria de agradecer a paciência e insistência que teve comigo nas horas em que eu teimava em não querer enxergar algumas coisas. Gostaria também de agradecer à FAPESP pelo apoio financeiro dado a mim e ao projeto.

Quero agradecer o pessoal do Grupo de Sistemas Dinâmicos: Renato, Alexandre Ribeiro, Josi, Luís Gregório, Fabiano, Alexandre Fontes, Liliana, Fabiana Crepaldi e Prof. Marcus pelos seminários, conversas e ajudas. Aos meus dois companheiros de sala: Júlio e Alexandre, meu muito obrigado também pelas conversas e ajudas. Meu obrigado ao Lázaro, Vitor, Henrique, Jéferson, Cinthia e Fernanda pela amizade, viagens, conversas existenciais e políticas e bate-bolas.

Quero agradecer também a Profa. Iris Torriani e o Prof. Carlos Giles que foram as pessoas que primeiro me iniciaram no trabalho científico. Meu obrigado também aos professores Cabrera, Carlos Escobar, Amir Caldeira e Roberto Luzzi pelas aulas, conversas e seminários que me ensinaram muito.

Gostaria de agradecer todos meus companheiros de turma de graduação em especial: Eduardo Bovo, Elso, Fernando, Francisco, Haroldo, Ismael, Marciotto, Eduardo Mattoso, Érika, Daniel, Rodrigo e Adenir pelas conversas que me ensinaram muito.

Meu obrigado aos meus pais: Wilson e Rita, e aos meus irmãos: Fé, Táta e Du, pelas coisas que, há tanto tempo, vocês vêm fazendo por mim e pelas coisas que vocês nem imaginam que fazem por mim. Obrigado mesmo!

Obrigado à Má pela grande companheira que foi e por todo o ânimo e alegria que me deu. E obrigado aos meus amigos de sempre: Rodolpho, Paulão, Pablo, Rafael, Conrado, Renan, Thadeu, Mingau...Valeu SMP!

Resumo

Neste trabalho, usando como sistema protótipo o chamado potencial NELSON de dois graus de liberdade, procuramos traços da dinâmica clássica no emaranhamento dos subsistemas do análogo quântico deste sistema. Através da escolha de uma superfície de energia com regime dinâmico misto, escolhemos condições iniciais regulares e caóticas no espaço de fase, nas quais centramos estados coerentes com larguras comparáveis às estruturas presentes nas superfícies de seções. Diagonalizando numericamente o Hamiltoniano, evoluímos os estados inicialmente separáveis e coerentes e determinamos o emaranhamento dos subsistemas por meio do cálculo do defeito de idempotência (ou entropia linear) de um dos subsistemas. Calculamos também a evolução das distribuições de Husimi e das populações e coerências do operador densidade reduzido. Concluimos, dos resultados obtidos, que, no regime escolhido, o emaranhamento é mais rápido e mais intenso (no sentido de envolver mais estados) para estados associados inicialmente às condições iniciais clássicas caóticas, do que para os associados às condições iniciais regulares. Entretanto, notamos que as vizinhanças da condição inicial também exercem um papel importante nessa rapidez e intensidade do emaranhamento.

Abstract

In this work, using a system with two degrees of freedom called NELSON as a prototype system, we search for signatures of the classical dynamics in the entanglement of the subsystems of the quantum analog of this system. By means of choosing an energy surface that presents a dynamical regime with regularity and chaos simultaneously, we choose chaotic and regular initial conditions in the phase space, and center coherent states on it with the width comparable with the structures present in the surface of section. Diagonalizing numerically the Hamiltonian, we have evolved in time the states initially separable and coherent and determined the entanglement of the subsystems by calculating a subsystem's idempotency defect (or linear entropy). We have also calculated the time evolution of the Husimi distributions and the populations and coherences of the subsystem's reduced density matrix. We have concluded that, in the chosen regime, the entanglement is faster and more intense (in the sense that there are more states involved) for states initially associated with chaotic initial conditions than states associated with regular initial conditions. However, we have noticed that the region surrounding the initial condition plays an important role on how fast and intense the entanglement occurs.

Conteúdo

Introdução	1
Capítulo 1: O Sistema Clássico e sua Quantização	3
1.1 A Hamiltoniana Clássica.....	3
1.1.1 As Seções de Poincaré.....	6
1.2 Quantização do Hamiltoniano NELSON.....	13
1.2.1 Elementos de Matriz do Hamiltoniano NELSON.....	15
1.2.2 Paridade do Hamiltoniano.....	16
1.3 A Diagonalização Numérica do Hamiltoniano NELSON.....	17
Capítulo 2: Emaranhamento em Sistemas com Dois Graus de Liberdade	22
2.1 A Descrição de um Sistema de Dois Graus de Liberdade.....	22
2.1.1 Sistema Quântico de Dois Graus de Liberdade.....	23
2.1.2 A Evolução Temporal Quântica.....	25
2.2 A Descrição via Operador Densidade.....	26
2.2.1 Operador Densidade para Estados Puros.....	27
2.2.2 Operador Densidade para Misturas Estatísticas.....	28
2.2.3 O Operador Densidade para Sistemas com Dois Graus de Liberdade	31
2.2.4 A Idéia de Traço Parcial.....	31
2.2.5 Uma Medida de Emaranhamento.....	33
Capítulo 3: Caos e Emaranhamento	37
3.1 Propriedades dos Estados Coerentes.....	37
3.2 Correspondência entre a Evolução Quântica e o Espaço de Fase Clássico.....	39
3.3 A Distribuição de Husimi.....	41
Capítulo 4: Cálculo da Entropia Linear, Husimis e Populações para o Sistema NELSON	44
4.1 Sistemática Numérica.....	44
4.2 Cálculo de $\delta(t)$	46

4.3 Distribuições de Husimi.....	57
4.4 Populações e Coerências de ρ_2	62
4.5 Discussão dos Resultados Numéricos.....	70
Conclusões	72
Referências	74
Apêndice A: Relação entre o Espectro Quântico e a Energia Clássica	76

Introdução.

Vários métodos, ao longo dos anos, já foram aplicados para se encontrar traços do caos em regime quântico [1]. Sistemas que classicamente exibem caos, quando quantizados, apresentam, por exemplo, um certo tipo característico de estatística na distribuição de seus níveis, em regime semiclássico [2]. Algumas propriedades dos autoestados destes sistemas também já foram amplamente abordadas [3]. Porém, muito sobre as evoluções temporais está em aberto, e é nesse sentido que pretendemos explorar.

Para isso, tomamos um sistema caótico particular de dois graus de liberdade chamado potencial NELSON [4], cuja Hamiltoniana é:

$$H = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \left(y - \frac{x^2}{2} \right)^2 + \frac{\mu x^2}{2} \quad (1)$$

Classicamente, é um sistema bem interessante, pois, como veremos, apesar de caótico, possui regimes dinâmicos mistos, para alguns intervalos de energia. A partir do Hamiltoniano quântico de (1), realizamos sua diagonalização numericamente, o que nos permite calcular evoluções temporais de um estado qualquer expandido na base de autoestados encontrada. Cada autoestado desta base, devido a não-separabilidade do Hamiltoniano, não é um estado tipo produto tensorial dos autoestados de cada subsistema. Isto implica que, dado um estado inicial qualquer, mesmo que inicialmente separável, após um certo tempo, será um estado que chamamos de “emaranhado”. O que, simplificadamente, significa que este estado é uma superposição de estados das bases dos subsistemas.

Uma maneira de “medir” este emaranhamento ao longo do tempo é calcular uma quantidade chamada defeito de idempotência ou entropia linearizada [5] para um dos subsistemas:

$$\delta_2(t) = 1 - \text{Tr}_2(\rho_2^2(t)) \quad (2)$$

Onde $\rho_2(t)$ é o operador densidade reduzido (no caso, do grau de liberdade 2). Esta quantidade, que inicialmente será zero para um estado inicial separável, se aproximará de 1, o que significa, do ponto de vista do sistema total, um aumento do emaranhamento no estado quântico total.

Pretendemos procurar uma possível influência da dinâmica clássica associada neste processo de emaranhamento quântico, na linha do que foi proposto por W.H. Zurek e J.P. Paz [6].

Como fazer a conexão entre a dinâmica clássica e a quântica? Seguindo a proposta feita em [7], escolhemos como estados iniciais estados coerentes do oscilador harmônico devido às suas propriedades semiclássicas. Podemos centralizá-los em regiões determinadas do espaço de fase, no nosso caso, regulares ou caóticas, e calcular $\delta_2(t)$ e distribuições de Husimi para a evolução temporal destes estados, procurando reconhecer, no comportamento do defeito de idempotência, traços da dinâmica clássica associada.

Em particular, a importância do emaranhamento rápido (lento) no caso de uma dinâmica clássica caótica (regular) reside no fato de que, do ponto de vista de um dos subsistemas, ocorre uma descoerência rápida (lenta). O estudo do processo de descoerência é também muito útil para as áreas de Informação Quântica e Computação Quântica [28], onde a manutenção da pureza do estado inicial (ou seja, das coerências) é de extrema importância.

Capítulo 1

O Sistema Clássico e sua Quantização.

Apresentaremos a seguir, o sistema protótipo utilizado neste trabalho. Este consiste de um potencial de dois graus de liberdade com acoplamento não-linear e usualmente chamado de potencial NELSON[4]. As razões de utilizarmos este sistema estão em duas características que apresentaremos neste capítulo e serão desenvolvidas ao longo dos seguintes. São elas: o fato de, classicamente, apresentar regimes dinâmicos mistos onde há regiões regulares e caóticas simultaneamente, e o fato de, quanticamente, ser descrito por dois subsistemas com espaços de estados infinito.

1.1 A Hamiltoniana Clássica.

Em geral, num sistema com dois graus de liberdade, a dinâmica de cada um não é separável, ou seja, existem acoplamentos entre eles. Mais do que isso, sistemas com dois graus de liberdade não são em geral integráveis. Um sistema hamiltoniano com n graus de liberdade é dito integrável quando existem n funções $F_i(q,p)$ em involução que são constantes de movimento. No caso de sistemas Hamiltonianos integráveis, o teorema de Arnold-Liouville [8] garante que as equações de movimento podem ser resolvidas por meio de operações algébricas e quadraturas. A energia, para o caso conservativo, é uma função daquele tipo, de forma que sistemas com 1 grau de liberdade são sempre integráveis. Para $n > 1$ a existência de outras constantes de movimento independentes da energia já não é óbvia e vai ou não ocorrer dependendo de características particulares de cada sistema.

O fato de um sistema não ser integrável implica que não existe solução analítica fechada geral para as suas equações de movimento em termos das condições iniciais e do tempo. Essa impossibilidade de se encontrar uma fórmula fechada para as soluções está intimamente ligada ao fato do sistema exibir movimento caótico. Veremos, a partir das seções de Poincaré, que a Hamiltoniana NELSON se enquadra exatamente neste caso.

A seguir, a partir da expressão (1), encontraremos as equações de movimento e trataremos a Hamiltoniana a fim de construirmos as seções de Poincaré. As equações de Hamilton para (1), resultam nas seguintes equações de movimento:

$$\dot{x} = p_x \quad (1.1)$$

$$\dot{y} = p_y \quad (1.2)$$

$$\dot{p}_x = -\mu x + 2x \left(y - \frac{1}{2} x^2 \right) \quad (1.3)$$

$$\dot{p}_y = -2y - x^2 \quad (1.4)$$

Estudamos também o caso da Hamiltoniana NELSON submetida à seguinte transformação canônica:

$$q_1 = x \quad (1.5)$$

$$q_2 = y - \frac{1}{2} x^2 \quad (1.6)$$

Através das equações de transformação [9]:

$$x = -\frac{\partial F}{\partial p_x} \quad (1.7)$$

$$y = -\frac{\partial F}{\partial p_y} \quad (1.8)$$

construímos a função geratriz F , que usando (1.5) e (1.6) fica:

$$F = -q_1 p_x - \left(q_2 + \frac{1}{2} q_1^2 \right) p_y \quad (1.9)$$

Através das equações:

$$p_1 = -\frac{\partial F}{\partial q_1} \quad (1.10)$$

$$p_2 = -\frac{\partial F}{\partial q_2} \quad (1.11)$$

obtemos as transformações para os momentos canonicamente associados:

$$p_1 = p_x + xp_y \quad (1.12)$$

$$p_2 = p_y \quad (1.13)$$

Porém, sabemos que uma transformação é canônica somente se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_i}{\partial q_j} &= \frac{\partial p_j}{\partial P_i} & \frac{\partial Q_i}{\partial p_j} &= -\frac{\partial q_j}{\partial P_i} \\ \frac{\partial P_i}{\partial q_j} &= -\frac{\partial p_j}{\partial Q_i} & \frac{\partial P_i}{\partial p_j} &= \frac{\partial q_j}{\partial Q_i} \end{aligned}$$

e calculando as equações acima para (1.5), (1.6), (1.12) e (1.13) verificamos que a transformação é canônica.

Mediante esta transformação, a Hamiltoniana NELSON fica da seguinte forma:

$$H_t = \frac{1}{2} p_1^2 + \frac{1}{2} \mu q_1^2 + \frac{1}{2} p_2^2 + q_2^2 - p_1 p_2 q_1 + \frac{1}{2} q_1^2 p_2^2 \quad (1.14)$$

Usando as equações de Hamilton nestas novas coordenadas, temos:

$$\dot{q}_1 = p_1 - p_1 q_1 \quad (1.15)$$

$$\dot{q}_2 = p_2 - p_1 q_1 + q_1^2 p_2 \quad (1.16)$$

$$\dot{p}_1 = -\mu q_1 + p_1 p_2 - q_1 p_2^2 \quad (1.17)$$

$$\dot{p}_2 = -2q_2 \quad (1.18)$$

Estas são as expressões referentes a Hamiltoniana NELSON que são encontradas nos trabalhos já feitos sobre este sistema[10]. Porém, se interpretarmos as expressões (1) e (1.14) como Hamiltonianas com dimensão de energia, veremos que para as coordenadas

canônicas terem dimensão de momento e posição, vários parâmetros foram feitos iguais a um. Vamos reintroduzi-los para podermos “seguir-los” melhor ao longo do problema. A princípio, esta é a única intenção, pois, queremos aproveitar o estudo do caos clássico feito sobre este sistema, que está restrito à variação de μ somente. A mudança dos outros parâmetros pode levar a diferentes regimes caóticos.

Portanto, introduzindo os parâmetros em (1) temos:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{k}{2} \left(y - \frac{\lambda x^2}{2} \right)^2 + \frac{\mu \kappa x^2}{2} \quad (1.19)$$

onde m tem dimensão de massa, λ , k e κ , de comprimento a menos um e μ fica adimensional. A transformação canônica fica:

$$\begin{aligned} x &= q_1 \\ y &= q_2 + \frac{\lambda}{2} q_1 \\ p_x &= p_1 - \lambda q_1 p_2 \\ p_y &= p_2 \end{aligned}$$

Dessa maneira, (1.14) fica:

$$H_t = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2 q_1^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 q_2^2}{2} - \frac{\lambda}{m} q_1 p_1 p_2 + \frac{\lambda^2}{2m} q_1^2 p_2^2 \quad (1.20)$$

$$\omega_1^2 = \frac{\mu \kappa}{m} \quad \text{e} \quad \omega_2^2 = \frac{k}{m}$$

Vemos que fazendo m , λ , e κ iguais a um e k igual a dois voltamos à expressão original para H .

A expressão (1.20) foi introduzida porque o Hamiltoniano quântico correspondente é melhor diagonalizado numericamente que o de (1.19) [10]. Esclareceremos melhor estas facilidades posteriormente.

1.1.1 As Seções de Poincaré.

Apresentaremos aqui, através de seções de Poincaré, a estrutura dinâmica do espaço de fase do sistema NELSON. A técnica de superfícies de seção desenvolvida por Poincaré e Birkhoff nos permite, dentro de certas condições, conhecer com grande confiabilidade a estrutura dinâmica do espaço de fase de um sistema, porém, de maneira qualitativa ou digamos panorâmica, pois, modernamente, constitui-se de um mapeamento de órbitas integradas numericamente por um tempo longo. Diferentemente, critérios locais, como o método de expoentes de Lyapunov, permitem medidas quantitativas de instabilidade. Contudo, é de nosso interesse somente conhecer quais regiões do espaço de fase são localmente regulares e quais são caóticas. Antes de mostrar as seções do NELSON, é necessário explicitar as condições nas quais elas produzem resultados confiáveis, que entendemos por distinção clara entre as regiões regulares e caóticas.

Para uma Hamiltoniana conservativa de 2 graus de liberdade do tipo:

$$E = H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + V(x, y) \quad (1.21)$$

Podemos seccionar a superfície de energia com, por exemplo, o plano $y=0$, e construir a seção a partir da interseção da superfície de energia com este plano, ou seja, os pontos (x, p_x) . Com a energia fixa e $y=0$ temos:

$$p_y = \pm \left[2m \left(E - \frac{p_x^2}{2m} - V(x, 0) \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1.22)$$

E o estado do sistema está determinado a menos de um sinal. Cada um dos valores de p_y definem ramos da superfície de energia que podemos projetar no plano da seção, por isso, escolhemos apenas um deles para que não haja sobreposição.

Outra propriedade importante de um sistema de 2 graus de liberdade é que a superfície de energia é uma variedade 3D e seus toros variedades 2D. Isto implica que órbitas que habitam o espaço entre toros permanecerão neste espaço, pois, para ocuparem o interior do toro, elas precisariam cruzá-lo, o que não pode ocorrer em um sistema determinístico. Logo, na seção, veremos com distinção as regiões regulares (intersecção com os toros) e as regiões caóticas. Além disso, pode ser mostrado[11] que, para sistemas conservativos de dois graus de liberdade, as áreas presentes na seção são preservadas

durante o fluxo, o que garante que a distinção entre as regiões regulares e caóticas não se altera com o tempo de integração da seção.

Como todo os cálculos quânticos serão feitos usando a Hamiltoniana transformada, é de nosso interesse conhecer a estrutura do espaço de fase (q_1, p_1, q_2, p_2) . Porém, vemos em (1.20) que a nova Hamiltoniana não é separável em termo cinético mais potencial. Portanto, para que tenhamos os ramos da superfície de energia em termos de dois valores de momento que diferem apenas pelo sinal (o que facilita os cálculos numéricos) fizemos a escolha de $q_1=0$, ou seja, escolhemos os pontos (q_2, p_2) que interceptam a seção com:

$$p_1 = \pm \left[2m \left(E - \frac{p_2^2}{2m} - \frac{m\omega_2^2 q_2^2}{2} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1.23)$$

e escolhemos, como anteriormente, apenas um dos ramos em p_1 . A escolha $q_2=0$ não leva a ramos que diferem apenas por um sinal por causa da presença de termos mistos.

Abaixo, mostramos algumas seções do sistema NELSON nas coordenadas originais e modificadas com $\mu=0.1$ fixo. Para $y=0$:

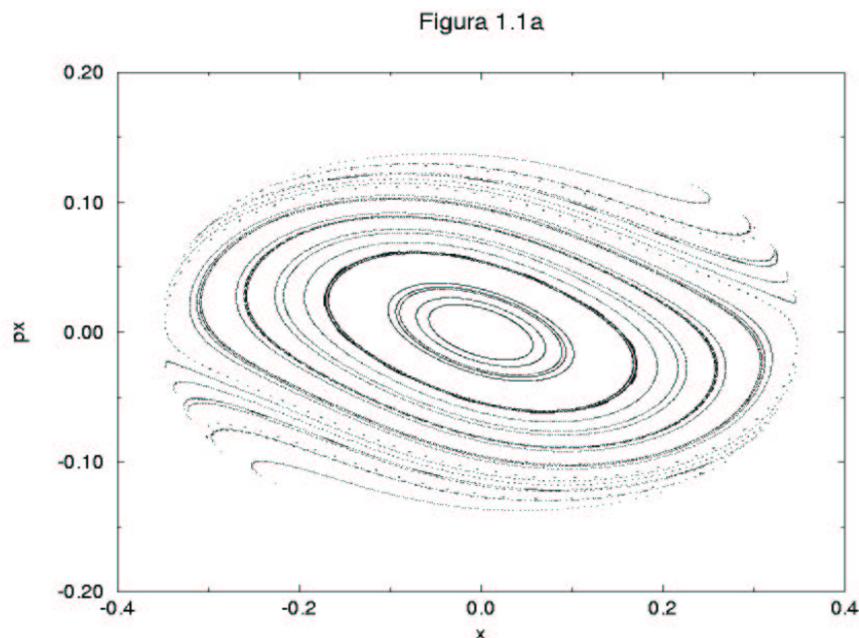


Figura 1.1b

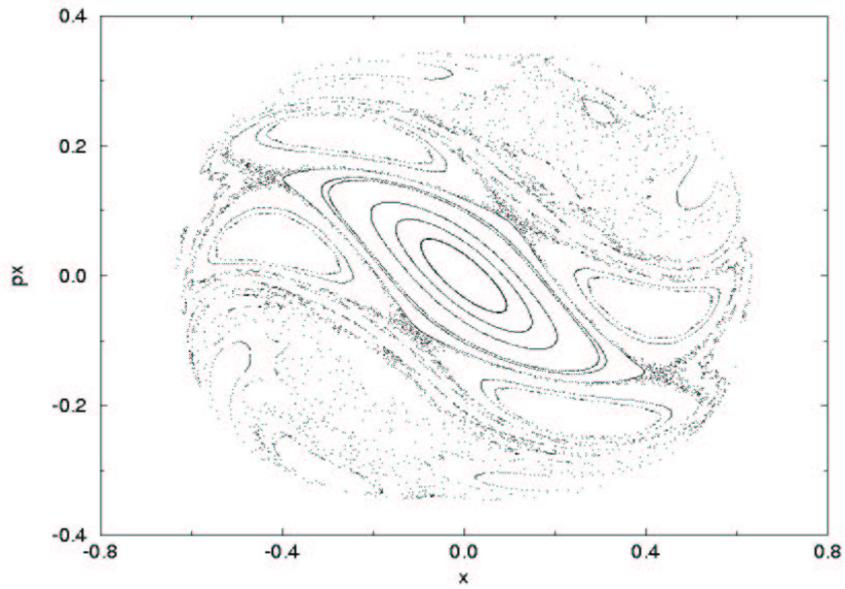


Figura 1.1c

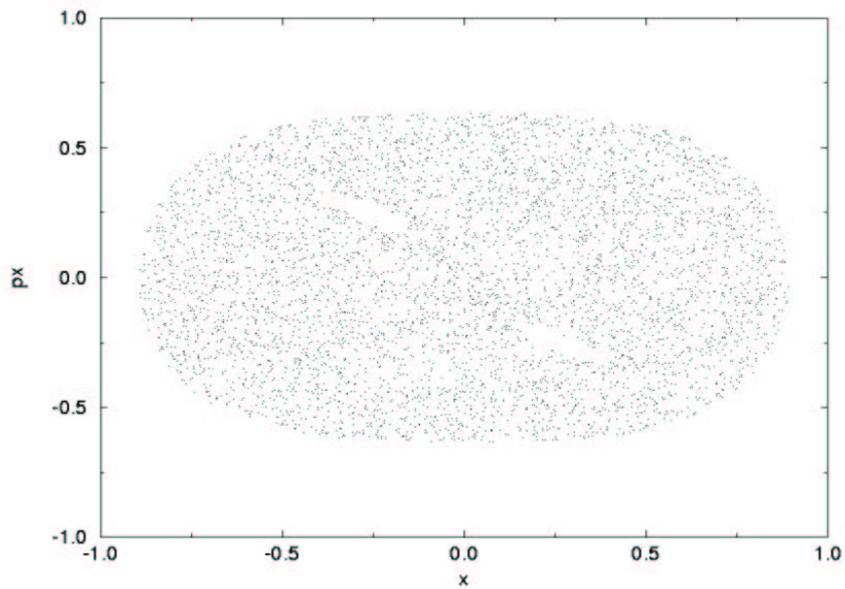


Figura 1.1 – Seções de Poincaré $y=0$ da Hamiltoniana (1.19) para $E=0.01$ (1.1a), $E=0.06$ (1.1b) e $E=0.2$ (1.1c).

Para $x=0$:

Figura 1.2a

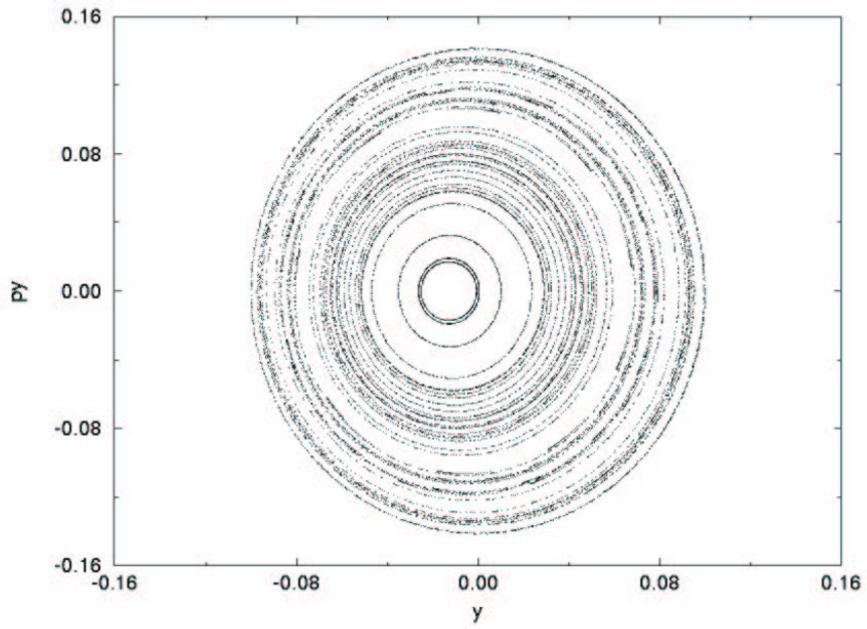


Figura 1.2b

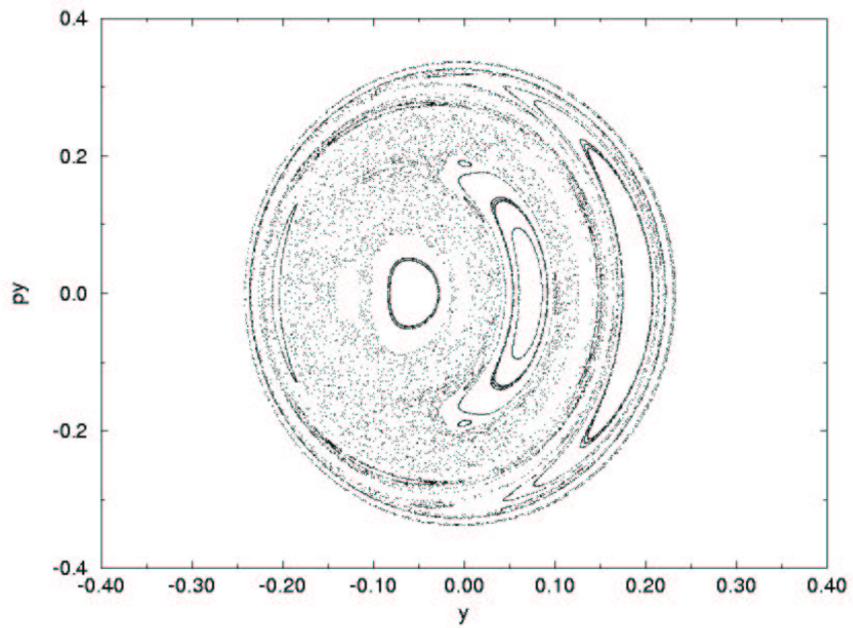


Figura 1.2c

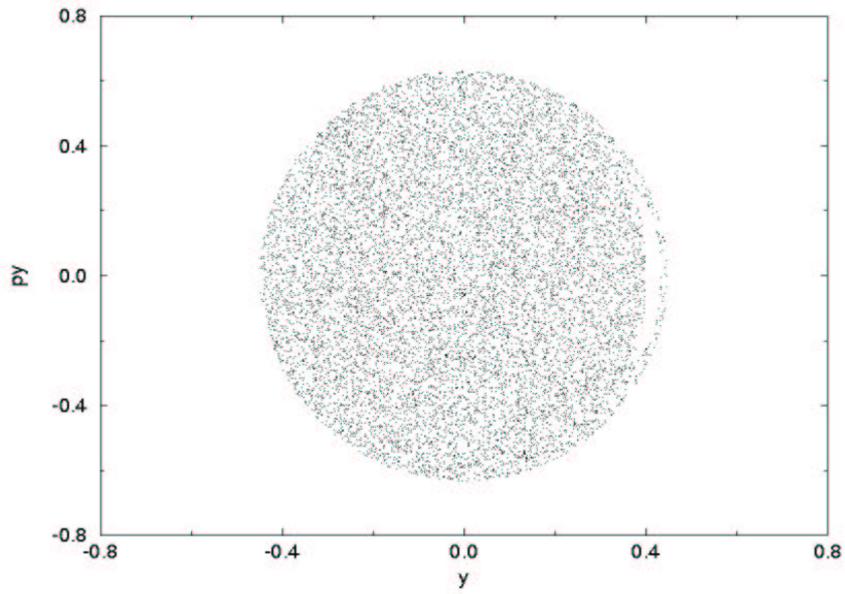


Figura 1.2 – Seções de Poincaré $x=0$ da Hamiltoniana (1.19) para $E=0.01$ (1.2a), $E=0.06$ (1.2b) e $E=0.2$ (1.2c).

E para $q_1=0$:

Figura 1.3a

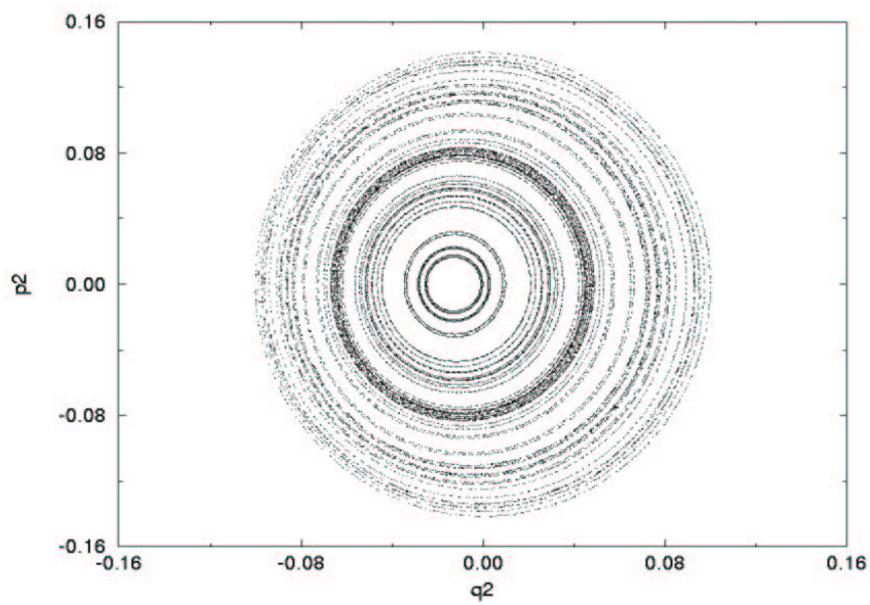


Figura 1.3b

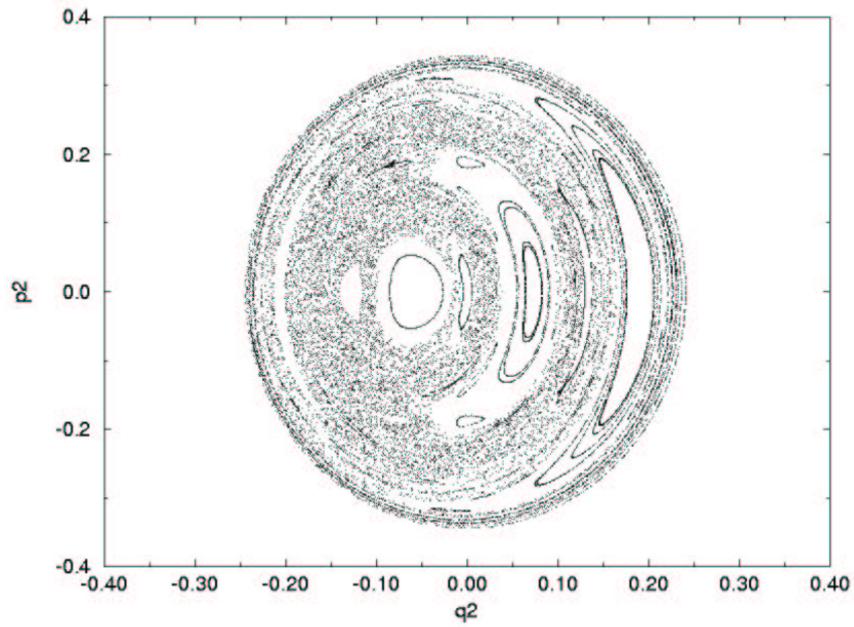


Figura 1.3c

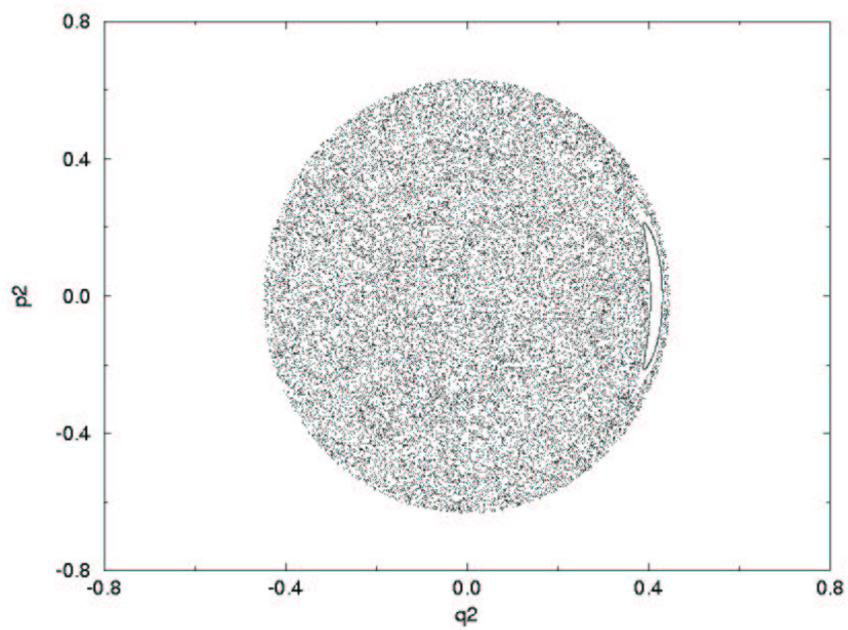


Figura 1.3 – Seções de Poincaré $q_1=0$ da Hamiltoniana (1.20) para $E=0.01$ (1.3a), $E=0.06$ (1.3b) e $E=0.2$ (1.3c).

Nota-se que a estrutura dinâmica do sistema NELSON vai passando de regular, para mista e totalmente caótica, à medida que a energia vai crescendo.

Utilizamos um programa que, dado o valor de energia, gera um conjunto de condições iniciais, que satisfazem esta condição, e as evolui no tempo, através de rotinas de integração numérica tipo Runge-Kutta. O programa então guarda os pontos de intersecção com o plano previamente escolhido de somente um dos ramos.

1.2 Quantização do Hamiltoniano NELSON.

Para quantizarmos (1.20) associamos a cada coordenada e momento canônicos seus correspondentes observáveis. Lembramos que [12] duas variáveis dinâmicas canônicas clássicas u e v possuem, quanticamente, a seguinte relação de comutação:

$$uv - vu = \{u, v\}i\hbar,$$

onde $\{u, v\}$ é o parêntesis de Poisson clássico entre u e v . Portanto, quantizando as variáveis dinâmicas da Hamiltoniana (1.20) obtemos as seguintes relações de comutação entre os respectivos operadores:

$$\begin{aligned} [Q_i, P_j] &= i\hbar\delta_{ij} \\ [P_i, P_j] &= 0 \quad i, j=1, 2. \\ [Q_i, Q_j] &= 0 \end{aligned}$$

Devido a essas relações, um termo da hamiltoniana deve ser simetrizado:

$$\frac{\lambda}{m} q_1 p_1 p_2 \rightarrow \frac{\lambda}{2m} (q_1 p_1 + p_1 q_1) p_2.$$

Finalmente, o operador Hamiltoniano é:

$$H_t = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2 Q_1^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 Q_2^2}{2} - \frac{\lambda}{2m} (Q_1 P_1 + P_1 Q_1) P_2 + \frac{\lambda^2}{2m} Q_1^2 P_2^2 \quad (1.24)$$

Vamos procurar trabalhar com grandezas adimensionais, por isso, faremos uma primeira transformação:

$$\hat{Q}_i = \left(\frac{m\omega_i}{\hbar} \right)^{1/2} Q_i \quad \text{e} \quad \hat{P}_i = \frac{P_i}{(m\hbar\omega_i)^{1/2}}, \quad i=1,2.$$

Substituindo em (1.24):

$$H_t = \frac{\hbar\omega_1}{2} \left(\hat{P}_1^2 + \hat{Q}_1^2 \right) + \frac{\hbar\omega_2}{2} \left(\hat{P}_2^2 + \hat{Q}_2^2 \right) - \frac{\lambda\hbar}{2m} (m\hbar\omega_2)^{1/2} \left(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{P}_1 \hat{Q}_1 \right) \hat{P}_2 + \frac{\lambda^2 \hbar^2}{2m} \frac{\omega_2}{\omega_1} \hat{Q}_1^2 \hat{P}_2^2 \quad (1.25)$$

Em relação aos operadores de criação e aniquilação do oscilador harmônico, tem-se:

$$\hat{Q}_i = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_i^+ + a_i) \quad \text{e} \quad \hat{P}_i = \frac{i}{\sqrt{2}} (a_i^+ - a_i), \quad i=1,2$$

Obtemos então que:

$$\begin{aligned} \hat{P}_1^2 + \hat{Q}_1^2 &= 2a_1^+ a_1 + 1 = 2N_1 + 1 \\ \hat{P}_2^2 + \hat{Q}_2^2 &= 2a_2^+ a_2 + 1 = 2N_2 + 1 \\ \hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{P}_1 \hat{Q}_1 &= i(a_1^{+2} - a_1^2) \\ \hat{Q}_1^2 \hat{P}_2^2 &= -\frac{1}{4} (a_1^{+2} + a_1^2 + 2N_1 + 1) (a_2^{+2} + a_2^2 - 2N_2 - 1) \end{aligned}$$

Substituindo em (1.25) e fatorando uma constante com dimensão de energia, tem-se:

$$H_t = \frac{\hbar\omega_1\omega_2}{\omega} \hat{H} = \frac{\hbar\omega_1\omega_2}{\omega} \left[\frac{\omega}{\omega_2} \hat{H}_1 + \frac{\omega}{\omega_1} \hat{H}_2 + \left(\frac{\hbar}{h_2} \right)^{1/2} \frac{\omega}{\omega_1} \hat{A}_{12} - \frac{\hbar}{h_1} \frac{\omega}{\omega_1} \hat{B}_{12} \right] \quad (1.26)$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= N_1 + \frac{1}{2} \\ \hat{H}_2 &= N_2 + \frac{1}{2} \\ \hat{A}_{12} &= (a_1^{+2} - a_1^2) (a_2^+ - a_2) \end{aligned}$$

$$\hat{B}_{12} = (a_1^{+2} + a_1^2 + 2N_1 + 1)(a_2^{+2} + a_2^2 - 2N_2 - 1)$$

e

$$\frac{1}{h_1} = \frac{\lambda^2}{8m\omega_1}, \quad \frac{1}{h_2} = \frac{\lambda^2}{8m\omega_2}, \quad (1.27)$$

$$\omega = \omega_1 + \omega_2$$

Vemos que, como a expressão entre colchetes é adimensional, as constantes em (1.27) têm dimensão de ação elevada à potência menos um.

Dessa maneira, h_1 e h_2 definem ações clássicas características do problema que contêm as constantes de acoplamento do problema clássico.

1.2.1 Elementos de Matriz do Hamiltoniano NELSON.

Tendo a expressão do Hamiltoniano em termos dos operadores do oscilador harmônico, vamos calcular os elementos de matriz na base produto dos osciladores:

$$\begin{aligned} \langle n_1' n_2' | \hat{H}_1 | n_1 n_2 \rangle &= \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \langle n_1' n_2' | n_1 n_2 \rangle \\ \langle n_1' n_2' | \hat{H}_2 | n_1 n_2 \rangle &= \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \langle n_1' n_2' | n_1 n_2 \rangle \\ \langle n_1' n_2' | \hat{A}_{12} | n_1 n_2 \rangle &= [(n_1 + 1)(n_1 + 2)(n_2 + 1)]^{1/2} \langle n_1' n_2' | n_1 + 2, n_2 + 1 \rangle \\ &\quad - [(n_1 + 1)(n_1 + 2)n_2]^{1/2} \langle n_1' n_2' | n_1 + 2, n_2 - 1 \rangle \\ &\quad - [(n_1 - 1)n_1(n_2 + 1)]^{1/2} \langle n_1' n_2' | n_1 - 2, n_2 + 1 \rangle \\ &\quad [n_1(n_1 - 1)n_2]^{1/2} \langle n_1' n_2' | n_1 - 2, n_2 - 1 \rangle \\ \langle n_1' n_2' | \hat{B}_{12} | n_1 n_2 \rangle &= [(n_1 + 1)(n_1 + 2)(n_2 + 1)(n_2 + 2)]^{1/2} \langle n_1' n_2' | n_1 + 2, n_2 + 2 \rangle \\ &\quad - [(n_1 + 1)(n_1 + 2)]^{1/2} (2n_2 + 1) \langle n_1' n_2' | n_1 + 2, n_2 \rangle \\ &\quad + [(n_1 + 1)(n_1 + 2)n_2(n_2 - 1)]^{1/2} \langle n_1' n_2' | n_1 + 2, n_2 - 2 \rangle \\ &\quad + [(n_2 + 1)(n_2 + 2)]^{1/2} (2n_1 + 1) \langle n_1' n_2' | n_1, n_2 + 2 \rangle \\ &\quad - [(2n_1 + 1)(2n_1 + 2)] \langle n_1' n_2' | n_1 n_2 \rangle \\ &\quad + [n_2(n_2 - 1)]^{1/2} (2n_1 + 1) \langle n_1' n_2' | n_1, n_2 - 2 \rangle \\ &\quad + [(n_2 + 1)(n_2 + 2)n_1(n_1 - 1)]^{1/2} \langle n_1' n_2' | n_1 - 2, n_2 + 2 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -[n_1(n_1-1)]^{1/2}(2n_2+1)\langle n_1'n_2'|n_1-2, n_2\rangle \\
& + [n_1(n_1-1)n_2(n_2-1)]^{1/2}\langle n_1'n_2'|n_1-2, n_2-2\rangle
\end{aligned}$$

1.2.2 Paridade do Hamiltoniano.

Considere um sistema físico cujo espaço de estados é \mathfrak{S}_r . O operador de paridade Π é definido pela sua ação nos vetores de \mathfrak{S}_r :

$$\begin{aligned}
\Pi|\vec{r}\rangle &= |-\vec{r}\rangle \Rightarrow \langle \vec{r}|\Pi|\psi\rangle = \psi(-\vec{r}) \quad [13], \\
&\text{pois como } \Pi^{-1} = \Pi^+ \Rightarrow \Pi \text{ é unitário.}
\end{aligned}$$

A partir disso, definimos a paridade de um operador da seguinte maneira. Seja $\tilde{B} = \Pi^{-1}B\Pi$ o operador transformado por paridade de B . Se:

$$\begin{aligned}
\tilde{B} = -B &\Rightarrow \Pi B + B\Pi = 0, \quad B \text{ é um operador ímpar.} \\
\tilde{B} = B &\Rightarrow \Pi B - B\Pi = 0, \quad B \text{ é um operador par.}
\end{aligned}$$

Vamos analisar o caso de:

$$\begin{aligned}
A_1 = P_1 Q_1 + Q_1 P_1 &\Rightarrow \tilde{A}_1 = \Pi P_1 Q_1 \Pi + \Pi Q_1 P_1 \Pi \\
\langle q_1'|\tilde{A}_1|q_1\rangle &= \langle q_1'|\Pi P_1 Q_1 \Pi|q_1\rangle + \langle q_1'|\Pi Q_1 P_1 \Pi|q_1\rangle
\end{aligned}$$

Como P_I e Q_I são operadores ímpares temos:

$$\begin{aligned}
\langle q_1'|(\Pi P_1)(Q_1 \Pi)|q_1\rangle &= \langle q_1'|(-P_1 \Pi)(-\Pi Q_1)|q_1\rangle = \langle q_1'|P_1 Q_1|q_1\rangle \\
\langle q_1'|(\Pi Q_1)(P_1 \Pi)|q_1\rangle &= \langle q_1'|(-Q_1 \Pi)(-\Pi P_1)|q_1\rangle = \langle q_1'|Q_1 P_1|q_1\rangle \\
&\text{pois } \Pi^2 = 1 \quad (1.28)
\end{aligned}$$

Assim $\tilde{A}_1 = A_1 \Rightarrow A_1$ é par. O mesmo também acontece para P_1^2 e Q_1^2 .

Temos, usando (1.28):

$$\begin{aligned}
\tilde{P}_1^2 &= \Pi P_1^2 \Pi = \Pi P_1 \Pi \Pi P_1 = (-P_1)(-P_1) = P_1^2 \Rightarrow \text{é par.} \\
\tilde{Q}_1^2 &= \Pi Q_1^2 \Pi = \Pi Q_1 \Pi \Pi Q_1 = (-Q_1)(-Q_1) = Q_1^2 \Rightarrow \text{é par.}
\end{aligned}$$

Portanto, o grau de liberdade 1 é par. Analogamente, P_2^2 e Q_2^2 são pares e P_2 é ímpar, o que implica que o grau de liberdade 2 não tem paridade bem definida.

Quando um operador U é par, ele comuta com Π e os autovetores deste operador são autovetores de Π também, isto é, possuem paridade bem definida, a não ser que o autovalor seja degenerado. Mesmo assim, podemos encontrar uma base de estados de U composta por autovetores pares e ímpares, o que facilita os cálculos. Como na base do oscilador as funções de onda tem sua paridade definida por n , poderemos diagonalizar, neste hamiltoniano, separadamente, os subespaços de n_l pares e ímpares, pois são subespaços ortogonais.

1.3 A Diagonalização Numérica do Hamiltoniano NELSON:

A partir dos elementos de matriz e 1.2.1, podemos diagonalizar numericamente o Hamiltoniano (1.26) na base produto dos osciladores. A paridade mostrada em 1.2.2 facilita o cálculo numérico, pois, permite que, como dito anteriormente, diagonalizemos separadamente os subespaços de n_l pares e ímpares. As matrizes destes subespaços, numericamente, possuem um número de elementos quatro vezes menor do que a matriz total, o que facilita o trabalho numérico.

Há outra característica dos elementos de matriz de 1.2.1 que facilita o cálculo numérico. Devido à transformação canônica aplicada, para um dado par (n_1, n_2) , existe um elemento de matriz não-nulo para esse par com, no máximo, uma diferença de duas unidades em (n_1, n_2) . Caso a transformação não tivesse sido aplicada teríamos um termo quártico em (1.19) que implicaria numa matriz mais esparsa. Com a transformação, temos uma matriz menos esparsa que facilita a diagonalização numérica.

É necessário lembrar também que o Hamiltoniano (1.24) possui um espaço de estados infinito. Numericamente, quanto maior a truncagem realizada, melhor será a diagonalização. Além disso, temos que possibilitar que as energias interessantes para o problema, ou seja, aquelas que classicamente exibem regimes dinâmicos mistos, sejam alcançadas por autoestados numericamente convergidos (ver Apêndice A).

Na figura 1.4a, temos as curvas dos espectros obtidos numericamente, para $\hbar = 0.003771232$, para três truncagens diferentes de $(n_{1máx}, n_{2máx})$. Consideramos como região de convergência aquela para a qual, entre duas diagonalizações, os espectros coincidem. Em termos mais quantitativos, podemos observar a figura 1.4b, onde, as curvas representam as diferenças entre as energias de um mesmo nível de duas diagonalizações com truncagens diferentes. Vemos que para $E=0.06$, onde há regime misto, não temos o autoestado correspondente convergido para a truncagem (30,13). Porém, para (81,27) e (117,39), que são diagonalizações mais precisas, temos a convergência daquele autoestado. Isto porque, como vemos na figura 1.4a, a região de coincidência dos espectros (81,27) e (117,39) também coincidiria com o de uma truncagem ainda maior (e portanto mais precisa) que as duas anteriores, assim como a região de coincidência dos espectros (39,13) e (81,27) também coincide com o espectro de (117,39). Este último, será utilizado para os outros resultados deste trabalho por motivos que serão esclarecidos ao longo dos capítulos. Nas figuras 1.5 e 1.6 temos os resultados análogos para outros valores de \hbar .

Figura 1.4a

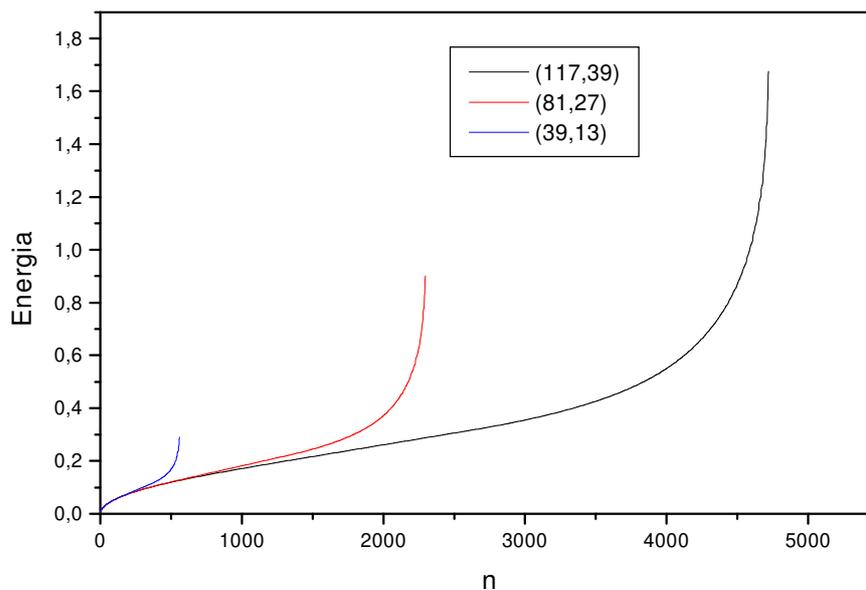


Figura 1.4b

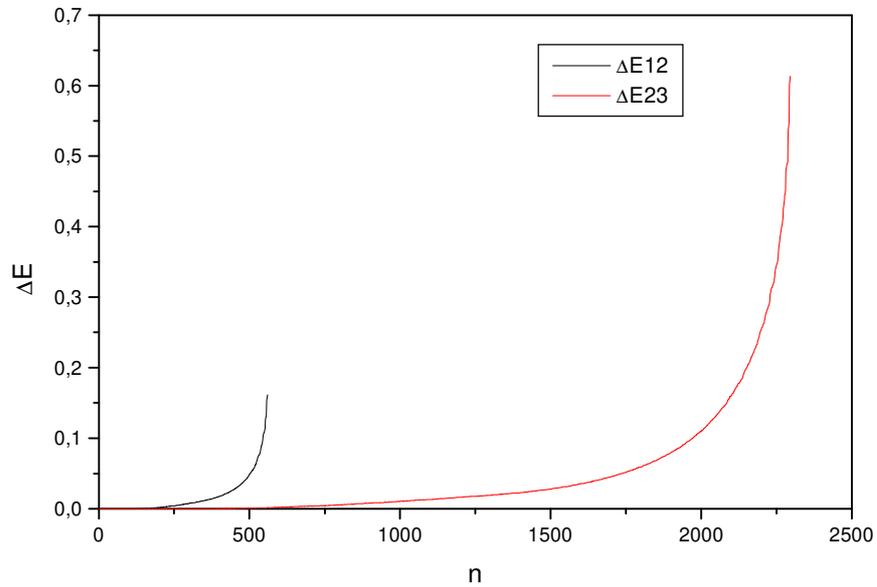


Figura 1.4 – Em 1.4a tem-se o espectro de (1.20) obtido numericamente para as truncagens (39,13) (curva azul), (81,27) (curva vermelha) e (117,39) (curva preta) para $\hbar = 0.003771232$. Em 1.4b tem-se a diferença de energia para um mesmo nível de truncagens diferentes: entre (39,13) e (81,27) (ΔE_{12}) e entre (81,27) e (117,39) (ΔE_{23}) para $\hbar = 0.003771232$.

Figura 1.5a

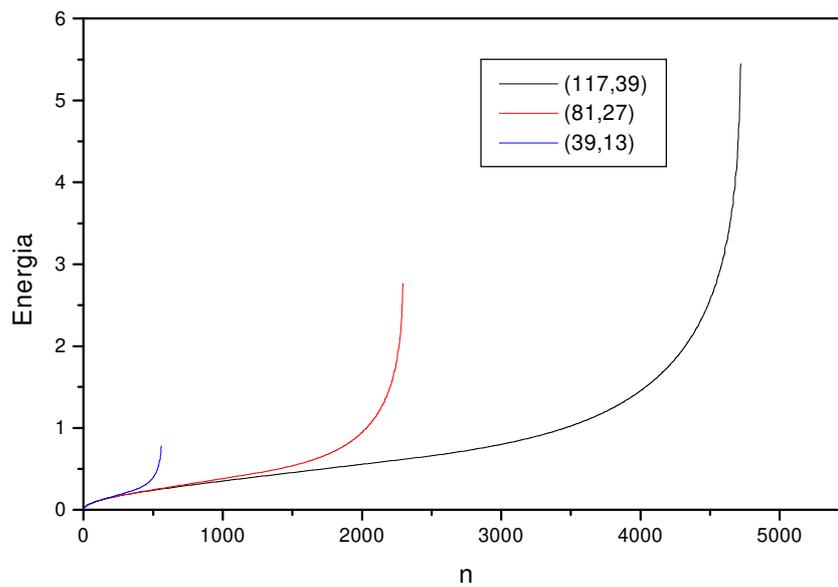


Figura 1.5b

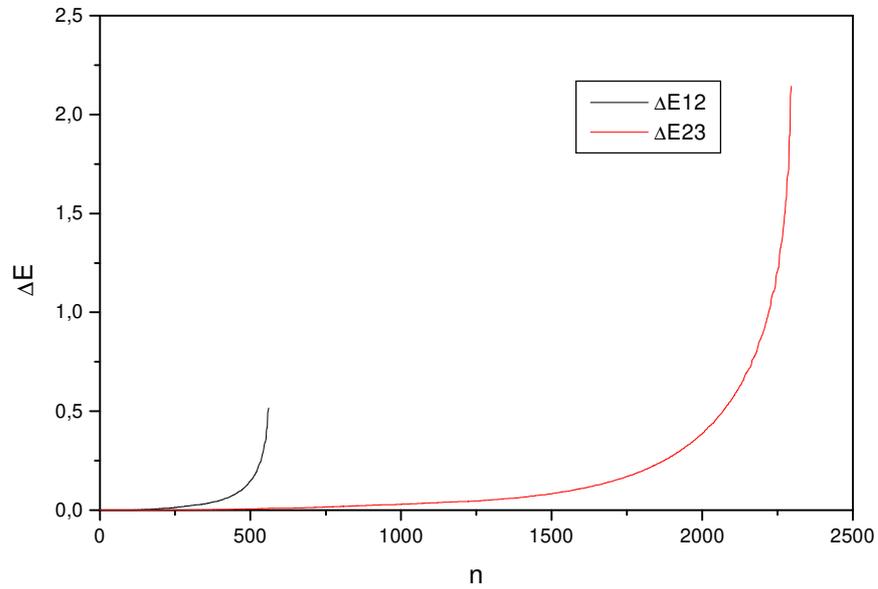


Figura 1.5 – Em 1.5a tem-se o espectro de (1.20) obtido numericamente para as truncagens (39,13) (curva azul), (81,27) (curva vermelha) e (117,39) (curva preta) para $\hbar = 0.005656855$. Em 1.5b tem-se a diferença de energia para um mesmo nível de truncagens diferentes: entre (39,13) e (81,27) (ΔE_{12}) e entre (81,27) e (117,39) (ΔE_{23}) para $\hbar = 0.005656855$.

Figura 1.6a

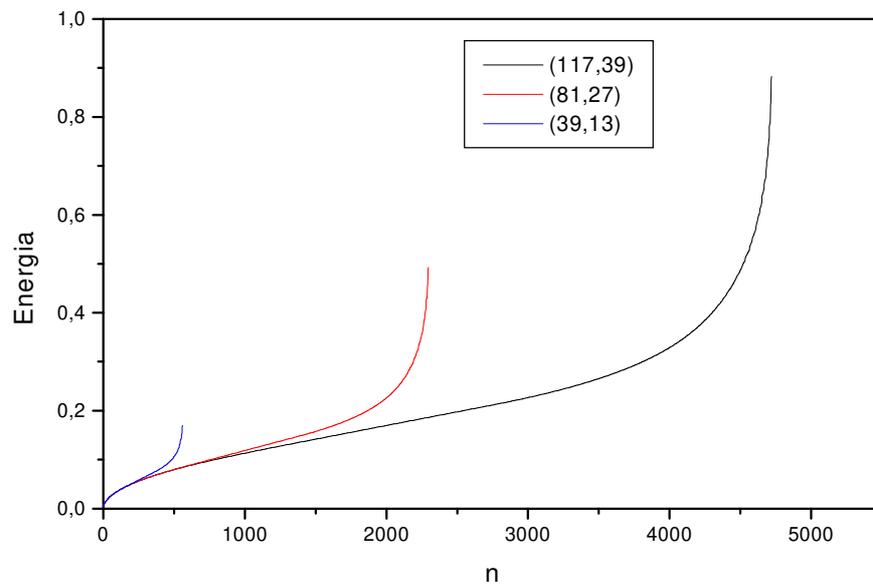


Figura 1.6b

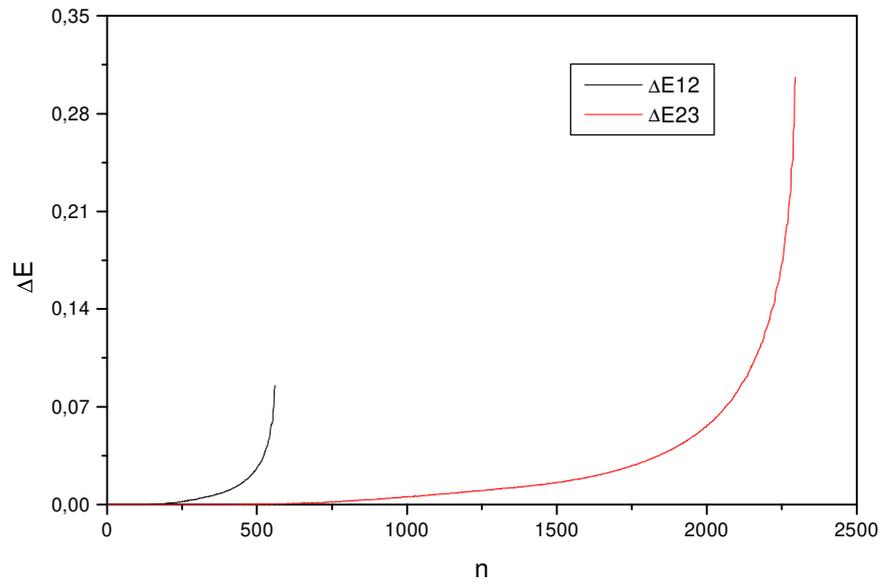


Figura 1.6 – Em 1.6a tem-se o espectro de (1.20) obtido numericamente para as truncagens (39,13) (curva azul), (81,27) (curva vermelha) e (117,39) (curva preta) para $\hbar = 0.002828427$. Em 1.6b tem-se a diferença de energia para um mesmo nível de truncagens diferentes: entre (39,13) e (81,27) (ΔE_{12}) e entre (81,27) e (117,39) (ΔE_{23}) para $\hbar = 0.002828427$.

Capítulo 2

Emaranhamento em Sistemas com Dois Graus de Liberdade.

Neste capítulo, apresentaremos a descrição e a origem do processo de emaranhamento num sistema de dois graus de liberdade. Para isso, discutiremos analogias entre as descrições clássica e quântica destes sistemas com interação e sem interação, e as propriedades dos operadores densidade que descrevem estes sistemas.

Procuraremos evidenciar que o operador densidade é a ferramenta adequada para estudar o processo de emaranhamento, podendo, através dele, construir-se uma medida quantitativa de emaranhamento: a entropia linear ou defeito de idempotência.

2.1 A Descrição de um Sistema com Dois Graus de Liberdade.

Classicamente, quando lidamos com um sistema de dois graus de liberdade, podemos caracterizar o estado do sistema pelas coordenadas canônicas q_1, p_1, q_2 e p_2 . Em particular, se o sistema não possui interação, os pares (q_1, p_1) e (q_2, p_2) especificam o estado de cada subsistema pois, com cada par, construímos todas as grandezas físicas de cada parte do sistema, separadamente, e pela simples combinação destas tenho as grandezas do sistema todo. Além disso, a evolução temporal dos estados físicos de cada subsistema independe do estado do outro.

Porém, quando há interação entre os dois graus de liberdade, sendo ela de natureza caótica ou não, a evolução temporal dos estados físicos de cada subsistema não é mais independente e as grandezas do sistema total não podem mais, em geral, serem separadas na soma das grandezas de cada subsistema. No entanto, ainda podemos especificar o estado todo do sistema usando q_1, p_1, q_2 e p_2 apesar da evolução de cada parte depender das coordenadas canônicas da outra.

Abordaremos agora os análogos desta discussão num sistema quântico.

2.1.1 Sistema Quântico de Dois Graus de Liberdade.

Como estabelecido pela Mecânica Quântica atual, o estado de um sistema fechado é dado por $|\psi\rangle$. Sejam dois sistemas cujos espaços de estados são \mathfrak{S}_1 e \mathfrak{S}_2 e cujas bases de autovetores de energia podem ser especificadas por $|n_1\rangle$ e $|n_2\rangle$. Um estado qualquer de \mathfrak{S}_1 é dado por:

$$|\varphi(1)\rangle = \sum_{n_1} c_{n_1} |n_1\rangle, \quad (2.1)$$

e de \mathfrak{S}_2 por:

$$|\varphi(2)\rangle = \sum_{n_2} c_{n_2} |n_2\rangle. \quad (2.2)$$

Seja um sistema cujo espaço de estados é $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}_1 \otimes \mathfrak{S}_2$. Os estados deste sistema podem ser escritos como:

$$|\psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle = \sum_{n_1 n_2} c_{n_1} c_{n_2} |n_1, n_2\rangle. \quad (2.3)$$

Percebe-se que a especificação dos estados de cada subsistema são independentes entre si. Além disso, seja A_I um observável relacionado a alguma grandeza física do subsistema 1. A probabilidade de um certo autovalor a_I de A_I ser observado é dada por:

$$P(a_I) = \langle \psi | P_1 \otimes 1_2 | \psi \rangle, \text{ onde } P_1 \otimes 1_2 = (|a_I\rangle\langle a_I|) \otimes \left(\sum_{n_2'} |n_2'\rangle\langle n_2'| \right),$$

onde $|a_I\rangle$ é o autovetor de A_I associado ao autovalor a_I .

Portanto,

$$P(a_1) = \langle \varphi(1) | P_1 | \varphi(1) \rangle \langle \varphi(2) | \varphi(2) \rangle = \left| \sum_{n_1} c_{n_1} \langle a_1 | n_1 \rangle \right|^2.$$

Ou seja, as probabilidades de ocorrência de uma grandeza física de um subsistema não sofrem interferências do outro. Como valores médios dos observáveis são determinados pelos seus espectros e probabilidades, os valores médios de um subsistema também não sofrem interferências do estado do outro subsistema. Logo, esta descrição parece ser a análoga da situação clássica mencionada quando não há interação.

A situação quântica análoga aos subsistemas que interagem seria quando o estado $|\psi\rangle$ do sistema todo não pode ser escrito de modo separável como em (2.3). Assim como na situação clássica (q_1, p_1, q_2, p_2) ainda especificam o estado do sistema total, na situação quântica, os estados $|n_1, n_2\rangle$ ainda formam uma base do espaço \mathfrak{S} . Porém, a expansão de um estado qualquer de \mathfrak{S} , neste caso, é diferente do caso anterior, pois:

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1 n_2} c_{n_1 n_2} |n_1, n_2\rangle. \quad (2.4)$$

E $c_{n_1 n_2}$ não é, em geral, igual a $c_{n_1} c_{n_2}$, o que não permite que escrevamos (2.4) como um produto de estados de cada subsistema.

Consideremos o observável A_1 citado anteriormente. A probabilidade de observarmos um autovalor a_1 neste caso é:

$$P(a_1) = \langle \psi | P_1 \otimes 1_2 | \psi \rangle = \sum_{n_2} \left| \sum_{n_1} c_{n_1 n_2} \langle a_1 | n_1 \rangle \right|^2.$$

Que não é independente do subsistema 2. Dessa maneira, os valores médios dos observáveis de cada subsistema também não serão independentes.

Este não é simplesmente um problema de degenerescência. Poderíamos pensar que achando um conjunto completo de observáveis comutantes (C.C.O.C.) de \mathfrak{S} poderíamos resolver esta questão. Porém, um C.C.O.C. de \mathfrak{S} , em geral, envolve operadores que atuam nos estados de \mathfrak{S} e não de \mathfrak{S}_1 e \mathfrak{S}_2 separadamente, logo, a base gerada por este C.C.O.C., não possuirá estados separáveis de \mathfrak{S}_1 e \mathfrak{S}_2 . Apesar de poder ser

separável em duas novas coordenadas dinâmicas, o problema continuará não-separável nas coordenadas originais.

2.1.2 A Evolução Temporal Quântica:

Outra diferença notória entre as situações com e sem interação está na evolução temporal de um estado inicial. Nos sistemas sem interação, a energia total do sistema, tanto clássica como quântica, pode ser separada na soma da energia de cada subsistema, ou seja, o Hamiltoniano H do sistema total pode ser escrito como:

$$H = H_1 + H_2.$$

Como $[H_1, H_2] = 0$, o operador de evolução temporal pode ser escrito da seguinte maneira:

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-iH_1t/\hbar} e^{-iH_2t/\hbar}.$$

Conseqüentemente, dado o estado inicial:

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle. \quad (2.5)$$

O estado em um instante t qualquer será:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle = e^{-iH_1t/\hbar} |\varphi(1)\rangle \otimes e^{-iH_2t/\hbar} |\varphi(2)\rangle = \\ &= \left(\sum_{n_1} e^{-iE_{n_1}t/\hbar} |n_1\rangle \langle n_1| \varphi(1) \right) \otimes \left(\sum_{n_2} e^{-iE_{n_2}t/\hbar} |n_2\rangle \langle n_2| \varphi(2) \right). \end{aligned}$$

Ou seja, as evoluções temporais são independentes.

Porém, no caso com interação:

$$\begin{aligned} H &\neq H_1 + H_2. \\ e^{-iHt/\hbar} &\neq e^{-iH_1t/\hbar} e^{-iH_2t/\hbar}. \end{aligned}$$

Portanto, para o estado inicial (2.5) teremos:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k \sum_n e^{-iE_n^k t/\hbar} |n^k\rangle \langle n^k| (|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle), \quad (2.6)$$

$$\text{onde } \sum_k \sum_n |n^k\rangle \langle n^k| = 1.$$

é a base de H e k representa uma possível degenerescência.

Como os autovetores de H podem ser escritos como:

$$|n^k\rangle = \sum_{n_1 n_2} c^k_{n_1 n_2} |n_1, n_2\rangle.$$

O estado no instante t não será, em geral, um estado do tipo produto. A interação levou um estado inicial separável a um não-separável que chamamos de um estado “emaranhado” de estados produto.

2.2 A Descrição via Operador Densidade.

Classicamente, para um sistema de dois graus de liberdade, se temos as funções $q_1(t)$, $q_2(t)$, $p_1(t)$ e $p_2(t)$, sabemos o estado do sistema a cada instante. Além disso, para sistemas com ou sem interação, especificando o ponto (q_1, q_2, p_1, p_2) no espaço de fase total, o estado de cada subsistema também está especificado.

Num sistema quântico, porém, um comportamento extremamente diferente aparece. Seja o espaço \mathfrak{S}_1 e uma dada base, como descritos anteriormente em 2.1. Vamos supor que os estados desta base não são degenerados, logo, quando especificamos o valor de n_1 , especificamos univocamente o estado a que se refere. Essa correspondência unívoca é o análogo quântico de quando especificamos $q_1(t)$ e $p_1(t)$. Porém, para todo estado físico clássico do sistema 1, existe um único par (q_1, p_1) , o que não ocorre para o análogo quântico devido ao princípio de superposição. Estados gerais como (2.1) estão numa superposição de autovetores correspondentes a diferentes valores de n_1 . Somente após uma medida deste autovalor, teremos um estado com n_1 bem definido. O que especifica os estado quântico, portanto, são os coeficientes de sua superposição em uma determinada base.

Quando o espaço de estados é $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}_1 \otimes \mathfrak{S}_2$, o estado mais geral deste espaço é uma superposição de estados produto, como em (2.4). A ferramenta que melhor evidencia estas características e que nos permite, dentre outras coisas [5], estudar melhor como o estado quântico evolui, é o operador densidade. Assim como a trajetória no espaço de

fase clássica nos permite seguir o comportamento do estado físico ao longo do tempo, o operador densidade cumprirá este papel quanticamente.

2.2.1 Operador Densidade para Estados Puros.

Seja um estado qualquer pertencente ao espaço \mathfrak{S}_1 , como (2.1). Este estado é chamado puro. Todos os estados desse tipo são superposições coerentes de elementos de uma certa base. Os estados (2.2), (2.3) e (2.4) são, portanto, estados puros. Destes estados podemos obter todas as informações físicas do sistema por ele representado. Mostraremos que do operador densidade também podemos obter todas as informações físicas quanticamente relevantes de um dado sistema. Vamos defini-lo a partir do valor médio de um dado observável A_I , no estado (2.1):

$$\langle A_I \rangle = \langle \varphi(1) | A_I | \varphi(1) \rangle = \langle \varphi(1) | A_I \left(\sum_{n_1} |n_1\rangle \langle n_1| \right) \varphi(1) \rangle = \sum_{n_1} \langle n_1 | \varphi(1) \rangle \langle \varphi(1) | A_I | n_1 \rangle.$$

Definindo,

$$\rho \equiv |\varphi(1)\rangle \langle \varphi(1)|.$$

Temos,

$$\langle A_I \rangle = \text{Tr}(\rho A_I). \quad (2.7)$$

Se queremos a probabilidade de obter um certo autovalor a_I em uma medida de A_I no estado (2.1), teremos:

$$P_{a_I} = |a_I\rangle \langle a_I| \Rightarrow P(a_I) = \langle \varphi(1) | P_{a_I} | \varphi(1) \rangle = \text{Tr}(\rho P_{a_I}).$$

Desta definição de ρ tiramos diretamente sua propriedade de idempotência:

$$\rho^2 = \rho \Rightarrow \text{Tr}(\rho) = \text{Tr}(\rho^2) = 1. \quad (2.8)$$

Estamos interessados, no entanto, nas informações que este operador pode nos dar sobre o estado quântico. Vamos comparar os elementos de matriz do operador densidade para dois estados em particular. Para o estado (2.1):

$$\begin{aligned} \langle n_1' | \rho | n_1 \rangle &= \langle n_1' | \varphi(1) \rangle \langle \varphi(1) | n_1 \rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow [\rho] &= \begin{pmatrix} |c_0|^2 & c_0 c_1^* & c_0 c_2^* & \cdots \\ c_1 c_0^* & |c_1|^2 & c_1 c_2^* & \cdots \\ c_2 c_0^* & c_2 c_1^* & |c_2|^2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

E no caso de $|\varphi(1)\rangle$ ser um autovetor $|n_1''\rangle$ pertencente a \mathfrak{S}_1 , temos:

$$\begin{aligned} \langle n_1' | \rho | n_1 \rangle &= \langle n_1' | (|n_1''\rangle \langle n_1''|) | n_1 \rangle = \delta_{n_1' n_1''} \delta_{n_1'' n_1} \Rightarrow \\ \Rightarrow [\rho] &= \langle n_1'' | \begin{pmatrix} & & & |n_1''\rangle \\ 0 & \cdots & & \\ \vdots & \ddots & & \\ & 0 & 1 & 0 \\ & & 0 & \ddots \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (2.10)$$

Ambos (2.9) e (2.10) correspondem a estados puros, porém, (2.1) em geral não possui n_I bem definido pois é uma superposição coerente destes estados, ao contrário do estado $|n_1''\rangle$ cuja matriz densidade é um projetor (2.10). Vemos que os elementos da diagonal informam as probabilidades de, após uma medida, obtermos um dado valor de n_I e são chamados populações. No primeiro caso, por ser uma superposição, temos vários valores possíveis com diferentes probabilidades, e no segundo caso, temos certeza de que valor iremos obter após a medida. Os elementos fora da diagonal dão informação a respeito das correlações entre os vários estados da base, que no segundo caso são todos nulos, por se tratar de um vetor da base na qual a matriz está representada. Por isso, estes elementos são frequentemente chamados de coerências.

2.2.2 Operador Densidade para Misturas Estatísticas.

Misturas estatísticas são estados quânticos que não podem ser representados por um ket pois são superposições incoerentes de estados puros. Suponhamos que num feixe

de N partículas não-interagentes, todas num dado estado tipo (2.1), após medirmos um certo observável, $N/2$ das partículas ficaram no estado 1, $N/4$ no estado 2 e $N/4$ no estado 3. Este sistema de partículas, após a medida, não pode ser descrito por um estado puro. O operador densidade, entretanto, ainda pode ser definido para este sistema usando a mesma idéia de 2.2.1. Seja B_I um observável. Seu valor médio neste novo estado será dado pela soma dos valores médios de B_I em cada ket, cada um desses pesados pelo número de partículas que contribuem com este valor médio, dividido pelo número total de partículas:

$$\langle B_I \rangle = \frac{1}{N} \left[\frac{N}{2} \langle 1|B_I|1 \rangle + \frac{N}{4} \langle 2|B_I|2 \rangle + \frac{N}{4} \langle 3|B_I|3 \rangle \right].$$

Analogamente a (2.7), podemos obter:

$$\langle B_I \rangle = Tr(\rho B_I).$$

Definindo,

$$\rho \equiv \frac{1}{2} |1\rangle\langle 1| + \frac{1}{4} |2\rangle\langle 2| + \frac{1}{4} |3\rangle\langle 3|.$$

onde vemos que os pesos são probabilidades clássicas.

De maneira geral, para:

$$\sum_i p_i = 1 \Rightarrow$$

$$\rho \equiv \sum_i p_i |n_i\rangle\langle n_i|,$$

temos o operador densidade para uma mistura qualquer.

Se calcularmos o traço de ρ neste caso teremos:

$$Tr(\rho) = \sum_i p_i = 1.$$

Que vale também para o caso do estado puro. Mas a idempotência é alterada para:

$$Tr(\rho^2) < 1.$$

Mais uma vez, vamos construir a matriz deste operador para vermos que informações ela traz:

$$\begin{aligned} \langle n_1' | \rho | n_1 \rangle &= p_{n_1} \delta_{n_1' n_1} \Rightarrow \\ \Rightarrow [\rho] &= \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & p_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & p_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Vemos que as coerências são todas nulas, o que era de se esperar para uma superposição incoerente. Ainda assim, este resultado é diferente de (2.10) pois mais que um elemento da diagonal é não nulo e a soma deles deve ser um.

É importante ressaltar que quando falamos de elementos de matriz, há uma dependência da base em que eles foram calculados. Logo, como ρ é um operador hermiteano, podemos sempre achar uma base que o deixe diagonal. Ou, se ρ já é diagonal, podemos, por uma mudança de base, deixá-lo não-diagonal. Ou seja, podemos fazer as coerências sumirem ou aparecerem. Qual o significado então das comparações feitas e do significado das coerências? Dentro do que acabou de ser dito acima, parece, à primeira vista, que a análise desta seção 2.2 fora inútil. Entretanto, isto não é verdade, pois, a escolha de base que fizemos não foi aleatória. Escolhemos a base de autovetores correspondente de um certo observável, pois, queríamos informações sobre as correlações entre estados desta base. Se tivéssemos escolhido uma outra base diferente de $\{|n_1, n_2\rangle\}$, com certeza não teríamos informações sobre correlações do estado do sistema e esta base, mas com a nova base.

Os conceitos de estados puros e misturas estatísticas são, no entanto, características intrínsecas de um estado quântico e, conseqüentemente, independentes da base. Esse é o resultado importante destas duas últimas seções. Isto pode ser evidenciado através de uma propriedade do operador densidade. Como o traço de um operador é independente da base:

$$\begin{aligned} Tr(\rho^2) &= 1 \Rightarrow \text{estado puro.} \\ Tr(\rho^2) &< 1 \Rightarrow \text{estado de mistura.} \end{aligned}$$

2.2.3 O Operador Densidade para Sistemas com Dois Graus de Liberdade.

Anteriormente havíamos feito um paralelo entre estados quânticos e clássicos e destacado várias analogias e semelhanças na descrição e comportamento para sistemas com dois graus de liberdade. Vejamos como estas coisas se traduzem para o formalismo do operador densidade.

Seja um sistema cujo estado total é separável. Vimos que estados como este descrevem sistemas que não interagem. Se o sistema estiver num estado (2.5), teremos:

$$\begin{aligned} \rho &= (|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle)(\langle\varphi(1)| \otimes \langle\varphi(2)|) = \\ &= |\varphi(1)\rangle\langle\varphi(1)| \otimes |\varphi(2)\rangle\langle\varphi(2)| = \rho_1 \otimes \rho_2. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Por outro lado, se o sistema estiver no estado (2.4), teremos:

$$\begin{aligned} \langle n_1', n_2' | \rho | n_1, n_2 \rangle &= c_{n_1' n_2'} c_{n_1 n_2}^* \neq c_{n_1'} c_{n_2'} c_{n_1}^* c_{n_2}^* \Rightarrow \\ &\Rightarrow \rho \neq \rho_1 \otimes \rho_2. \end{aligned}$$

Ou seja, a separabilidade ou não de um sistema também se manifesta no operador densidade.

2.2.4 A Idéia de Traço Parcial.

Até o momento, conseguimos obter todas as propriedades que gostaríamos de um sistema físico via operador densidade. Porém, o formalismo apresentado nos permite mais algumas coisas. Como foi visto anteriormente, dependendo se há ou não interação entre dois subsistemas, as propriedades físicas de um deles (probabilidades, valores médios, etc.) são ou não influenciadas pelo outro subsistema. Suponhamos que queremos calcular o valor médio de um observável A_I que atua somente em \mathfrak{S}_1 . No espaço \mathfrak{S} , podemos escrevê-lo como:

$$\bar{A}_I = A_I \otimes 1_2.$$

Assim como foi mostrado em (2.7), podemos definir o valor médio deste observável por:

$$\langle \bar{A}_1 \rangle = Tr_1(\rho_1 A_1), \quad (2.12)$$

onde $\langle n_1' | \rho_1 | n_1 \rangle = \langle n_1' | Tr_2(\rho) | n_1 \rangle = \sum_{n_2} \langle n_1', n_2 | \rho | n_1, n_2 \rangle$.

Se ρ representa um estado separável, então, devido a (2.11), temos:

$$\sum_{n_2} \langle n_1', n_2 | \rho | n_1, n_2 \rangle = \sum_{n_2} \langle n_1' | \rho_1 | n_1 \rangle \langle n_2 | \rho_2 | n_2 \rangle.$$

Por outro lado, se ρ não é separável:

$$\sum_{n_2} \langle n_1', n_2 | \rho | n_1, n_2 \rangle \neq \sum_{n_2} \langle n_1' | \rho_1 | n_1 \rangle \langle n_2 | \rho_2 | n_2 \rangle.$$

Mas o resultado (2.12) permanece válido. Porém, é importante ressaltar que os operadores construídos são diferentes. Para estados do tipo produto temos:

$$\langle n_1' | \rho_1 | n_1 \rangle = \langle n_1' | Tr_2(\rho) | n_1 \rangle = c_{n_1} c_{n_1}^*.$$

E no outro caso:

$$\langle n_1' | \rho_1 | n_1 \rangle = \langle n_1' | Tr_2(\rho) | n_1 \rangle = \sum_{n_2} c_{n_1' n_2} c_{n_1 n_2}^*.$$

Ou seja, a influência do subsistema 2 no valor médio de um observável de 1 está embutida em ρ_1 .

Da mesma maneira, é possível definir ρ_2 como:

$$\rho_2 = Tr_1(\rho).$$

E como resultado importante temos que, se dois subsistemas interagem, e construímos os operadores ρ_1 e ρ_2 como foi indicado, então:

$$\rho \neq \rho_1 \otimes \rho_2.$$

Pois, neste caso:

$$\langle n_1', n_2' | \rho | n_1, n_2 \rangle \neq \langle n_1' | \rho_1 | n_1 \rangle \langle n_2' | \rho_2 | n_2 \rangle.$$

Via traço parcial, encontramos uma maneira de estudar o que acontece com parte do sistema “ignorando” o que acontece na outra parte. Isso permite que acompanhem a influência da interação em um dos subsistemas.

2.2.5 Uma Medida de Emaranhamento.

Até o momento, neste capítulo, analisamos as diferenças entre subsistemas com e sem interação do ponto de vista das descrições de seus estados por meio de vetores do espaço de Hilbert e do operador densidade. Mostramos em 2.1.2 que, no caso de dois subsistemas que interagem, um estado inicial separável como (2.5) se torna, durante a evolução temporal, um estado não-separável ou “emaranhado” como (2.6). O operador densidade reduzido será inicialmente, para o estado (2.5) igual a:

$$\rho_1(0) = |\varphi(1)\rangle\langle\varphi(1)| \quad \text{e} \quad \rho_2(0) = |\varphi(2)\rangle\langle\varphi(2)|,$$

devido ao que foi discutido em 2.2.4. Além disso, vemos que ρ_1 e ρ_2 representam estados puros para esse caso. Perguntamo-nos agora o que acontece com ρ_1 e ρ_2 a medida que o tempo passa e o estado total passa a ser como (2.6), “emaranhado”, ou seja, como é a evolução temporal do operador densidade reduzido? Sabemos que do operador densidade total satisfaz:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\rho, H] \quad [5],$$

e que devido ao emaranhamento do estado total, em geral:

$$\rho(t) \neq \rho_1(t) \otimes \rho_2(t),$$

como dito em 2.2.4.

Encontrar a equação de evolução temporal do operador densidade de um subsistema que está acoplado a um outro se constitui num ramo de investigação atualmente bem estabelecido que trata desde fenômenos aplicados de Óptica Quântica até problemas fundamentais como a medida em Mecânica Quântica. Para ilustrar, vamos reproduzir um caso já amplamente estudado de um subsistema acoplado a um meio. Trata-se de uma partícula se movendo em uma dimensão num potencial $V(x)$ acoplada através de sua posição com um reservatório térmico – uma coleção de osciladores harmônicos à temperatura T [6, 26, 27]. Seguiremos a apresentação deste exemplo como feito em [6]. Na representação de posição, pode-se mostrar que [29] a equação de evolução para o operador densidade reduzido da partícula é:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{-i}{\hbar} [H_0, \rho] - \gamma(x-x') \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x'} \right) \rho - \frac{2m\gamma k_B T}{\hbar^2} (x-x')^2 \rho. \quad (2.13)$$

Que é chamada *equação mestra* no limite de altas temperaturas.

No primeiro termo temos o Hamiltoniano H_0 só da partícula. Se houvesse somente este termo, teríamos uma evolução unitária, ou seja, um estado inicialmente puro permaneceria puro. Nos termos seguintes, γ é uma taxa de relaxação, k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura do reservatório e m a massa da partícula. Para um regime semiclássico, com $\hbar \rightarrow 0$, o último termo se torna dominante. A solução explícita de (2.13) considerando o lado direito somente com o último termo é:

$$\rho(x, x', t) = \rho(x, x', 0) \exp \left[-(x-x')^2 Dt / \hbar^2 \right]$$

onde $D = 2m\gamma k_B T$

A evolução devido somente a este termo (chamado de termo de descoerência) deixa inalterados os termos da diagonal (as populações) do operador densidade reduzido na representação de posição. Por outro lado, os termos onde $x \neq x'$ (as coerências) decrescem exponencialmente em uma escala chamada de escala de descoerência:

$$t_d = \gamma^{-1} \frac{\hbar^2}{D(x-x')^2} = \gamma^{-1} \left(\frac{\lambda}{\Delta x} \right)^2$$

onde $\lambda = (\hbar^2/2mk_B T)$ é o comprimento de onda térmico de De Broglie.

Ou seja, o efeito do acoplamento com o reservatório é destruir as coerências e levar, depois de um tempo característico, um estado inicialmente puro para uma mistura estatística. No caso desse trabalho, também temos um partícula se movendo em uma dimensão num potencial $V(x)$ mas que, ao invés de estar acoplada a um reservatório, está acoplada a um outro grau de liberdade via um acoplamento não-integrável. Esperamos que no nosso caso, da mesma maneira que neste exemplo, observemos perda de coerência, do ponto de vista de um dos subsistemas, devido à interação com outro subsistema, entretanto, podendo observar neste processo algum traço da dinâmica clássica associada.

Vimos na seção anterior que quando dois subsistemas interagem o estado total, inicialmente separável em geral, se torna emaranhado à medida que o tempo passa podendo ou não retornar a um estado separável dependendo tanto da complexidade dos subsistemas como da interação. Também foi mostrado que através do traço parcial, podemos construir um operador densidade reduzido do qual obtemos informação do respectivo subsistema. Em vários trabalhos [7,14,15] é usada como uma medida do emaranhamento entre dois subsistemas a entropia linear ou defeito de idempotência. Este parâmetro pode ser calculado a partir do operador densidade reduzido de um dos subsistemas, por exemplo:

$$\rho_2 = Tr_1(\rho),$$

da seguinte maneira:

$$\delta(t) = 1 - Tr_2(\rho_2^2(t)).$$

Vemos que, inicialmente, de acordo com as propriedades anteriores, quando o estado do sistema é separável, seu valor é zero. O crescimento de $\delta(t)$ nos indica a rapidez com que o subsistema 2, no caso, perde coerência devido ao emaranhamento com o outro subsistema. Ou seja, a interação dos subsistemas é vista como uma série de

medidas que um subsistema faz no outro levando o estado deste de uma superposição coerente para uma incoerente, quando então:

$$\text{Tr}_2(\rho_2^2(t)) < 1.$$

Procuraremos mostrar na seqüência deste trabalho que é possível encontrar no comportamento de $\delta(t)$, que é um parâmetro quântico, a influência do caos presente na dinâmica clássica (associada no limite clássico) quando $\hbar \ll h_1, h_2$ e o estado inicial é escolhido adequadamente. No próximo capítulo, veremos uma proposta de como escolher estes estados.

Capítulo 3

Caos e Emaranhamento.

Nos capítulos anteriores, mostramos o comportamento dinâmico clássico do sistema utilizado e sua quantização. Em seguida, o formalismo que melhor evidencia o processo de emaranhamento e em que situações este processo aparece. Percebendo que o NELSON quantizado se encaixa nessas situações, pretendemos neste capítulo mostrar de que maneira faremos a correspondência entre as dinâmicas clássica e quântica. Em particular, apresentaremos os estados coerentes e as funções Husimi como ferramentas importantes para realizar a proposta inicial de procurar no processo de emaranhamento alguma influência da dinâmica clássica.

3.1 Propriedades dos Estados Coerentes.

A escolha dos estados coerentes como estados iniciais tem como objetivo conectar a estrutura do espaço de fase clássico com a dinâmica do emaranhamento quântico, o que parece possível devido às propriedades que estes estados apresentam [16]. A expansão deste estado na base de autoestados do oscilador harmônico é:

$$|\alpha\rangle = \sum_n e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (3.1)$$

Como no nosso caso o problema possui dois graus de liberdade, teremos:

$$|\psi(0)\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle = \sum_{n_1 n_2} e^{-\frac{|\alpha_1|^2}{2}} e^{-\frac{|\alpha_2|^2}{2}} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |n_1, n_2\rangle \quad (3.2)$$

onde α_1 e α_2 são números complexos obtidos a partir das coordenadas e momentos clássicos:

$$\alpha_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q}_1 + i\hat{p}_1); \text{ onde } \hat{q}_1 = \left(\frac{m\omega_1}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} q_1 \text{ e } \hat{p}_1 = \left(\frac{\hbar}{m\omega_1}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{p_1}{\hbar} \quad (3.3)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q}_2 + i\hat{p}_2); \text{ onde } \hat{q}_2 = \left(\frac{m\omega_2}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} q_2 \text{ e } \hat{p}_2 = \left(\frac{\hbar}{m\omega_2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{p_2}{\hbar}$$

Os valores médios dos operadores de posição e momento, neste estado, são a primeira propriedade interessante para o nosso propósito:

$$\begin{aligned} \langle Q_1 \rangle &= q_1 ; \langle P_1 \rangle = p_1 \\ \langle Q_2 \rangle &= q_2 ; \langle P_2 \rangle = p_2 \end{aligned} \quad (3.4)$$

Ou seja, são os próprios valores clássicos. Além disso, a variância em torno destes valores é:

$$\begin{aligned} \Delta Q_1 &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega_1}\right)^{\frac{1}{2}} ; \Delta P_1 = \left(\frac{m\omega_1\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \Delta Q_2 &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega_2}\right)^{\frac{1}{2}} ; \Delta P_2 = \left(\frac{m\omega_2\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.5)$$

O que implica que:

$$\Delta Q_1 \Delta P_1 = \frac{\hbar}{2} ; \Delta Q_2 \Delta P_2 = \frac{\hbar}{2} \quad (3.6)$$

O que mostra que são estados de incerteza mínima.

As funções de onda destes estados mostram expressões compatíveis com as propriedades anteriores. Por exemplo, a probabilidade para q_1 é dada por:

$$|\psi_{\alpha_1}(q_1)|^2 = \left(\frac{m\omega_1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{q_1 - \langle Q_1 \rangle}{\Delta Q_1}\right]^2\right\} \quad (3.7)$$

Que é uma distribuição Gaussiana centrada no valor médio mencionado.

O valor médio da energia para o Hamiltoniano transformado:

$$H_{clás.} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2 q_1^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 q_2^2}{2} - \frac{\lambda}{m} q_1 p_1 p_2 + \frac{\lambda^2}{2m} q_1^2 p_2^2 \quad (3.8)$$

Será:

$$\langle \alpha_1, \alpha_2 | H | \alpha_1, \alpha_2 \rangle = H_{clás.} + \frac{\hbar}{2} \left[\frac{\lambda^2}{2m} \left(q_1^2 m \omega_2 + \frac{p_2^2}{m \omega_1} + \frac{\hbar \omega_2}{2 \omega_1} \right) + \omega_1 + \omega_2 \right] \quad (3.9)$$

Que é a energia clássica mais uma correção.

Estas propriedades mostram que podemos centralizar este estado em torno de um ponto do espaço de fase com energia média próxima do valor clássico. Conhecendo o espaço de fase, podemos escolher pontos pertencentes a órbitas caóticas e regulares, o que pode nos permitir analisar se a sua evolução temporal quântica pode apresentar características distintas dependendo destas escolhas.

A expressão (3.9) lembra a Hamiltoniana clássica que se obtém via o Princípio Variacional dependente do tempo [24], através do qual, juntamente com uma parametrização complexa, podemos construir uma estrutura clássica (com parênteses de Poisson generalizados) onde está representado (aproximadamente) o sistema quântico [25]. Neste trabalho, porém, não analisaremos esta estrutura. Em (3.9), $H_{clás.}$ se refere simplesmente à Hamiltoniana clássica inicial (1.20) e o intuito de se calcular (3.9) se resume em mostrar que a energia média do estado $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$ é próxima à energia clássica ($H_{clás.}$) da trajetória associada, diferindo de um termo que depende de \hbar .

3.2 Correspondência entre a Evolução Quântica e o Espaço de Fase Clássico.

Pretendemos, devido às propriedades apresentadas anteriormente, estabelecer a correspondência entre a evolução quântica e o espaço de fase clássico a partir da evolução temporal de um estado coerente. Para o sistema NELSON, faremos isso da maneira descrita a seguir. Tomemos uma seção de Poincaré como a da figura 1.3b do sistema NELSON transformado onde há regime misto. Podemos escolher um estado coerente centrado em qualquer ponto da seção, nas regiões caóticas ou regulares. Fixando

a energia, a coordenada seccionada (por exemplo $q_1=0$) e o ponto da seção, o conjunto (q_1, p_1, q_2, p_2) fica definido. Escolhemos então como estado inicial o estado coerente definido a partir deste ponto como em (3.2). Este estado, inicialmente separável, quando evoluído no tempo, vai se tornar um estado emaranhado:

$$\begin{aligned}
|\psi(0)\rangle &= |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle = \sum_{n_1 n_2} e^{-\frac{|\alpha_1|^2}{2}} e^{-\frac{|\alpha_2|^2}{2}} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |n_1, n_2\rangle \Rightarrow \\
\Rightarrow |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi(0)\rangle = \sum_n e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |n\rangle \langle n | \psi(0)\rangle = \quad (3.10) \\
&= \sum_{n_1 n_2} e^{-\frac{|\alpha_1|^2}{2}} e^{-\frac{|\alpha_2|^2}{2}} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} e^{-i\omega_n t} |n\rangle \langle n | n_1, n_2\rangle
\end{aligned}$$

onde H é o Hamiltoniano (1.24), $\{|n\rangle\}$ seus autovetores e $\{\hbar\omega_n\}$ seus autovalores.

Para medirmos o emaranhamento ao longo do tempo, construímos $\delta_2(t)$, como em 2.2.5. Com (3.10) construímos o operador densidade total:

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (3.11)$$

Realizando o traço parcial, construímos o operador densidade reduzido:

$$\rho_2(t) = Tr_1 \rho(t). \quad (3.12)$$

E finalmente a entropia linear:

$$\delta_2(t) = 1 - Tr_2(\rho_2^2(t)). \quad (3.13)$$

Poderemos calcular $\delta_2(t)$ a partir de estados como (3.10) associados tanto a condições iniciais caóticas como a regulares e esperamos associar alguma característica de sua evolução temporal à natureza do ponto do espaço de fase clássico associado ao estado inicial. Alguns trabalhos [7] já mostraram que isso é possível para determinados sistemas, evidenciando, por exemplo, que os $\delta_2(t)$ associados às condições iniciais caóticas crescem mais rapidamente e permanecem num patamar mais alto que os associados às condições iniciais regulares.

3.3 A Distribuição de Husimi.

Nesta seção, apresentaremos a definição da distribuição Husimi[17], sua interpretação e sua utilidade neste trabalho. É importante mencionar que esta distribuição já se constitui uma ferramenta poderosa para se investigar traços de órbitas periódicas em funções de onda [18].

Uma função de onda abstrata é um vetor em um espaço de Hilbert que pode ser expresso em várias representações como as de energia, posição e momento:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n c_n |\varphi_n\rangle; & c_n &= \langle \varphi_n | \psi \rangle, \\ |\psi\rangle &= \int \psi(q) |q\rangle dq; & \psi(q) &= \langle q | \psi \rangle, \\ |\psi\rangle &= \int \psi(p) |p\rangle dp; & \psi(p) &= \langle p | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.14)$$

sendo que os coeficientes c_n , $\psi(q)$ e $\psi(p)$ são interpretados sempre como amplitudes de probabilidade. Porém, do Princípio da Incerteza de Heisenberg, temos que não é possível construir autofunções simultâneas de operadores que não comutam, o que ocorre com aqueles associados às variáveis dinâmicas q e p . Logo, nenhuma função pode ser definida como sendo a probabilidade de encontrar a posição q e o momento p com um dado valor. Dessa maneira, quando queremos comparar características clássicas e quânticas, temos um problema pois sabemos que propriedades clássicas são representadas em termos de trajetórias no espaço de fase.

Entretanto, Wigner [19] definiu funções de (q,p) associadas às funções de onda que caracterizam distribuições em q e p . Estas funções, chamadas de funções de Wigner, são definidas como transformadas de Weyl do operador densidade:

$$W(q, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int dQ \left\langle q + \frac{Q}{2} \left| \rho \right| q - \frac{Q}{2} \right\rangle e^{-ipQ/\hbar}, \quad (3.15)$$

onde D é o número de dimensões. Para um estado puro fica:

$$W(q, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int dQ \psi \left(q + \frac{Q}{2} \right) \psi^* \left(q - \frac{Q}{2} \right) e^{-ipQ/\hbar}, \quad (3.16)$$

Embora esta função nos forneça as densidades de probabilidades corretas:

$$\begin{aligned} |\langle q | \psi \rangle|^2 &= \int W(q, p) dp, \\ |\langle p | \psi \rangle|^2 &= \int W(q, p) dq, \end{aligned} \quad (3.17)$$

não podemos interpretá-la como uma densidade de probabilidade no espaço de fase por ela poder apresentar valores negativos em algumas regiões deste [20].

Porém, foi proposto que uma versão suavizada da distribuição de Wigner, através da sua média em volumes maiores que os de mínima incerteza, pode fornecer sempre valores positivos, desde que [21] a média seja Gaussiana. Portanto, tomando a média Gaussiana de $W(q, p)$ construímos a chamada distribuição Husimi, que pode ser escrita como a intensidade da função de onda na representação de estados coerentes [22]:

$$Q(\alpha'_1, \alpha'_2, t) = \left| \left\langle \alpha'_1, \alpha'_2 \middle| \psi(t) \right\rangle \right|^2. \quad (3.18)$$

Podemos interpretar $Q(\alpha'_1, \alpha'_2, t)$ como a probabilidade de encontrar o sistema em uma região do espaço de fase com um volume $(\hbar)^D$ centrada no ponto que define (α'_1, α'_2) , e é muitas vezes chamada de uma função de quase-propabilidade.

Para sistemas de dois graus de liberdade, como o NELSON, a função $Q(\alpha'_1, \alpha'_2)$ é uma função de quatro variáveis e, portanto, de difícil visualização. Para podermos visualizá-la, realizamos sua projeção nas coordenadas de um dos graus de liberdade:

$$\begin{aligned} Q_2(q_2, p_2, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int Q(\alpha'_1, \alpha'_2, t) dq_1 dp_1 = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \left| \left\langle \alpha'_1, \alpha'_2 \middle| \psi(t) \right\rangle \right|^2 dq_1 dp_1. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Para o nosso propósito, a função $Q_2(q_2, p_2, t)$ nos permite a visualização da distribuição de quase-probabilidade ao longo do tempo que o subsistema 2 interage com 1. Assumindo $|\psi(t)\rangle$ como o estado total do sistema NELSON, evoluído em um instante qualquer como (3.10), $Q_2(q_2, p_2, t)$ que é a função para um dos graus de liberdade,

permitirá que observemos a influência do emaranhamento com o outro grau de liberdade na distribuição de quase-probabilidade em (q_2, p_2) para cada instante.

Capítulo 4

Cálculo da Entropia Linear, Husimis e Populações para o Sistema NELSON.

Mostraremos neste capítulo as evoluções temporais de $\delta(t)$, distribuições Husimi e populações do operador densidade reduzido ρ_2 calculadas numericamente para o sistema NELSON. Estes cálculos utilizam a diagonalização numérica anteriormente discutida no capítulo 1. Descreveremos a sistemática numérica adotada, evidenciando os cuidados tomados para uma boa confiabilidade do resultado final.

4.1 Sistemática Numérica.

O primeiro passo para os cálculos foi a escolha de uma superfície de energia que apresentasse regime misto através de seções de Poincaré. Escolhemos a de $E=0.06$ e nela selecionamos seis condições iniciais (c.i.), três regulares e três caóticas. Na figura 4.1, podemos ver a seção $q_1=0$ de $E=0.06$ e a localização das c.i. escolhidas, cada uma delas rotulada por um número que utilizaremos nos resultados seguintes.

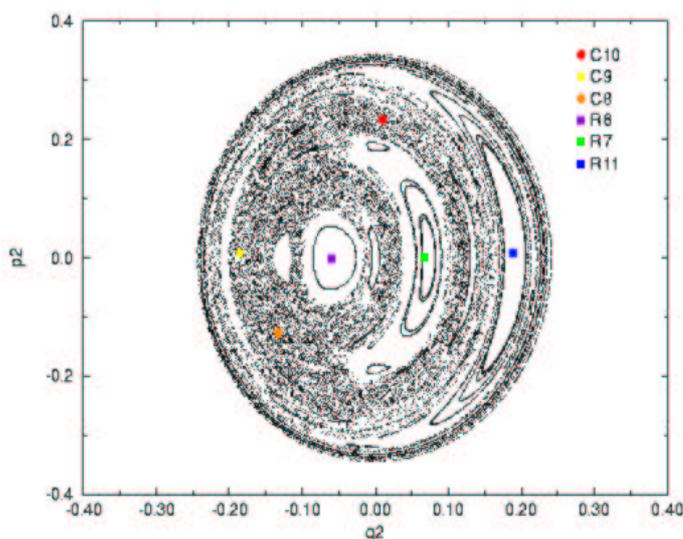


Figura 4.1 – Condições iniciais escolhidas na seção de Poincaré $q_1=0$ da Hamiltoniana (1.20) para $E=0.06$ sendo C10 ($q_1=0.0, p_1=0.255442, q_2=0.0100251, p_2=0.233556$), C9 ($q_1=0.0, p_1=0.224956, q_2=-0.18618, p_2=0.00830833$) e C8 ($q_1=0.0, p_1=0.261775, q_2=-0.13319, p_2=-0.126471$) as caóticas e R6 ($q_1=0.0, p_1=0.335802, q_2=-0.0601504, p_2=-0.000923148$), R7 ($q_1=0.0, p_1=0.333073, q_2=0.0673111, p_2=0.000923148$) e R11 ($q_1=0.0, p_1=0.220127, q_2=0.189044, p_2=0.00830833$) as regulares.

Para o cálculo de $\delta(t)$, associamos a cada c.i. escolhida um estado inicial do tipo produto de estados coerentes como (3.10) e calculamos a evolução temporal deste estado utilizando os autoestados e autoenergias de (1.26) obtidos numericamente, porém, a base de autoestados, teoricamente infinita, numericamente é finita. Este truncamento da base leva a um erro na normalização do estado inicial que se não for controlado prejudica os resultados para $\delta(t)$. Este erro depende praticamente dos valores de $|\alpha_1(0)|^2$ e $|\alpha_2(0)|^2$. Quanto maiores estes valores, maiores devem ser $n_{1máx}$ e $n_{2máx}$ para o truncamento, para que se tenha uma boa normalização. Portanto, para definirmos $(n_{1máx}, n_{2máx})$ temos que saber quais são os possíveis valores máximos para $|\alpha_1|^2$ e $|\alpha_2|^2$. Lembremos que eles são definidos por:

$$|\alpha_1|^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{m\omega_1}{\hbar} \right) q_1^2 + \frac{p_1^2}{m\omega_1\hbar} \right] = \frac{1}{\hbar\omega_1} \left[\frac{m\omega_1^2 q_1^2}{2} + \frac{p_1^2}{2m} \right] = \frac{E_1}{\hbar\omega_1}$$

$$|\alpha_2|^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{m\omega_2}{\hbar} \right) q_2^2 + \frac{p_2^2}{m\omega_2\hbar} \right] = \frac{1}{\hbar\omega_2} \left[\frac{m\omega_2^2 q_2^2}{2} + \frac{p_2^2}{2m} \right] = \frac{E_2}{\hbar\omega_2}$$

Ou seja, dependem, para ω_1 e ω_2 fixos, da energia de cada subsistema e de \hbar . Quanto menor \hbar , maior $|\alpha_1|^2$ e $|\alpha_2|^2$, e quanto maiores E_1 e E_2 , maiores $|\alpha_1|^2$ e $|\alpha_2|^2$. Para energia E fixa, E_1 e E_2 podem ser no máximo iguais a E . Isto acontece, por exemplo, quando:

$$p_1 = (2mE)^{\frac{1}{2}} \quad \text{ou} \quad p_2 = (2mE)^{\frac{1}{2}}$$

Portanto, para energia fixa, sabendo o valor de \hbar , conhecemos $|\alpha_1|_{máx}^2$ e $|\alpha_2|_{máx}^2$, e podemos definir $(n_{1máx}, n_{2máx})$ assim que alcançarmos uma normalização com a precisão preterida. No nosso caso, para $E=0.06$ e para $\hbar = 0.005656855$, $\hbar = 0.003771232$ e $\hbar = 0.002828427$ escolhemos $n_{1máx} = 117$ e $n_{2máx} = 39$, obtendo, para os valores de \hbar , uma

precisão menor que 10^{-7} . Para esse valor de energia, temos, respectivamente, os seguintes valores de $|\alpha_1|_{m\acute{a}x}^2$ e $|\alpha_2|_{m\acute{a}x}^2$ para cada valor de \hbar mencionado: (33.5 , 7.5), (50.3 , 11.2) e (67.1 , 15.0).

Estes valores de \hbar foram definidos, como dito no Apêndice A, a partir, respectivamente, das seguintes razões: $\hbar/h_2 = 0.0005$, $\hbar/h_2 = 0.000\bar{3}$ e $\hbar/h_2 = 0.00025$. A princípio, poderíamos usar valores de \hbar cada vez menores, o que, do ponto de vista das distribuições Husimi, seria muito interessante por termos pacotes, pelo menos inicialmente, cada vez mais localizados no espaço de fase clássico. Porém, a diminuição de \hbar leva a um aumento na dimensão da matriz do Hamiltoniano (como já foi dito) e conseqüentemente eleva o tempo de execução dos cálculos. Uma maneira de contornar isso é alterar os valores das frequências. No entanto, ao fazer isso, não obtivemos seções de Poincaré confiáveis. Apesar disso, a largura a meia altura do pacote inicial possui, para os valores de \hbar utilizados, os seguintes diâmetros aproximados: 0.06, 0.05 e 0.04, que são comparáveis às dimensões das estruturas da seção de $E=0.06$.

Os cálculos das distribuições Husimi e das populações de ρ_2 foram feitos utilizando também a truncagem ($n_{1m\acute{a}x} = 117$, $n_{2m\acute{a}x} = 39$), para c.i. escolhidas na seção $E=0.06$ e $\hbar = 0.003771232$.

4.2 Cálculos de $\delta(t)$.

Na figura 4.2, temos as evoluções de $\delta(t)$ para as seis c.i. associadas para diferentes valores de \hbar . Como era de se esperar, em $t=0.0$, $\delta(t)$ é praticamente zero, pois todos os estados iniciais são puros e do tipo produto, e cresce com o passar do tempo devido ao emaranhamento. Na escala de tempo destas figuras ($t_{m\acute{a}x}=300.0$), nota-se, em geral, um agrupamento dos patamares para as c.i. caóticas em valores maiores que os das c.i. regulares. As c.i. R11 e R7 chegam a alcançar o patamar mais baixo das caóticas. A c.i. R6 se destaca por um patamar mais baixo.

Figura 4.2a

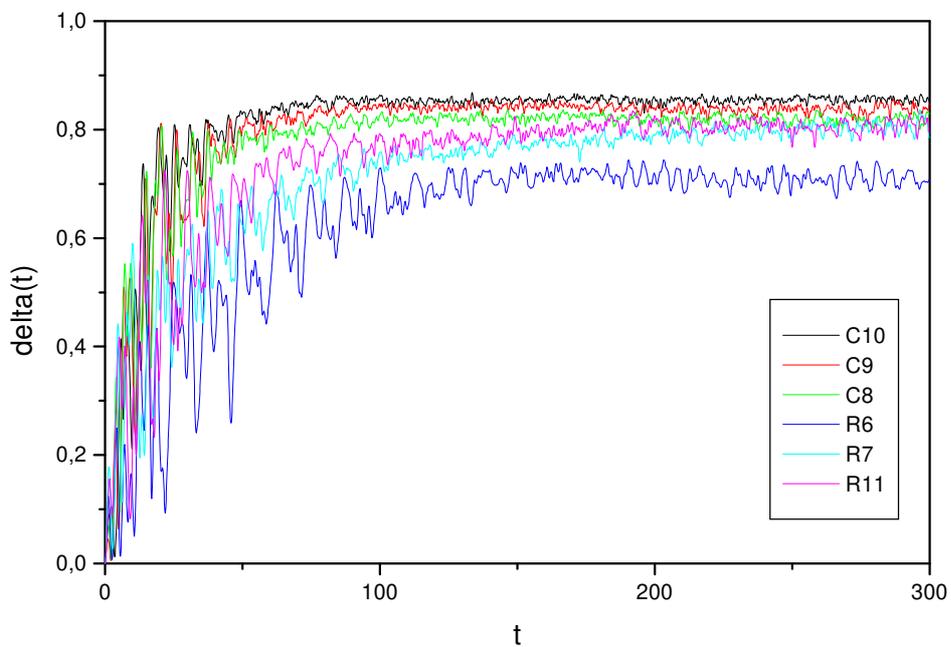
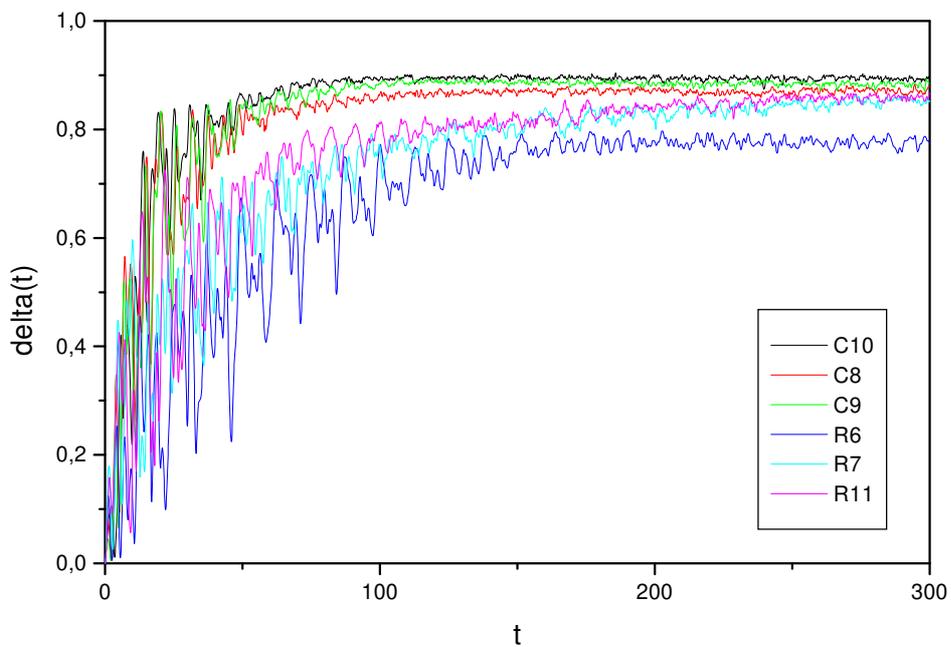


Figura 4.2b



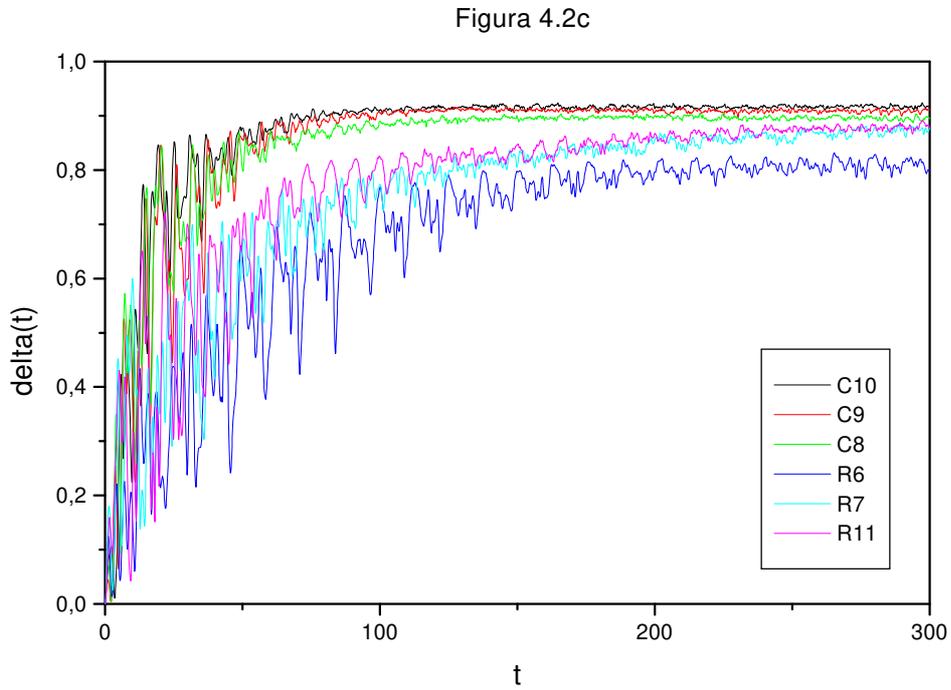


Figura 4.2 - $\delta(t)$ associados às c.i.s de $E=0.06$ para (4.2a) $\hbar = 0.005656855$, (4.2b) $\hbar = 0.003771232$ e (4.2c) $\hbar = 0.002828427$.

Na figura 4.3, temos as mesmas evoluções de $\delta(t)$ porém numa escala de tempo menor ($t_{m\acute{a}x}=80.0$). Nota-se que, para os três valores de \hbar , a partir de $t \cong 40.0$, os $\delta(t)$ associados às c.i.s caóticas estão sempre acima dos associados às c.i.s regulares, mostrando um crescimento mais rápido para os $\delta(t)$ associados às c.i.s caóticas. Percebem-se também maiores oscilações para aqueles associados às c.i.s regulares.

Figura 4.3a

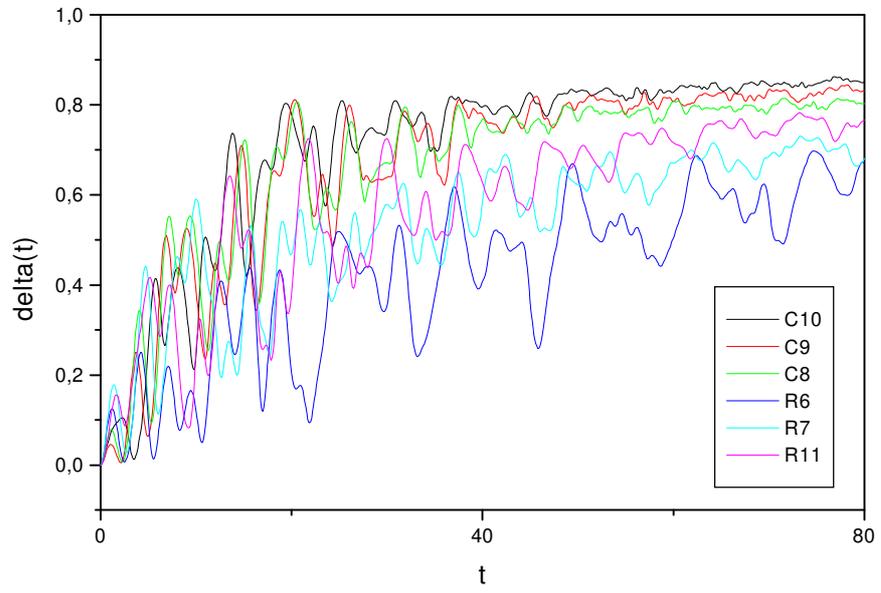
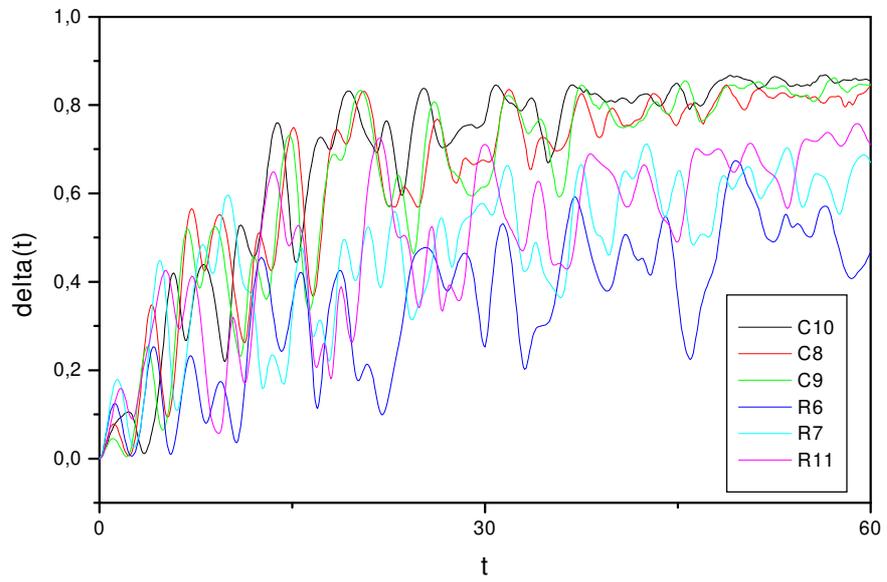


Figura 4.3b



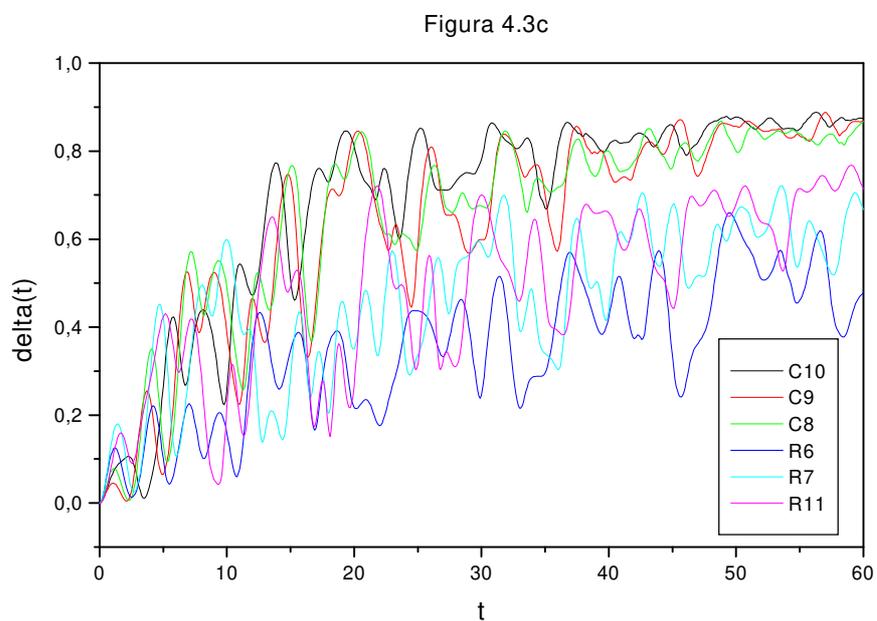


Figura 4.3 - $\delta(t)$ em tempos curtos associados às c.i.s de $E=0.06$ para (4.3a) $\hbar = 0.005656855$, (4.3b) $\hbar = 0.003771232$ e (4.3c) $\hbar = 0.002828427$.

Em seguida, na figura 4.4, temos as comparações das evoluções de $\delta(t)$, para diferentes valores de \hbar , para uma mesma c.i. regular associada. Percebe-se que as oscilações no patamar diminuem quando \hbar diminui ao contrário do valor do patamar que aumenta quando \hbar diminui. O crescimento a tempos curtos é muito pouco influenciado por \hbar , pelo menos na faixa de valores utilizada, pois as curvas se sobrepõem até t entre 115.0 e 120.0.

Figura 4.4a

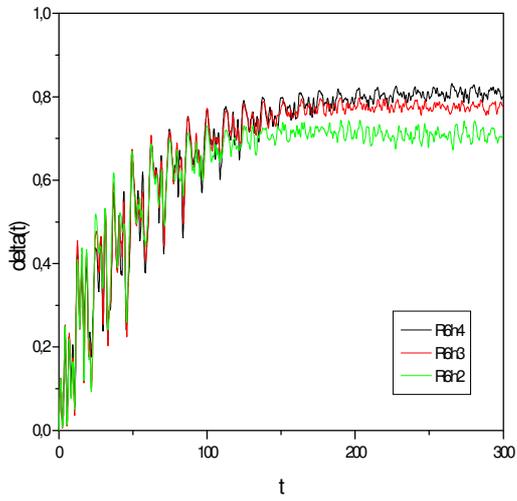


Figura 4.4b

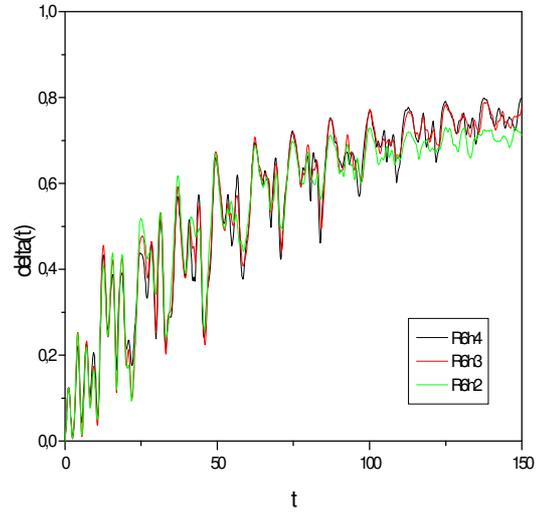


Figura 4.4c

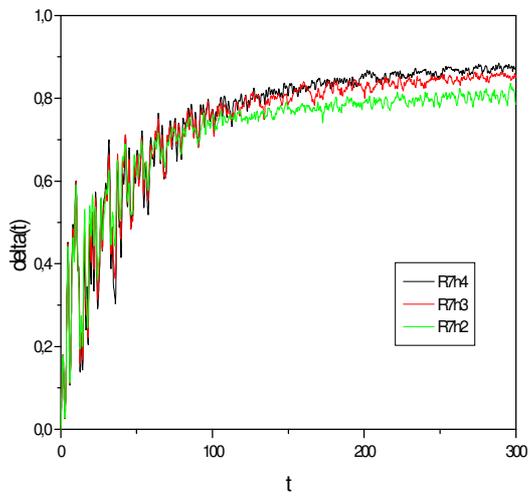
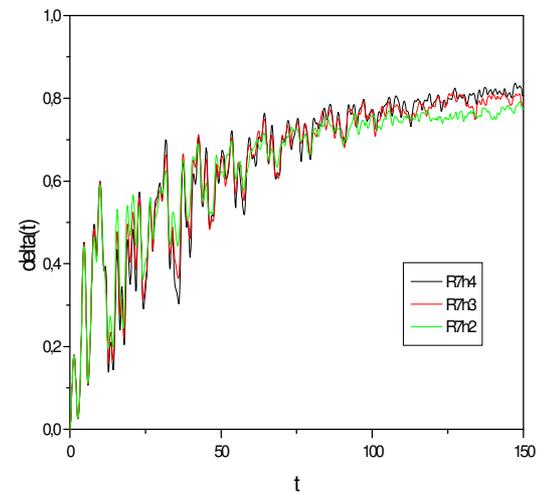


Figura 4.4d



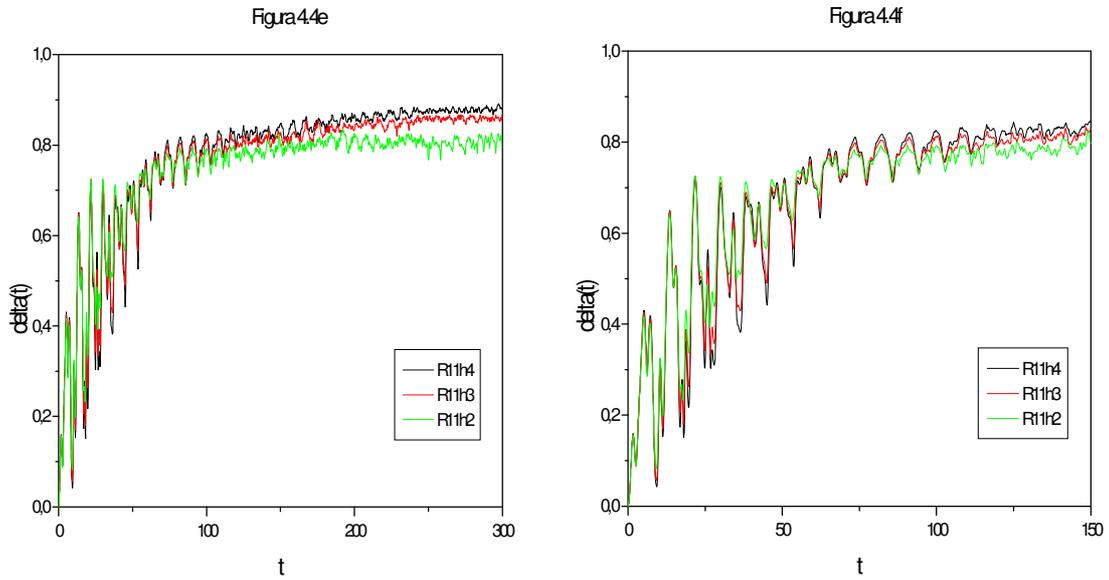


Figura 4.4 – Comparação de $\delta(t)$ para diferentes valores de \hbar ($h_2=0.005656855$, $h_3=0.003771232$ e $h_4=0.002828427$) e para diferentes c.i. regulares: R6 em 4.4a e b, R7 em 4.4c e d e R11 em 4.4e e f.

Na figura 4.5, temos a mesma comparação agora para as c.i.s caóticas associadas. Percebe-se também a diminuição das oscilações no patamar e o crescimento do patamar com a diminuição de \hbar . O crescimento a tempos curtos também é muito pouco influenciado por \hbar , na faixa de valores utilizada, pois as curvas se sobrepõem até t entre 40.0 e 50.0.

Figura 4.5a

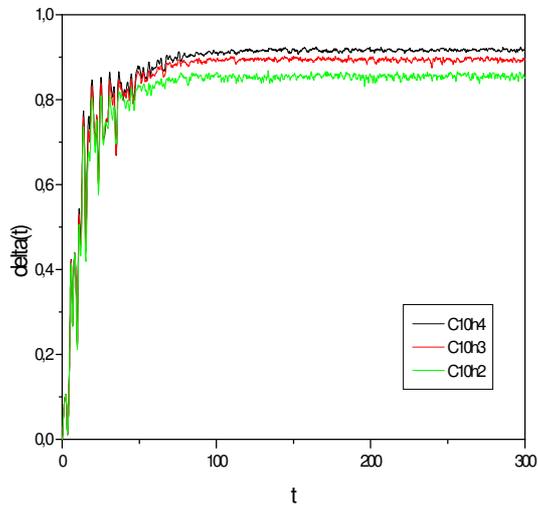


Figura 4.5b

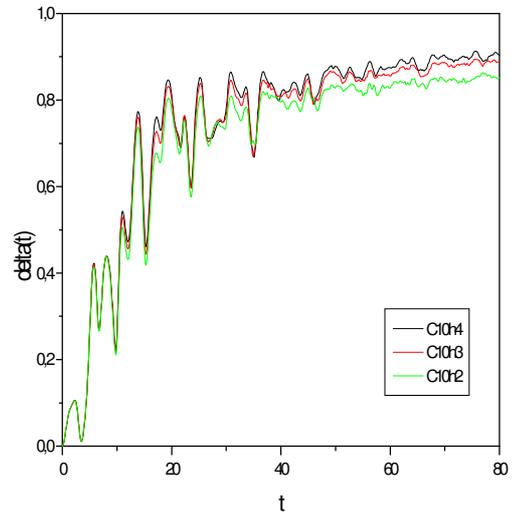


Figura 4.5c

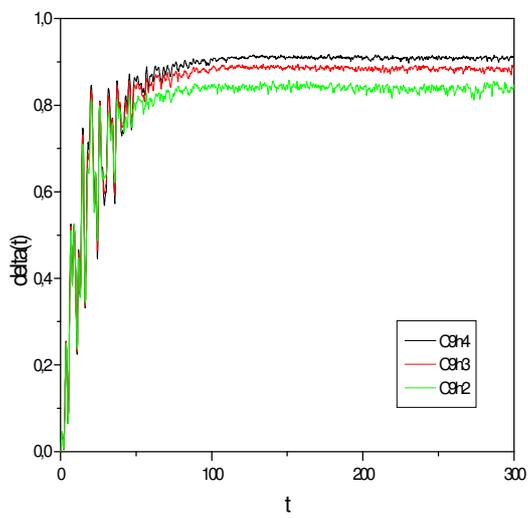
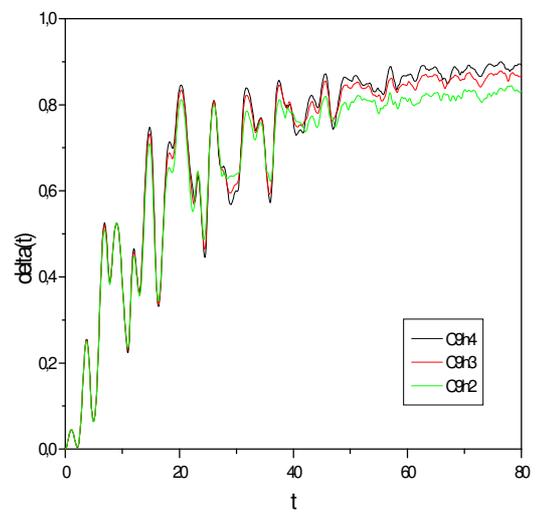


Figura 4.5d



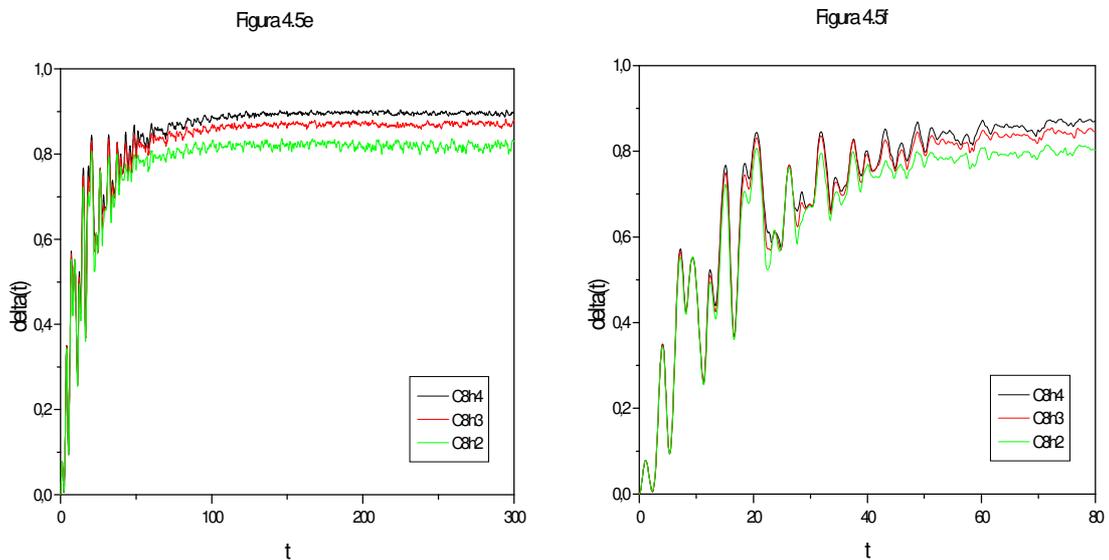


Figura 4.5 – Comparação de $\delta(t)$ para diferentes valores de \hbar ($h_2=0.005656855$, $h_3=0.003771232$ e $h_4=0.002828427$) e para diferentes c.i.s caóticas: C10 em 4.5a e b, C9 em 4.5c e d e C8 em 4.5e e f.

Através de regressões lineares nas regiões do patamar, obtemos o valor médio deste para cada c.i. associada. Na figura 4.6, mostramos estes valores em função de \hbar .

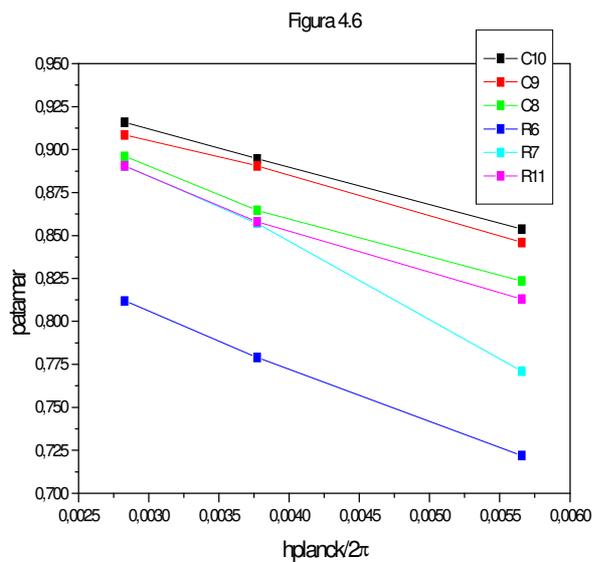


Figura 4.6 – Variação do patamar obtido via regressão linear das figuras 4.4 e 4.5.

Realizando regressões lineares para os conjuntos de pontos da figura 4.6, obtivemos os seguintes coeficientes angulares para cada c.i.:

c.i.	C10	C9	C8	R6	R7	R11
Coef.Ang.	-21.9 ± 0.3	-22 ± 1	-25 ± 3	-32 ± 1	-43 ± 2	-27 ± 3

Percebe-se que os patamares dos $\delta(t)$ associados às c.i. regulares cresceram mais com a diminuição de \hbar do que os associados às caóticas.

Nas figuras 4.7, 4.8 e 4.9, tem-se o comportamento das derivadas de $\delta(t)$ para cada uma das c.i. associadas para \hbar diferentes. Em cada gráfico, fazemos sempre a comparação entre a derivada de $\delta(t)$ associada a uma c.i. caótica e uma regular. Nota-se em todas as curvas oscilações devido a oscilações do próprio $\delta(t)$ e, na medida que o tempo passa, oscilações em torno de zero, correspondente ao fato de $\delta(t)$ tender a um patamar. O fato de os $\delta(t)$ associados às c.i.s caóticas crescerem mais rápido do que os associados às c.i.s regulares, na derivada, manifesta-se no comportamento da envoltória dos picos positivos. A envoltória associada às c.i.s caóticas, em geral, possui um pico mais pronunciado e mais alto do que o da envoltória associada às c.i.s regulares. Além disso, o pico da envoltória associado às caóticas ocorre antes do das regulares.

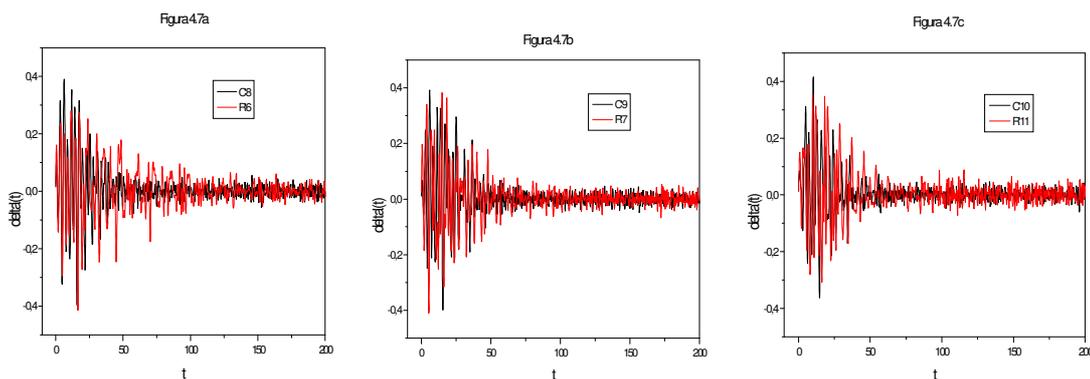


Figura 4.7 – Derivadas de $\delta(t)$ associados às c.i.s de $E=0.06$ para $\hbar = 0.005656855$.

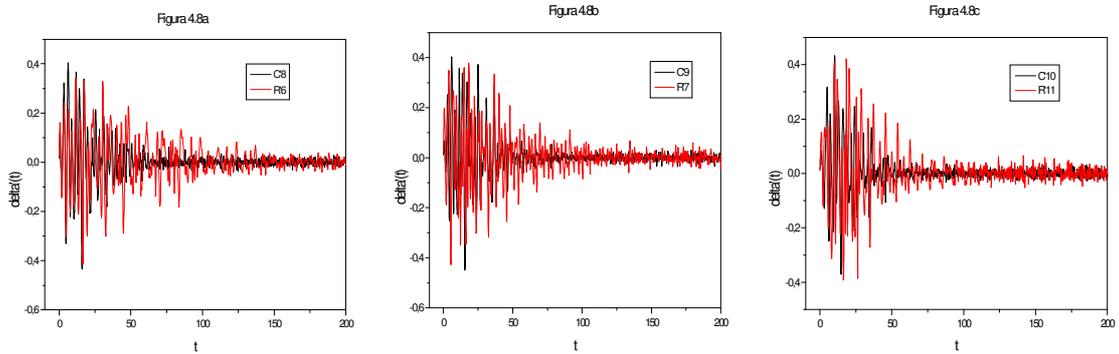


Figura 4.8 – Derivadas de $\delta(t)$ associados às c.i.s de $E=0.06$ para $\hbar = 0.003771232$.

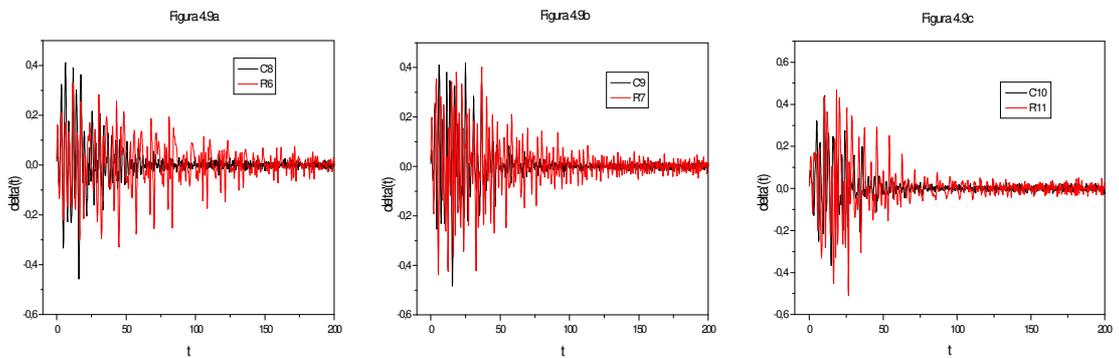


Figura 4.9 – Derivadas de $\delta(t)$ associados às c.i.s de $E=0.06$ para $\hbar = 0.002828427$.

Apresentamos nas figuras 4.10 e 4.11, a comparação das derivadas de $\delta(t)$, para diferentes valores de \hbar , associado a uma mesma c.i.. Assim como os respectivos $\delta(t)$, as derivadas também coincidem em tempos curtos. Nota-se também, que a altura dos picos positivos diminui um pouco quando \hbar aumenta, mostrando sua influência no crescimento de $\delta(t)$.

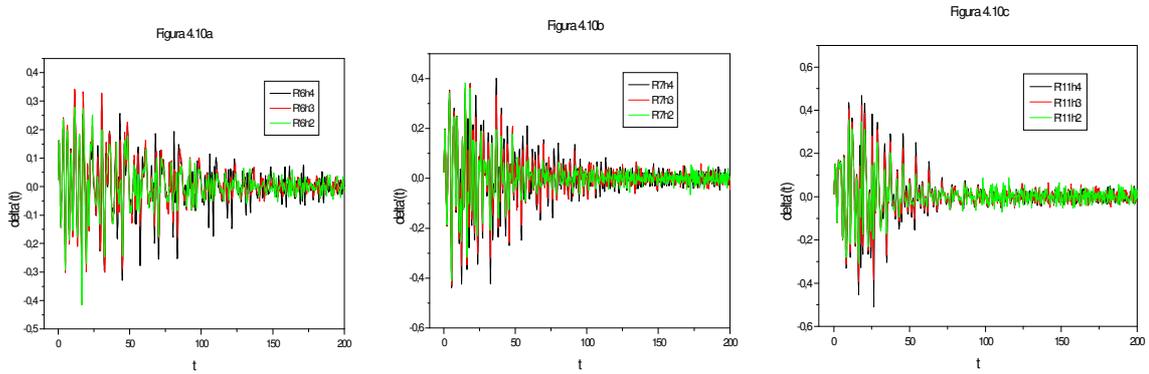


Figura 4.10 – Derivadas de $\delta(t)$ para as c.i.s regulares R6 (4.10a), R7 (4.10b) e R11 (4.10c) para os seguintes valores de \hbar : $\hbar_2=0.005656855$, $\hbar_3=0.003771232$ e $\hbar_4=0.002828427$.

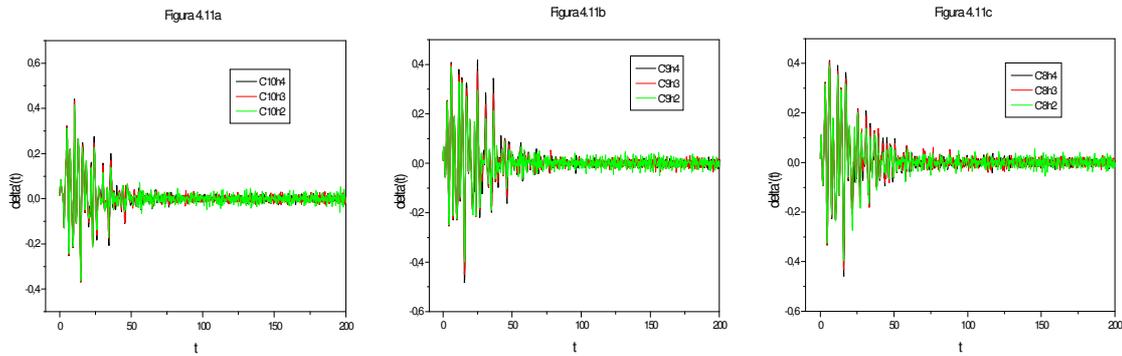


Figura 4.11 – Derivadas de $\delta(t)$ para as c.i.s caóticas C10 (4.11a), C9 (4.11b) e C8 (4.11c) para os seguintes valores de \hbar : $\hbar_2=0.005656855$, $\hbar_3=0.003771232$ e $\hbar_4=0.002828427$.

4.3 Distribuições de Husimi.

Apresentaremos aqui distribuições Husimi como (3.19) calculadas a partir de estados como (3.10) construídos como sugerido em 3.2 com $\hbar = 0.003771232$. Na evolução de $\delta(t)$ associado à c.i. R6, observamos na figura 4.12 padrões de oscilação bem definidos e um patamar bem menor que os associados às c.i.s caóticas. Seleccionamos instantes em um período de oscilação para observar, nestes instantes, o comportamento de $Q_2(q_2, p_2, t)$ associada a essa c.i.. Em $t_0=0.0$, o estado inicial é o produto de estados coerentes e $\delta(t_0)=0$; em $t_1=46.0$, $t_2=49.5$ e $t_3=58.5$, nota-se uma oscilação no emaranhamento ($\delta(t_1) \cong 0.22$, $\delta(t_2) \cong 0.67$ e $\delta(t_3) \cong 0.41$) e em $t_4=300.0$ alcança o máximo de emaranhamento ($\delta(t_4) \cong 0.72$) para a c.i. R6.

Figura 4.12

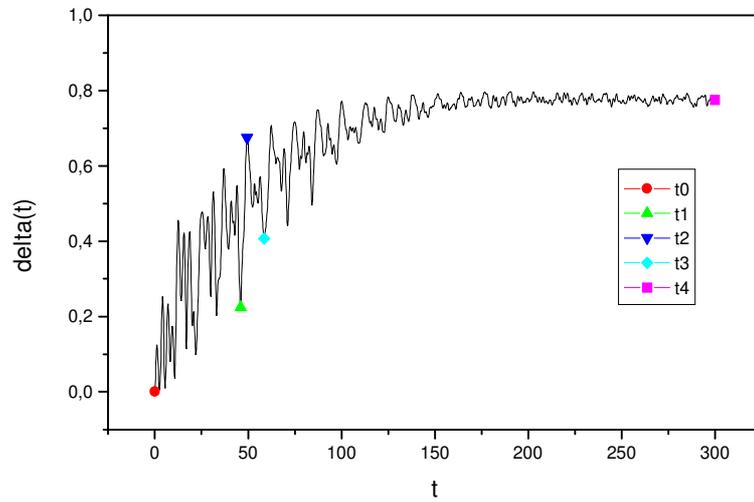
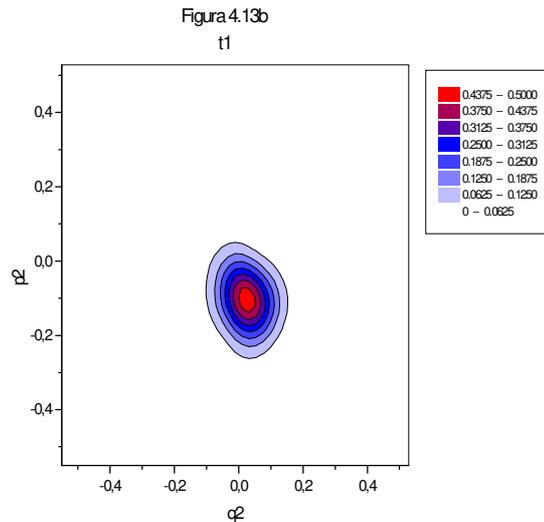
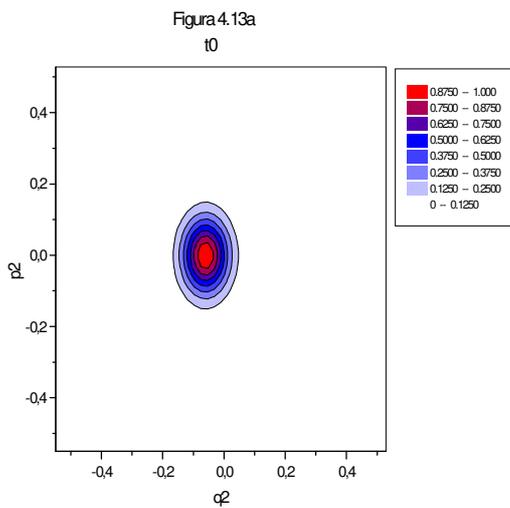


Figura 4.12 - $\delta(t)$ associado à c.i. R6 para $\hbar = 0.003771232$: $t_0=0.0$, $t_1=46.0$, $t_2=49.5$, $t_3=58.5$ e $t_4=300.0$.

Na figura 4.13, vemos as curvas de nível das distribuições de Husimi associadas. Em t_0 , temos a representação do estado inicial centrado na c.i. R6. Em t_1 , percebe-se que o pacote já se espalhou um pouco pelo espaço de fase e sua altura caiu pela metade. Em t_2 , vemos que o pacote se espalha ainda mais para em t_3 retomar uma configuração parecida com a de t_1 . Em t_4 , nota-se o pacote muito mais espalhado no espaço de fase.



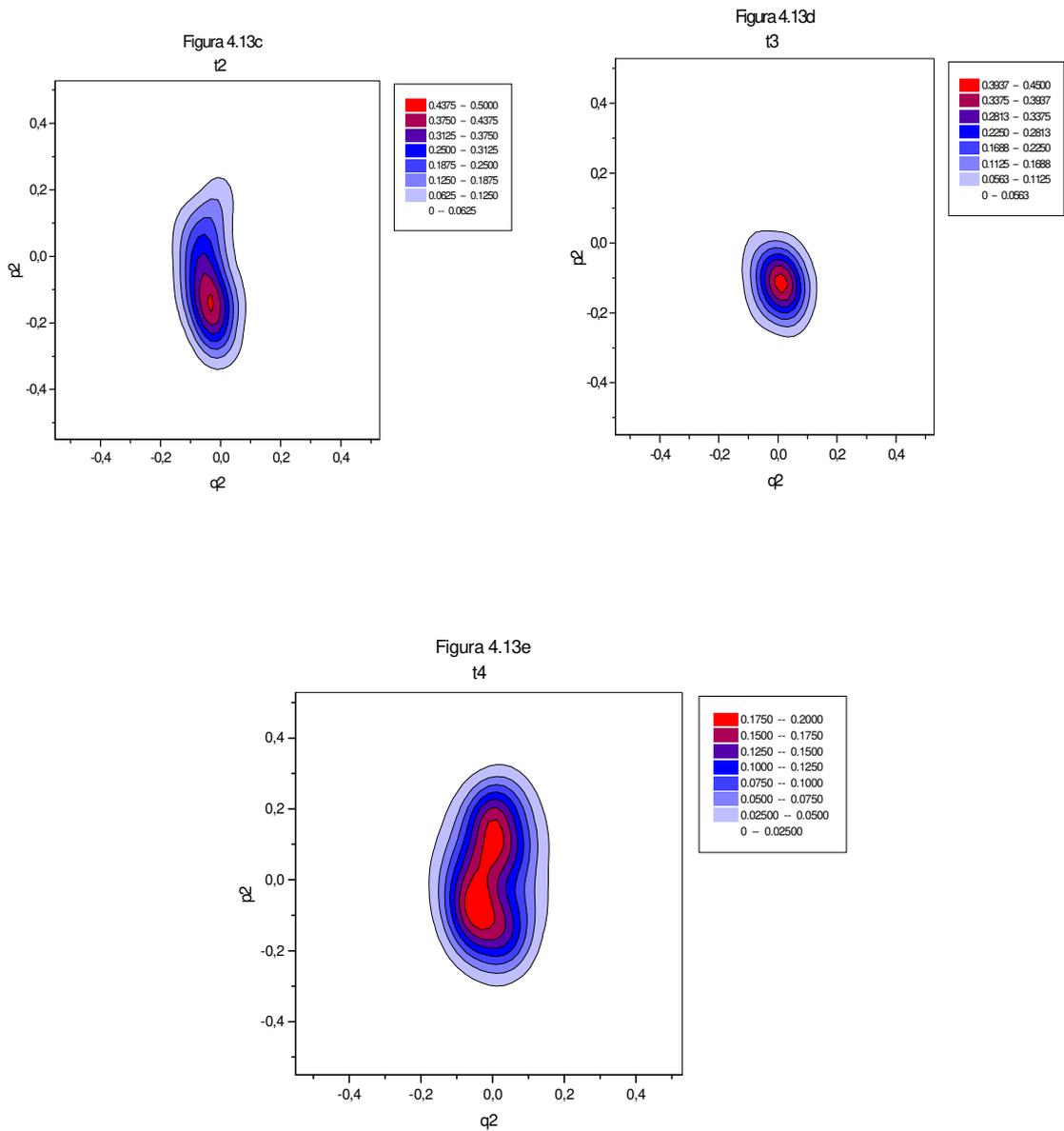


Figura 4.13 – Distribuições de Husimi associadas à c.i. R6 ($E=0.06$) para $\hbar = 0.003771232$ em $t_0=0.0$ (4.13a), $t_1=46.0$ (4.13b), $t_2=49.5$ (4.13c), $t_3=58.5$ (4.13d) e $t_4=300.0$ (4.13e).

A partir da figura 4.14, selecionamos instantes para calcular $Q_2(q_2, p_2, t)$ associada a c.i. C10. Da mesma maneira que para R6, o estado em $t_0=0.0$ é o produto de estados coerentes ($\delta(t_0)=0.0$), porém, centrado em C10. Em $t_1=12.0$, $t_2=38.5$ e $t_3=300.0$, o

emaranhamento aumenta ($\delta(t_1) \cong 0.46$, $\delta(t_2) \cong 0.83$ e $\delta(t_3) \cong 0.89$) até o máximo para c.i. C10.

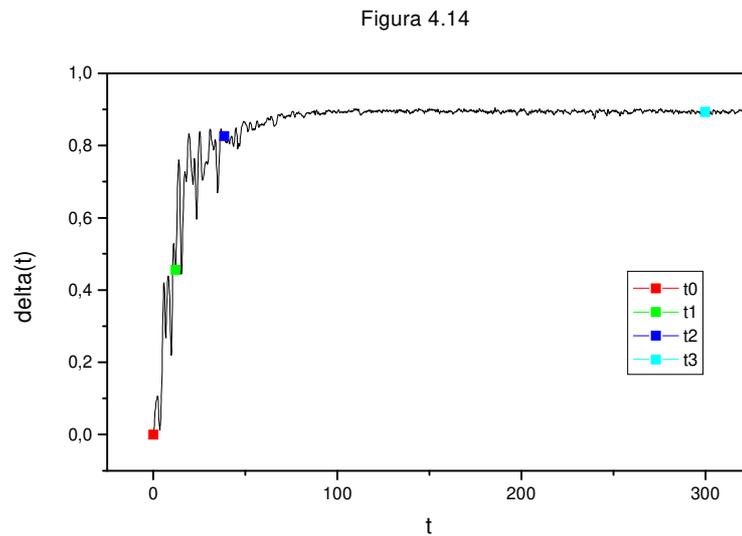


Figura 4.14 - $\delta(t)$ associado à c.i. C10 para $\hbar = 0.003771232$: $t_0=0.0$, $t_1=12.0$, $t_2=38.5$ e $t_3=300.0$.

Na figura 4.15, vemos as curvas de nível de $Q_2(q_2, p_2, t)$ para os respectivos instantes. A partir do estado coerente em t_0 centrado na c.i. C10 vemos, nos instantes sucessivos, o pacote se espalhar pelo espaço de fase na medida que o emaranhamento cresce, assim como para a c.i. R6. Percebe-se, porém, que em $t = 300.0$, a distribuição de Husimi correspondente a c.i. C10 está muito mais espalhada do que a que corresponde a R6.

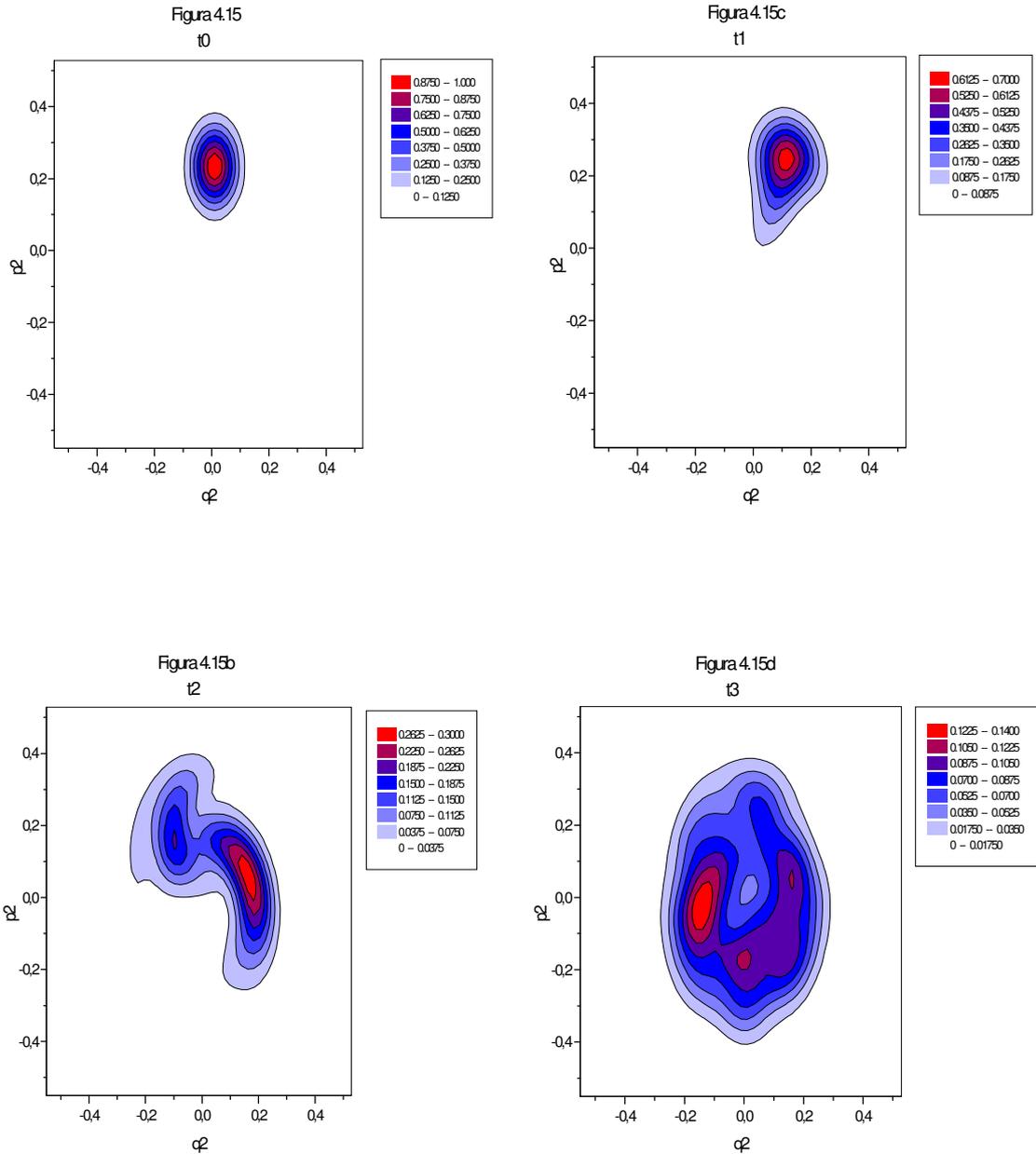


Figura 4.15 – Distribuições de Husimi associadas à c.i. C10 ($E=0.06$) para $\hbar = 0.003771232$ em $t_0=0.0$ (4.15a), $t_1=12.0$ (4.15b), $t_2=38.5$ (4.15c) e $t_3=300.0$ (4.15d).

Nas figuras 4.16, estão as curvas de nível de $Q_2(q_2, p_2, t)$ associadas às c.i.s R7, R11, C9 e C8, calculadas todas em $t = 300.0$, ou seja, no patamar dos respectivos $\delta(t)$ onde o emaranhamento é máximo. Para se ter uma idéia do quão espalhadas estão as $Q_2(q_2, p_2, t)$ no espaço de fase, é preciso comparar com a figura 4.1, para a qual $p_{2m\acute{a}x} \cong 0.35$ e $q_{2m\acute{a}x} \cong 0.24$

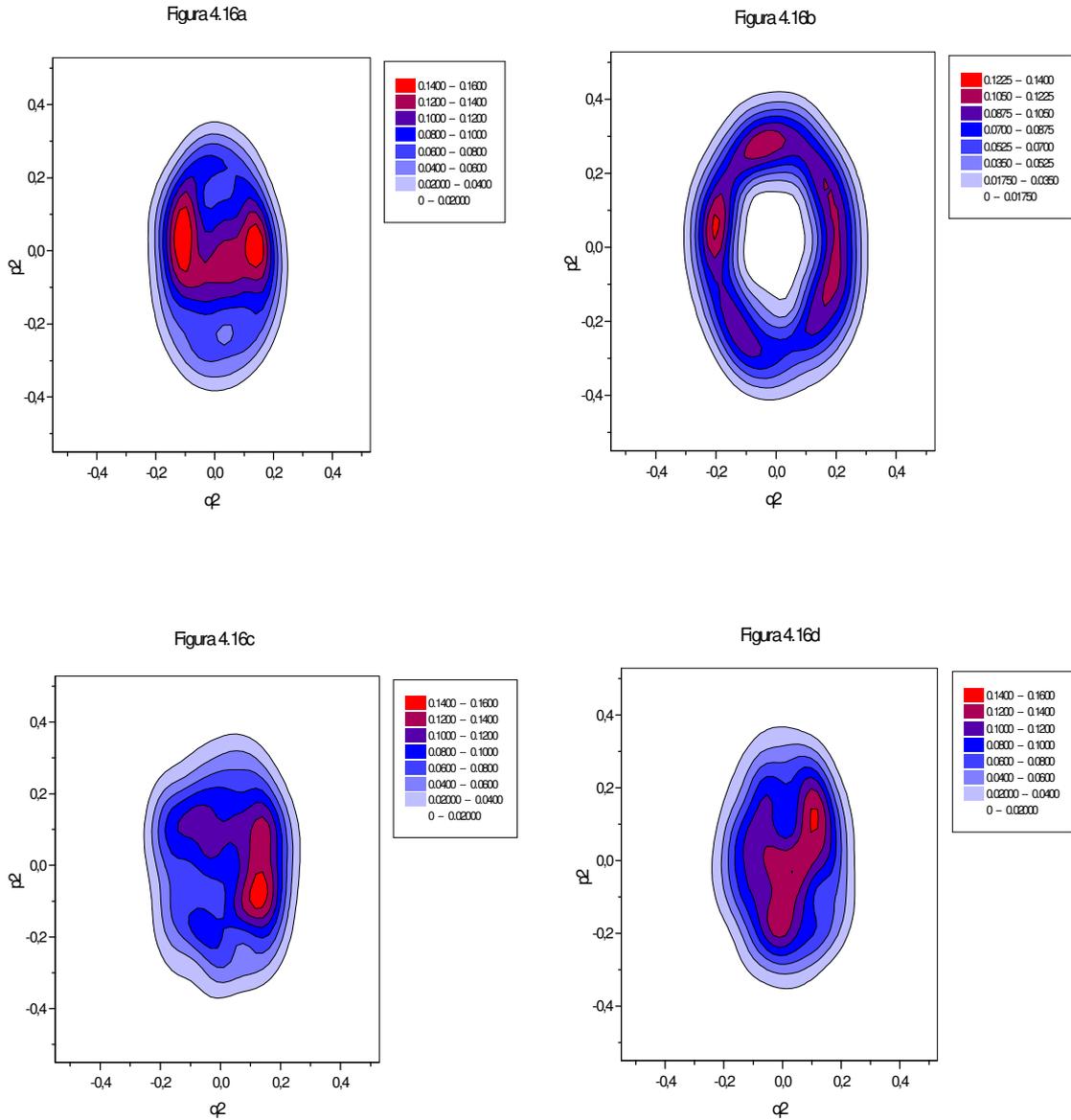


Figura 4.16 – Distribuições de Husimi em $t=300.0$ associadas às c.i.s R7 (4.16a), R11 (4.16b), C9 (4.16c) e C8 (4.16d) para $\hbar = 0.003771232$.

4.4 Populações e Coerências de ρ_2 .

Apresentaremos nesta seção a evolução temporal de algumas populações e coerências do operador densidade reduzido ρ_2 associado às c.i.s escolhidas. Na figura 4.17 temos algumas populações para as c.i.s C10 e C9, ambas caóticas. Percebe-se que as populações 11 e 14 são as menos ocupadas o que é razoável, pois, 11 corresponde a $|\alpha_2|^2$

do ponto $(q_1=0, p_1=0, q_2=0, p_{2m\acute{a}x} = (2mE)^{\frac{1}{2}})$, ou seja, a c.i. mais externa no espaço de fase (q_2, p_2) . Como a população 14 está além disso, percebemos que o pacote quântico respeita o fato de que, classicamente, o estado físico não pode sair da superfície de energia em que inicialmente foi colocado. As outras populações, mais ocupadas que 11 e 14, diminuem um pouco suas oscilações e, na medida que t cresce, agrupam-se entre os valores 0.125 e 0.062.

Figura 4.17a

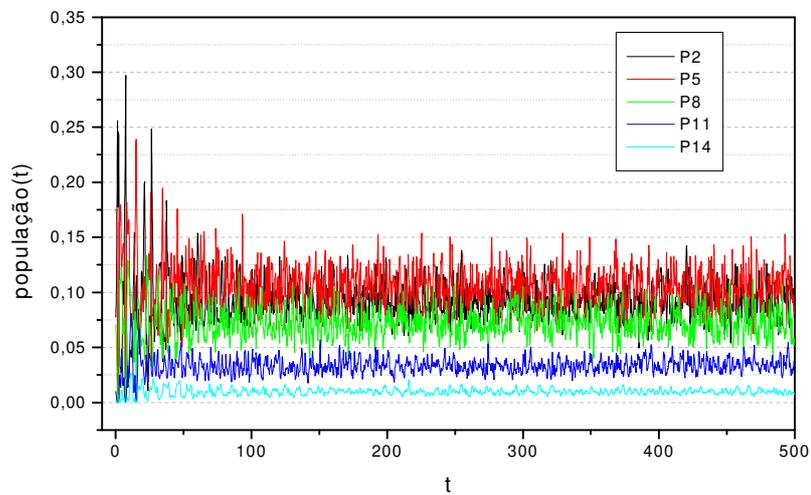


Figura 4.17b

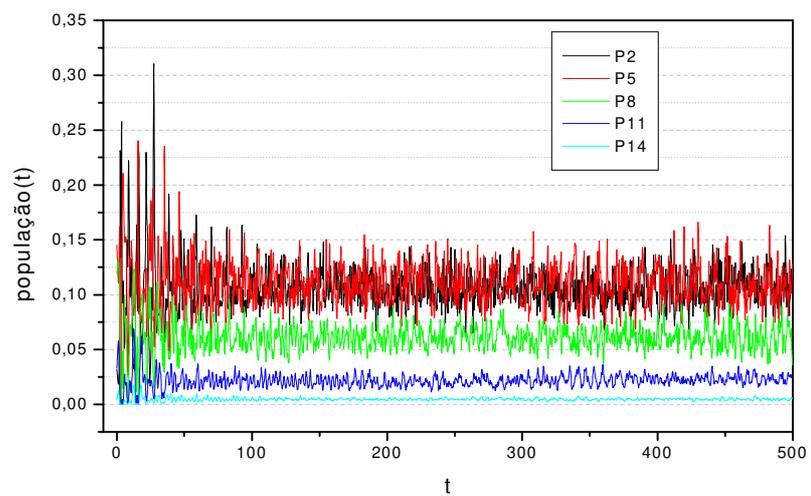


Figura 4.17 – Evolução temporal das populações 2, 5, 8, 11, e 14 do operador densidade reduzido ρ_2 associadas às c.i.s caóticas C10 (4.17a) e C9 (4.17b) para $\hbar = 0.003771232$.

Na figura 4.18, temos as mesmas populações para as c.i.s R6 e R7 que são regulares. Para ambas, as populações 11 e 14 são ainda menos ocupadas do que no caso anterior. Ao longo do tempo, percebe-se que as oscilações diminuem um pouco e em R7 há um agrupamento no comportamento das outras populações, porém, um pouco menor que em C10 e C9. Observa-se um comportamento bem distinto para as populações associadas à c.i. R6, onde, para as populações mostradas, não há tendência de agrupamento.

Figura 4.18a

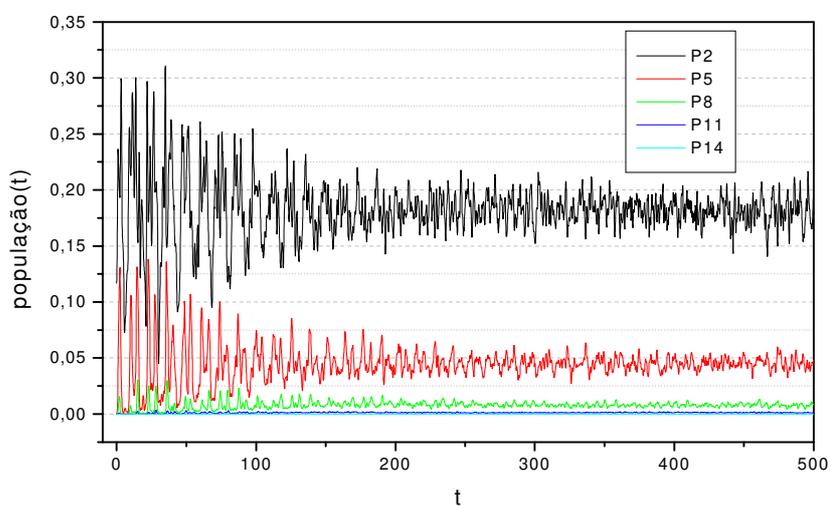


Figura 4.18b

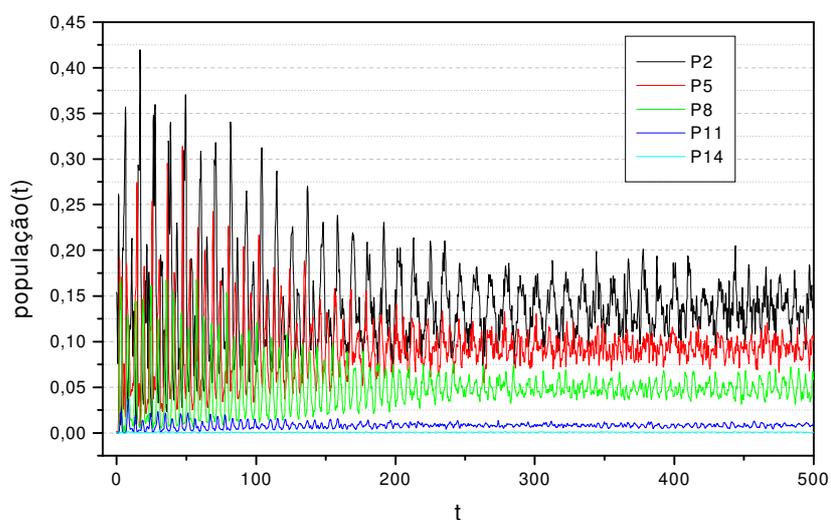


Figura 4.18 – Evolução temporal das populações 2, 5, 8, 11, e 14 do operador densidade reduzido ρ_2 associadas às c.i.s regulares R6 (4.18a) e R7 (4.18b) para $\hbar = 0.003771232$.

Na figura 4.19, temos as mesmas populações da figuras 4.18 numa escala de tempo menor. Nota-se uma estrutura periódica para ambos os casos, sendo mais definida e duradoura para a c.i. R7. Na figura 4.20, temos os comportamentos das populações associadas às c.i.s C8 (caótica) e R11 (regular) análogos aos discutidos anteriormente.

Figura 4.19a

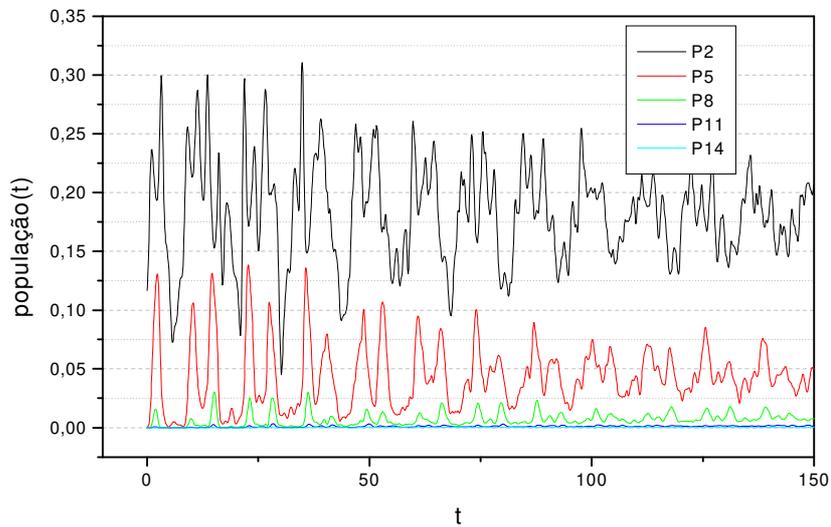


Figura 4.19b

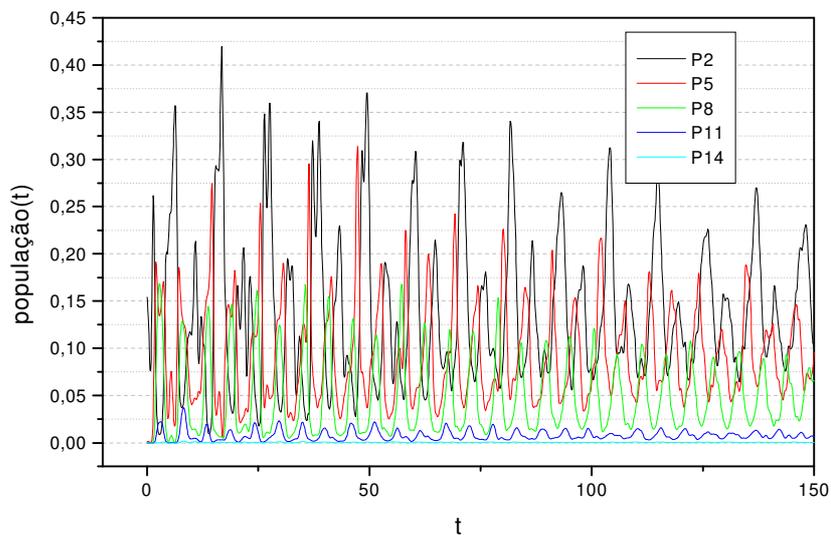


Figura 4.19 – Evolução temporal das populações 2, 5, 8, 11, e 14 do operador densidade reduzido ρ_2 associadas às c.i. regulares R6 (4.19a) e R7 (4.19b) para $t_{\text{máx}}=150.0$ para $\hbar = 0.003771232$

Figura 4.20a

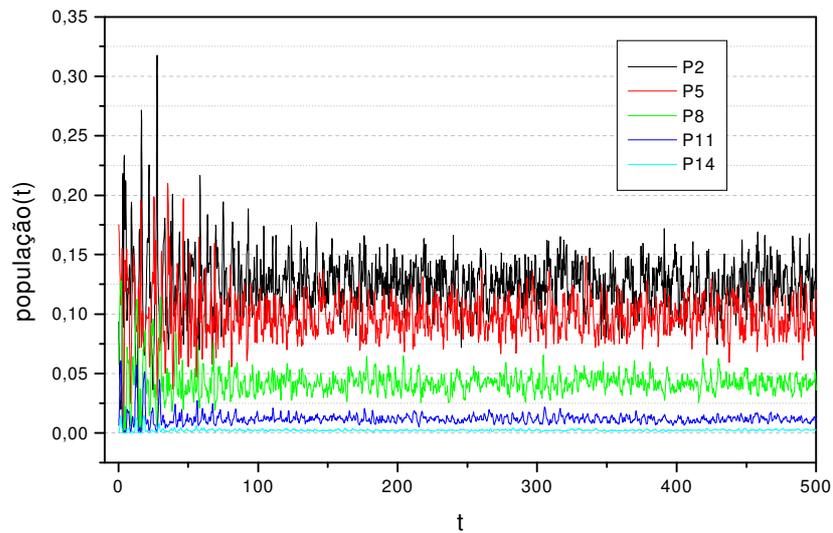


Figura 4.20b

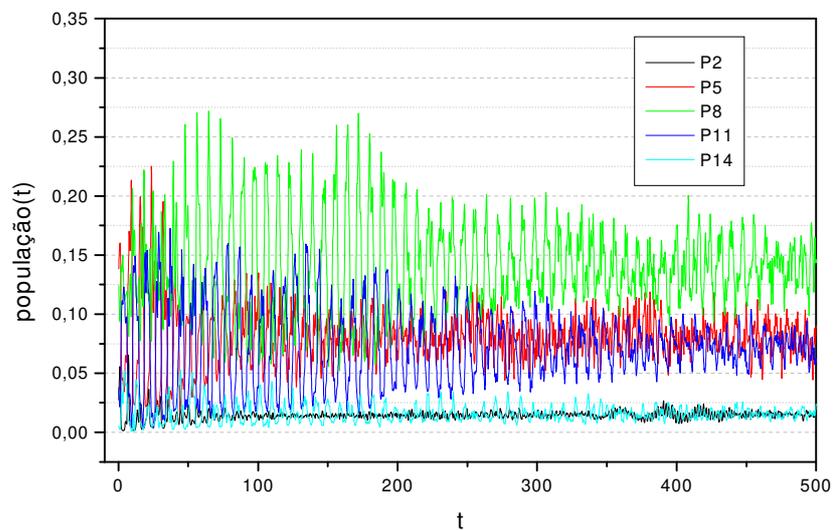


Figura 4.20 – Evolução temporal das populações 2, 5, 8, 11, e 14 do operador densidade reduzido ρ_2 associadas às c.i.s C8 (caótica) (4.17a) e R11 (regular) (4.17b) para $\hbar = 0.003771232$.

Com a mesma energia $E = 0.06$, calculamos as mesmas populações associadas à c.i. C10, porém, com $\hbar = 0.002828427$. Neste caso, como foi discutido em 4.1, o $|\alpha_2|^2$ máximo não é mais 11 mas 15. Portanto, as populações calculadas são todas acessíveis no sentido que foi colocado no início desta seção. Em outras palavras, todos os $|\alpha_2|^2$ possíveis, calculados de qualquer ponto (q_1, p_1, q_2, p_2) da superfície de energia $E = 0.06$, com $\hbar = 0.002828427$, serão menores ou iguais a 15. Na figura 4.21, temos o comportamento das populações. Nota-se que também há um agrupamento das populações mas entre valores menores do que para o caso $\hbar = 0.003771232$.

Figura 4.21

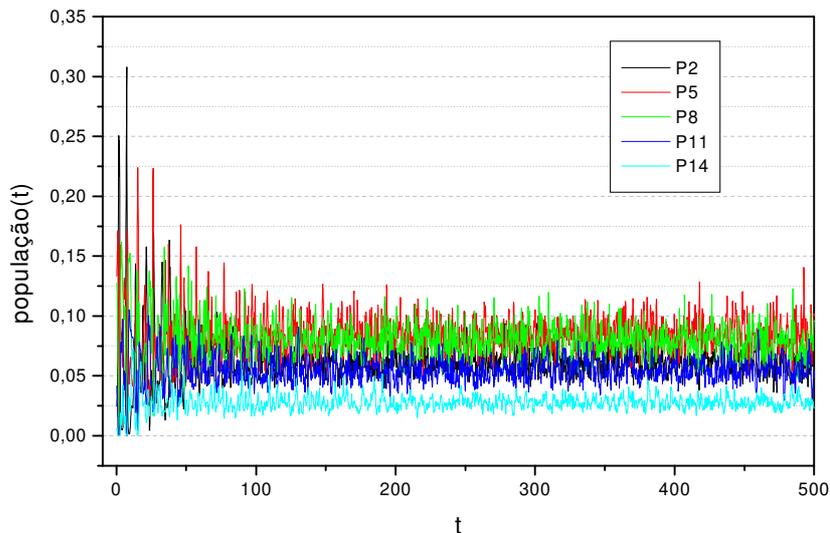


Figura 4.21 – Evolução temporal das populações 2, 5, 8, 11, e 14 do operador densidade reduzido ρ_2 associadas à c.i. ($E=0.06$) caótica C10 para $\hbar = 0.002828427$.

Na figura 4.22, apresentamos os módulos de algumas coerências de ρ_2 para as c.i.s R6 e C10 com $\hbar = 0.003771232$. Percebe-se o decréscimo das coerências ao longo do tempo sendo mais lento para R6. Para tempos correspondentes ao alcance do patamar em $\delta(t)$, vemos que as coerências tendem a zero tanto para R6 quanto para C10, indicando que o estado inicial para o subsistema 2 se transformou em uma mistura estatística.

Figura 4.22a

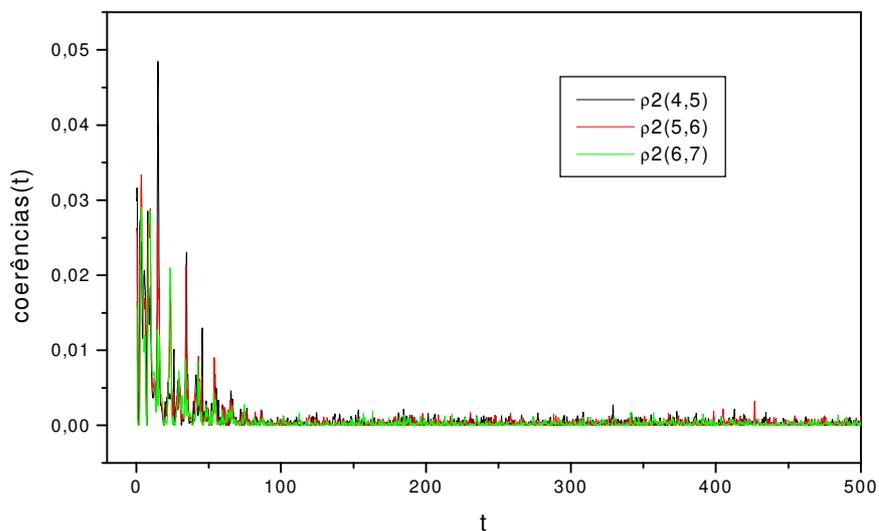


Figura 4.22b

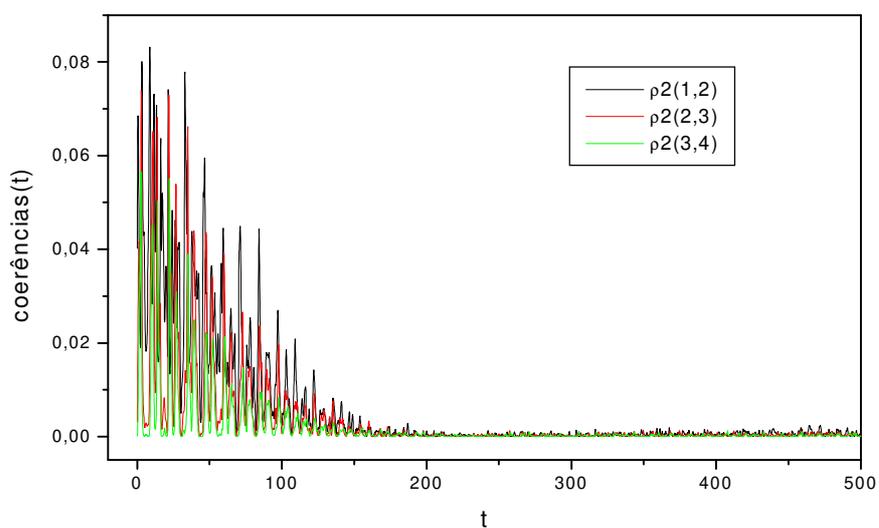


Figura 4.22 – Evolução temporal do módulo de algumas coerências associadas às c.i.s C10 (4.22a) e R6 (4.22b) para $\hbar = 0.003771232$.

A seguir, na figura 4.23, apresentamos as mesmas evoluções temporais da figura 4.22, porém, em tempos curtos.

Figura 4.23a

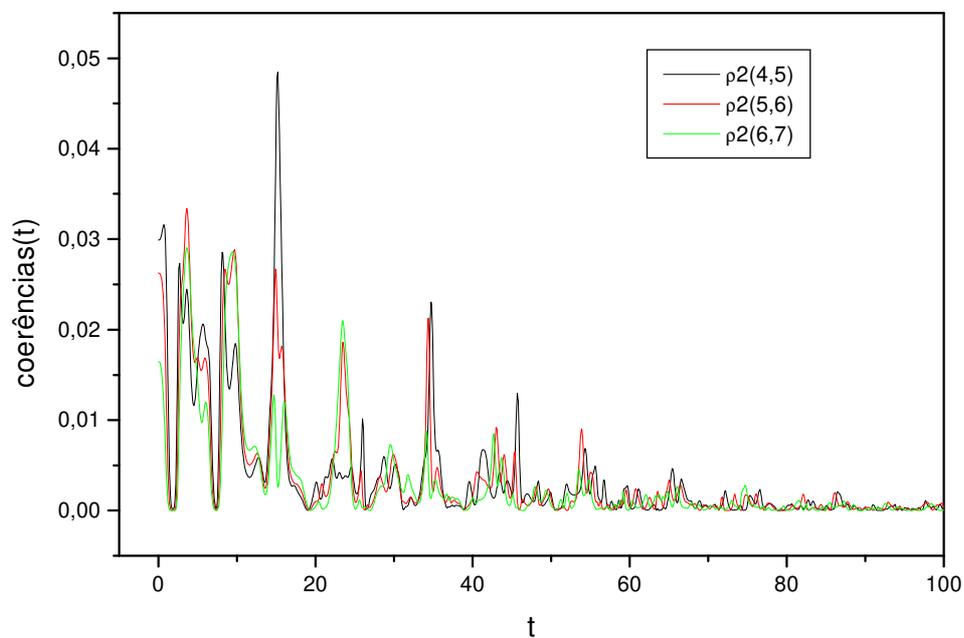


Figura 4.23b

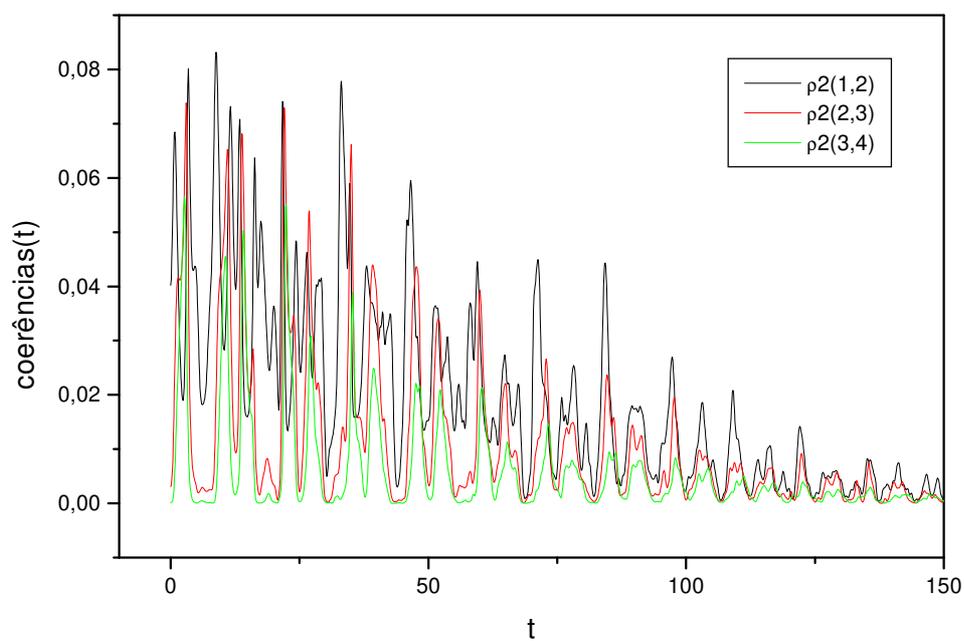


Figura 4.23 – Evolução temporal do módulo de algumas coerências associadas às c.i.s C10 (4.23a) e R6 (4.23b) para $\hbar = 0.003771232$.

4.5 Discussão dos Resultados Numéricos.

Iniciaremos por comentar os resultados mais simples. No comportamento das populações, percebe-se que o pacote não ocupa níveis maiores que $|\alpha_2|_{máx}^2$ nos casos associados às c.i. regulares e ocupa muito pouco nos casos associados às c.i.s caóticas, mostrando inclusive uma tendência de decréscimo à medida que nos afastamos de $|\alpha_2|_{máx}^2$ no sentido de níveis cada vez maiores. Este fato nos mostra que a correspondência feita através dos estados coerentes com o espaço de fase clássico é muito boa já que classicamente os pontos acessíveis do espaço de fase só geram $|\alpha_2|^2$ menores ou iguais a $|\alpha_2|_{máx}^2$. Através do cálculo das distribuições de Husimi foi possível associar, respectivamente, ao aumento e diminuição de $\delta(t)$, o alargamento e a reconstituição do pacote.

Nos $\delta(t)$, em tempos curtos, e nas derivadas de $\delta(t)$, foi possível notar que aqueles $\delta(t)$ associados às c.i.s caóticas crescem mais rápido do que os associados às c.i.s regulares. Podemos tentar entender este fato semiclassicamente da seguinte forma[23]: as principais contribuições na evolução do pacote quântico vêm das vizinhanças da c.i. onde foi centrado que, no caso regular, corresponde a trajetórias pertencentes a tóros que evoluem de maneira bem comportada e numa região limitada do espaço de fase, tendo como consequência a ocupação de um número limitado de estados; no caso caótico, a vizinhança é composta por trajetórias caóticas que podem ocupar toda a região do espaço de fase onde há caos, tendo como consequência a ocupação de muitos estados o que nos leva a conjecturar que isso provocaria um emaranhamento mais rápido entre os dois subsistemas.

As distribuições de Husimi calculadas concordam com esse argumento. Vemos nas figuras 4.13e, 4.15d e 4.16, calculadas todas no mesmo instante, que para a c.i. R6 temos um pacote menos esparramado em comparação com as c.i.s caóticas. Porém, isso não acontece com as também regulares R7 e R11. Essa diferença entre a c.i. R6 e as outras regulares é possível que se deva ao fato de, usando o mesmo argumento anterior, os tóros vizinhos a R7 e R11 serem achatados e alongados (ao contrário dos vizinhos a R6) permitindo acesso a mais regiões do espaço de fase.

Para as populações associadas às c.i.s caóticas, acreditamos que, para tempos longos, há uma tendência de um agrupamento em torno do valor $(|\alpha_2|_{máx}^2 + 1)^{-1}$ que é aproximadamente 0.083 para $\hbar = 0.003771232$ e 0.062 para $\hbar = 0.002828427$, valores que podem ser verificados nas figuras 4.17, 4.20a e 4.21. Isto estaria relacionado com o fato de, nessa escala de tempo, o pacote quântico, que já é uma mistura estatística como mostra a figura 4.22, tenderia a ocupar igualmente os estados que lhe são acessíveis, pois, classicamente, uma trajetória caótica visita igualmente todas as regiões do espaço de fase que lhe são acessíveis. Nas populações associadas às c.i.s regulares, apesar de haver um certo agrupamento a tempos longos para as c.i.s R7 e R11, isto parece não acontecer da maneira como ocorre nas caóticas. Como dito anteriormente, os comportamentos das populações associadas às c.i.s R7 e R11 seriam distintos das associadas à c.i. R6 devido a forma e extensão de seus tóros vizinhos que permitiriam, no caso de R7 e R11, acesso a mais regiões do espaço de fase, ou seja, do ponto de vista do análogo quântico, acesso a mais estados. Isto explica também o porque de um patamar mais alto para os $\delta(t)$ associados às c.i.s R7 e R11 em relação a c.i. R6.

O fato de, na medida que \hbar diminui, os patamares associados às c.i.s regulares crescerem mais do que os associados às caóticas, acreditamos que se deva ao adensamento do espectro, devido ao argumento anterior de que os pacotes quânticos associados à c.i.s regulares ocupam somente alguns dos estados possíveis. O adensamento faz com que haja um número maior de estados acessíveis associados aos tóros vizinhos de uma c.i. regular, permitindo que o pacote associado a ela ocupe mais estados. Como as principais contribuições desse pacote ficam restritas a esta vizinhança, ao contrário do pacote associado às c.i.s caóticas, ele seria mais sensível a um aumento do número de estados que podem ser ocupados, levando a um maior aumento do patamar.

Conclusões

Pudemos concluir que, no regime escolhido ($E = 0.06$ e $0.003 < \hbar < 0.006$), é possível associar comportamentos distintos para a entropia linear associada às c.i.s regulares e caóticas através das seguintes características: taxa de crescimento de $\delta(t)$ maior para as c.i.s caóticas do que para as regulares e maior intensidade do emaranhamento (no sentido de envolver mais estados) para as c.i.s caóticas do que para as regulares. Isso foi possível de se confirmar através dos cálculos das distribuições de Husimi, das populações e coerências do operador densidade reduzido $\rho_2(t)$.

Além disso, a vizinhança da c.i. no espaço de fase também influi nas características citadas acima. As diferenças de comportamento entre as c.i.s R6 e R(7 e 8) exemplificam esta afirmação. Enquanto que para os casos caóticos, os padrões de comportamento para a entropia linear, populações e distribuições de Husimi foram muito semelhantes, diferindo um pouco nos valores do patamar alcançado, para os casos regulares isso não ocorreu. No caso de $\delta(t)$, as c.i.s R7 e R8 chegam a alcançar os valores dos patamares dos casos caóticos, a contrário de R6. As populações ocupadas e os padrões de oscilação destas também são bem distintos entre os três casos.

Mesmo para uma pequena faixa de variação de \hbar foi possível notar sua influência no patamar de $\delta(t)$. Concluiu-se que quanto menor \hbar , maior o valor do patamar alcançado (diminuir \hbar adensa o espectro e aumenta o número de estados acessíveis); e na taxa de emaranhamento quanto maior \hbar , mais rápido o emaranhamento (para valores maiores de \hbar , o pacote quântico é mais largo e portanto ocupa a área total permitida na superfície de energia mais rápido).

Desta forma, constatamos neste modelo de dois osciladores harmônicos com acoplamento não-linear a validade da conjectura de Zurek e Paz: de que regimes classicamente caóticos estão associados a um emaranhamento rápido a nível semiclássico.

Porém, algumas questões interessantes ficaram em aberto. Uma delas sobre a relação entre os tempos característicos do sistema. As frequências ω_1 e ω_2 produzem períodos $T_1 \approx 20$ e $T_2 \approx 4$ respectivamente enquanto que os tempos para alcançar o

patamar de $\delta(t)$ ficaram entre 60 e 100 para os casos caóticos e 150 e 300 para os casos regulares. Os termos *tempos curtos* e *tempos longos*, usados na análise dos resultados, referem-se à escala de tempo em que se pode observar o crescimento e o alcance do patamar de $\delta(t)$, respectivamente, e não foram usados com a intenção de os relacionar com os períodos das órbitas correspondentes ou períodos característicos como T_1 e T_2 . No entanto, como foi dito, relacionar as oscilações de $\delta(t)$, por exemplo, nos casos regulares com períodos de trajetórias ou com algum outro tipo de oscilação característica do sistema clássico é uma questão interessante e complementar à análise semiclássica.

Referências.

- [1] *Chaotic Behavior in Deterministic Systems*, Proceedings of the Les Houches Summer School, Session XXXVI, edited by G. Ioos, R.H.G. Hellman, and R. Stora (North-Holland, Amsterdam, 1983).
- [2] M. Berry, *Quantum Chaology*, Proc. R. Soc. London, **A 413**, 183 (1987).
- [3] M.C.Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [4] M.Baranger e K.T.R.Davies, *Periodic Trajectories for a Two-dimensional Non-integrable Hamiltonian*, Ann. Phys. **177**, 330 (1987).
- [5] U.Fano, *Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques*, Rev. Mod. Phys. **29**, 74 (1957).
- [6] W.H. Zurek e J.P. Paz, *Quantum chaos: a decoherent definition*, Physica **D 83**, 300 (1995).
- [7] K. Furuya, M.C. Nemes e G.Q. Pellegrino, *Quantum Dynamical Manifestation of Chaotic Behavior in the Process or Entanglement*, Phys. Rev. Lett. **80**, 5524 (1998).
- [8] V.I. Arnold, *Métodos Matemáticos da Mecânica Clássica*, (Mir, 1988).
- [9] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, (Adisson-Wesley, 1980).
- [10] F.C.Pereira, *Dissipação de Energia via Acoplamento Caótico: Efeitos Quânticos*, Dissertação de Mestrado, IFGW/UNICAMP (1999).
- [11] A.M. Ozório de Almeida, *Sistemas Hamiltonianos: Caos e Quantização*, (Ed. UNICAMP, 1987).
- [12] P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, (Oxford, 1998).
- [13] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Vol. I, Cap. II-Compl. F_{II}, (John Wiley & Sons, 1977).
- [14] W.H.Zurek, S.Habib e J.P.Paz, Phys. Rev. Lett. **70**, 1187 (1993).
- [15] Ji Il Kim, M.C.Nemes, A.F.R. de Toledo Piza e H.E.Borges, *Perturbative Expansion for Coherence Loss*, Phys. Rev. Lett. **77**, 207 (1996).

- [16] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Vol. I, Cap. V-Compl. G_v, (John Wiley & Sons, 1977).
- [17] K.Husimi, Proc. Phys. Math. Soc. Jpn. **22**, 264 (1940).
- [18] K.Furuya, M.A.M. de Aguiar, C.H.Lewenkopf e M.C.Nemes, Ann. Phys. **216**, 313 (1992).
- [19] E.P. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
- [20] M.Hillery, R.F.O'Connell, M.O.Scully e E.P.Wigner, Phys. Rep. **106**, 121 (1984).
- [21] M.A.M. de Aguiar e A.M. Ozório de Almeida, J. Phys. A **23**, L1025 (1990).
- [22] M.Saraceno, Ann. Phys. (N.Y.) **199**, 37 (1990).
- [23] Argumento usando também em [7].
- [24] P.Kramer e M.Saraceno, *Lecture Notes in Physics*, Vol. 40, (Springer-Verlag, 1981).
- [25] M.T.Santos, *Cicatrizes de Órbitas Periódicas na Interação de Emparelhamento*, Dissertação de Mestrado, IF/USP (1992).
- [26] A.O.Caldeira e A.J.Leggett, Physica A **121**, 587 (1983); Phys. Rev. A **31**, 1057 (1985).
- [27] W.H.Zurek, *Decoherence and the Transition from Quantum to Classical*, Phys. Today **44**, 36 (1991).
- [28] C.H.Bennett, Phys. Today **48**, 24 (1995).
- [29] W.H.Louisell, *Quantum Statistical Properties of Radiation*, Wiley, (New York, 1973).

Apêndice A - Relação entre o Espectro Quântico e a Energia Clássica.

Como foi mostrado em 1.2, h_1 e h_2 definem as ações típicas do problema clássico pois contêm todas as constantes de acoplamento daquele regime. Pode-se notar que h_1 e h_2 não são independentes pois:

$$\frac{h_1}{h_2} = \frac{\omega_1}{\omega_2}. \quad (\text{A.1})$$

Vimos também que as constantes h_1 , h_2 e ω introduzidas na Hamiltoniana (1.26) representam o problema clássico já estudado (1.19) quando, num dado sistema de unidades:

$$\lambda = 1.0[\text{comprimento}]^{-1}, \quad \kappa = 1.0[\text{comprimento}]^{-1}, \quad k = 2.0[\text{comprimento}]^{-1} \\ m = 1.0[\text{massa}] \text{ e } \mu = 0.1$$

Com essa escolha, podemos conectar o problema quântico com o clássico já estudado. Porém, para conectarmos a energia quântica com a clássica, temos que definir o valor de \hbar nesse sistema de unidades. Faremos isso através da comparação de \hbar com h_1 e h_2 , ou seja, definimos que:

$$\frac{\hbar}{h_2} = c, \quad c \leq 1.0$$

Conseqüentemente definimos \hbar neste sistema de unidades pois h_2 está definido a partir da conexão com o problema clássico. Através de (A.1) temos:

$$\frac{\hbar}{h_1} = \frac{\hbar}{h_2} \frac{\omega_2}{\omega_1}$$

E assim todos os parâmetros do Hamiltoniano ficam bem definidos.

A conexão entre as energias fica :

$$H_{clás.} = \frac{\hbar\omega_1\omega_2}{\omega} E_n, \text{ onde } E_n \text{ é o autovalor de } \hat{H}.$$

Logo, dada a energia clássica $H_{clás.}$ e o valor de \hbar , podemos achar aproximadamente o nível de energia quântico correspondente.