Universidade Estadual de Campinas Instituto de Física Gleb Wataghin Departamento de Física da Matéria Condensada

Dissertação de Mestrado

Emaranhamento, Bifurcação e Caos no Modelo de Jahn-Teller $E \otimes \beta$

Domenique Velloso Netto

Orientadora: Prof. Dra. Kyoko Furuya

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida pela aluna Domenique Velloso Netto e aprovada pela Comissão Julgadora.

Profa, Dra, Kyoko Furuya

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

Netto, Domenique Velloso Emaranhamento, bifurcação e caos no modelo de Jahn-Teller E x beta / Domenique Velloso Netto. – Campinas, SP : [s.n.], 2009.	
Orientador: Kyoko Furuya. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".	
 Emaranhamento quântico. Teoria da bifurcação. Furuya, Kyoko. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". Título. (vsv/ifgw) 	
em inglês: Entanglement, bifurcation and chaos in the Jahn-Teller E x beta mov ras-chave em inglês (Keywords): uantum entanglement ifurcation theory de Concentração: Física Clássica e Física Quântica ; Mecânica e Campos	del
ição: Mestre em Física	
a examinadora: Kyoko Furuya Maria Carolina Nemes Peter Alexander Bleinroth Schulz	
	Netto, Domenique Velloso Emaranhamento, bifurcação e caos no modelo de Jahn-Teller E x beta / Domenique Velloso Netto. – Campinas, SP : [s.n.], 2009. Orientador: Kyoko Furuya. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin". 1. Emaranhamento quântico. 2. Teoria da bifurcação. I. Furuya, Kyoko. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título. (vsv/ifgw) em inglês: Entanglement, bifurcation and chaos in the Jahn-Teller E x beta mo ras-chave em inglês (Keywords): uantum entanglement ifurcation theory de Concentração: Física Clássica e Física Quântica ; Mecânica e Campos ição: Mestre em Física a examinadora: Kyoko Furuya Maria Carolina Nemes Peter Alexander Bleinroth Schulz

- Programa de Pós-Graduação em: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **DOMENIQUE VELLOSO NETTO – RA 991633** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 26 / 02 / 2009.

COMISSÃO JULGADORA:

Licolo Furnyon. Proto Pro Kucko Eurova

Profa. Dra. Kyoko Furuya Presidenta da Comissão Julgadora DFMC/IFGW/UNICAMP

m C. hemes Profa. Dra. Maria Carolina Nemes – DF/UFMG

3.50

Prof. Dr. Peter Alexander Bleinroth Schulz DFMC/IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer muito à Profa. Kyoko pela orientação nesse trabalho e, mais do que isso, pelo apoio, pelo carinho, pelo ânimo que ela sempre me deu, principalmente nos momentos em que nada parecia dar certo e pela paciência (!!!). Obrigada! Aprendi e cresci muito como profissional e como pessoa.

Agradeço também à Profa. Carolina e ao Prof. Peter pela discussão e pelas sugestões que contribuíram para enriquecer este trabalho.

Gostaria também de agradecer à minha família, por ter me possibilitado chegar até aqui e que, apesar de não ter acompanhado todo o processo desse trabalho tão de perto, sempre torceu pelo meu sucesso.

Quero agradacer também aos amigos de perto e de longe, pelo apoio e incentivo nos altos e baixos dessa estrada.

E agradecer a uma pessoa tão especial para mim, meu amado Edson, que acompanhou de perto tudo isso, sofreu e batalhou comigo para que esse trabalho pudesse ser concluído. Sem o seu apoio, certamente eu não teria chegado até aqui. Obrigada!

Resumo

Neste trabalho realizamos para o modelo de Jahn-Teller $E \otimes \beta$, que descreve a interação de um qubit com um modo de um oscilador, um estudo do emaranhamento e o relacionamos com a bifurcação do ponto fixo do análogo clássico do modelo. Estudamos também a incidência de caos e sua variação em função dos parâmetros do sistema. Confirmamos os indícios de que no limite massivo do oscilador $(m \rightarrow \infty)$ o emaranhamento do estado fundamental do sistema como função do seu parâmetro crítico apresenta uma mudança não suave no seu comportamento quando esse parâmetro atinge o valor crítico. Confirmamos também que para esse mesmo valor crítico o análogo clássico apresenta uma bifurcação de alguns de seus pontos fixos. Sobre a possível influência do caos no emaranhamento, pudemos observar que o aparecimento de região caótica substancial no modelo clássico ocorre quando o parâmetro crítico está nas vizinhanças do valor crítico. A análise da função de Husimi no estado fundamental nos permitiu estabelecer dois aspectos: (i) uma conexão entre a localização do máximo desta função e a localização dos pontos fixos no espaço de fase, comprovando a ocorrência da bifurcação no estado quântico nesta representação; (ii) verificar que de fato há uma aproximação do limite clássico do oscilador quando aumentamos o parâmetro do modelo associado à quebra de degenerescência das energias do sistema.

Abstract

In this work we realize a study of entanglement for the Jahn-Teller $E \otimes \beta$ model, wich describes the interaction of a qubit with an oscillator mode, and relate it with the bifurcation of the fixed point of the classical analogue of the model. We also study qualitatively the ocurrence of chaos and its variation as a function of the parameters of the system. We have confirmed the signs that in the massive limit of the oscillator $(m \to \infty)$ the entanglement of the fundamental state of the system presents a non-smooth change (as a function of its critical parameter) in its behavior as this parameter attains the critical value. We also confirm that at this same critical value the classical analogue presents a bifurcation of some of its fixed points. Concerning the possible influence of chaos on the entanglement, we have been able to see the appearance of a substantial chaotic region in the classical phase space when the critical parameter is in the vicinity of its critical value. The analysis of the Husimi function in the fundamental state allowed us to establish two things: (i) a connection between the localization of the maximum of this function and the localization of the fixed points in the phase space, confirming the occurrence of the bifurcation in the quantum state in this representation; (ii) verification that in fact the classical limit of the oscillator is approached when we increase the energy degeneracy breaking parameter of the system.

Conteúdo

1	Intr	odução	1
2	Con	ceitos Fundamentais	5
	2.1	Transição de Fase Quântica	5
	2.2	Emaranhamento	8
		2.2.1 O Operador Densidade	9
		2.2.2 Medidas de emaranhamento	14
	2.3	Estados coerentes de oscilador harmônico (OH) e de spin	14
	2.4	Mapa de Poincaré	17
		2.4.1 Bifurcação de ponto fixo	21
	2.5	Função de Husimi	23
3	O M	Iodelo de Jahn-Teller	27
	3.1	Introdução Histórica	27
	3.2	O Hamiltoniano de Jahn-Teller	32
	3.3	Emaranhamento no modelo de Jahn-Teller	36
	3.4	Análise do comportamento das energias do sistema	41
4	O A	nálogo Clássico do modelo de Jahn-Teller	47
	4.1	Hamiltoniano clássico e equações de movimento	47
		4.1.1 Dinâmica no caso integrável	49
		4.1.2 Dinâmica no caso não integrável	50
	4.2	Resultados numéricos e mapas de Poincaré	53
	4.3	Análise do análogo clássico na esfera de Bloch	57

CC	ONTE	ÚDO	viii
5	Fun	ção de Husimi do modelo de Jahn-Teller	63
	5.1	A função de Husimi no caso integrável	63
	5.2	A função de Husimi no caso não integrável	64
6	Con	clusão	73
A	Rela	ções úteis de de operadores, estados coerentes e base de Fock deslocada	75
	A.1	Operadores criação e aniquilação	75
	A.2	Matrizes de Pauli	76
	A.3	Operador deslocamento	76
	A.4	Estados coerentes de oscilador harmônico e de spin	77
	A.5	Base de Fock Deslocada	77
B	Cálc	culo dos pontos fixos do análogo clássico	79
Bi	bliogr	rafia	89

Lista de Figuras

2.1	Diagrama de fase	7
2.2	Superfície esférica de Bloch e seus principai elementos	16
3.1	Esquema de experimento usando Caixa de Pares de Copper	30
3.2	Diagrama de energia para a CPB	31
3.3	Funções de onda do oscilador harmônico deslocado	35
3.4	Entropia de von Neumann para o caso limite $\Delta/\epsilon \to \infty$	37
3.5	Entropia de von Neumann para o caso integrável	39
3.6	Entropia de von Neumann para o caso não integrável em função do parâmetro	
	de acoplamento G/ϵ	40
3.7	Entropia de von Neumann para o caso não integrável em função do parâmetro	
	crítico α	41
3.8	Entropia linear para o caso não integrável em função do parâmetro de acopla-	
	mento G/ϵ	42
3.9	Entropia linear para o caso não integrável em função do parâmetro crítico α	43
3.10	Espectro de energia em função do parâmetro crítico α para $\Delta/\epsilon=1.5$	44
3.11	Espectro de energia em função do parâmetro crítico α para $\Delta/\epsilon=10.0$ $~$	45
3.12	Espectro de energia em função do parâmetro crítico α para $\Delta/\epsilon=30.0$ $~$	45
3.13	Derivada segunda da energia em função de α	46
4.1	Mapa de Poincaré para $\alpha=0.7$ e $\Delta/\epsilon=1.5$	54
4.2	Visualização tridimensional do mapa de Poincaré para $\alpha=0.7$ e $\Delta/\epsilon=1.5$	55
4.3	Visualização tridimensional do mapa de Poincaré para $\alpha = 0.7$ e $\Delta/\epsilon = 1.5$	
	com plano de corte.	56

LISTA DE FIGURAS

4.4	Mapa de Poincaré para $\alpha=0.7$ e $\Delta/\epsilon=1.5$	•	57
4.5	Mapa de Poincaré para $\alpha=1.2$ e $\Delta/\epsilon=1.5$	•	58
4.6	Mapa de Poincaré para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 1.5$	•	59
4.7	Mapa de Poincaré para $\alpha=0.7$ e $\Delta/\epsilon=10.0$ $~$	•	60
4.8	Mapa de Poincaré para $\alpha = 1.2$ e $\Delta/\epsilon = 10.0$ $~.~.~.~.~.$	•	60
4.9	Mapa de Poincaré para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 10.0$ $~.$ $~.$ $~.$ $~.$ $~.$ $~.$ $~.$ $~.$	•	61
4.10	Figura esquemática da bifurcação	•	61
5.1	Função de Husimi para $\alpha = 0.7$ e $\Delta/\epsilon = 1.5$		66
5.2	Função de Husimi para $\alpha = 1.2 \text{ e } \Delta/\epsilon = 1.5$		67
5.3	Função de Husimi para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 1.5$		67
5.4	Função de Husimi para $\alpha = 0.7$ e $\Delta/\epsilon = 10.0$	•	68
5.5	Função de Husimi para $\alpha = 1.2$ e $\Delta/\epsilon = 10.0$	•	68
5.6	Função de Husimi para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 10.0$	•	69
5.7	Função de Husimi para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 10.0$		69
5.8	Função de Husimi para $\alpha=0.7$ e $\Delta/\epsilon=30.0$	•	70
5.9	Função de Husimi para $\alpha=1.2$ e $\Delta/\epsilon=30.0$		70
5.10	Função de Husimi para $\alpha = 1.2$ e $\Delta/\epsilon = 30.0$	•	71
5.11	Função de Husimi para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 30.0$	•	71
5.12	Função de Husimi para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 30.0$	•	72

Capítulo 1

Introdução

Muitas das propriedades químicas de compostos e ocorrências de reações químicas são determinadas pela estrutura molecular dos reagentes, e portanto há necessidade de tratar usando mecânica quântica. Em muitas situações o cálculo das funções de onda moleculares são feitas de forma aproximada, por exemplo, separando as componentes nuclear e elétrica. Entretanto, a presença de acoplamentos destes graus de liberdade levam a quebras de simetria e distorções espacias da função de onda molecular, sendo tal efeito conhecido em geral como efeito Jahn-Teller (JT) [1, 2, 3]. Este efeito, com enfoque no emaranhamento quântico dos graus de liberdade envolvidos, particularmente no estado fundamental tem sido estudado recentemente em sistemas do tipo spin-bóson [4, 5, 6, 7], isto é, sistemas simples onde um bit quântico ou qubit (spin 1/2) acoplado a um modo de oscilador harmônico associado a um ressonador de linha de transmissão em circuitos elétricos. Modelos deste tipo são de grande interesse para realização de elementos que comporiam um computador quântico, ou para realização de transmissão de informação quântica, particularmente em sistemas de estado sólido [8, 9]. Uma realização desses elementos que compõem o circuito podem ser implantados sobre um 'chip', permitindo assim uma composição de muitos destes circuitos para construir um computador quântico, diferente de muitas operações lógicas que foram realizados em sistemas macroscópicos impossíveis de se tornarem escaláveis. Nesta tese, trataremos do modelo JT mais simples de interação qubitoscilador existente na literatura.

A propriedade principal que será tratada neste modelo será o de emaranhamento, que é uma correlação puramente quântica, entre o qubit e o oscilador. Recentemente o estudo de

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

propriedades de emaranhamento de vários sistemas quântico tem sido uma área de pesquisa muito ativa, em particular a relação entre emaranhamento e fenômenos críticos como a transição de fase quântica (TFQ) [10, 11]. Além disso, do ponto de vista em que o emaranhamento de um sistema com a vizinhança é o responsável pelo processo de perda de coerência quântica ou *decoerência* também há um grande interesse no estudo do comportamento do emaranhamento com o parâmetro de interação. Foi interessado nesse processo que Levine e Muthukumar [12] iniciaram o estudo de um qubit acoplado a um oscilador (representando um modo da vizinhança) com interação tipo JT, demonstrou que o emaranhamento do estado fundamental como função da intensidade do acoplamento no limite em que o oscilador se tornava clássico (massa $m \rightarrow \infty$), tinha dois regimes bem distintos. Baseado nestes resultados obtidos fazendo uma analogia entre diferentes modelos, Hines e colaboradores [4] perceberam que o sistema tratado descrevia um sistema tipo Jahn-Teller.

Do ponto de vista mais teórico sobre a conexão entre sistemas quânticos e seus análogos clássicos, foi demonstrado para vários sistemas quânticos [13] à temperatura nula (T = 0) que há uma conexão entre bifurcações de ponto fixo clássico [14] e a TFQ onde o estado fundamental do modelo apresenta uma variação considerável no emaranhamento quando passa de um regime a outro através da variação contínua de um parâmetro do Hamiltoniano. Em particular isto foi mostrado para o modelo tipo spin-bóson conhecido como Jahn-Teller $E \otimes \beta$ [4, 15, 12] acima mencionado.

Um dos objetivos desta dissertação de mestrado é desenvolver detalhadamente o estudo do modelo $E \otimes \beta$ de Jahn-Teller, entendendo o que ocorre no estado fundamental deste modelo conforme o parâmetro de interação entre o qubit (que representa as duas coordenadas elétricas no caso molecular) e o oscilador (que faria o papel do grau de liberdade vibracional) conforme o parâmetro de interação é aumentado.

Apresentamos a seguir a organização dos capítulos desta dissertação. No capítulo 2 apresentamos alguns conceitos fundamentais necessários para a compreensão dos próximos capítulos. Tais conceitos são por exemplo no caso quântico: a transição de fase quântica, o operador densidade, o emaranhamento e suas medidas em caso bipartite e os estados coerentes de oscilador harmônico e de spin. No caso da mecânica clássica, o mapa de poincaré e pontos fixos. Para fazer a conexão quântico-clássico no espaço de fase introduzimos a função de Husimi. O capítulo 3 é reservado para a discussão do modelo de Jahn-Teller (JT), um rápido histórico e como nos

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

dias de hoje ele está associado aos sistemas de estado sólido elegidos como candidatos a elementos essenciais na comunicação e computação quântica. Discutimos também como obter as soluções para os auto-estados e auto-valores do Hamiltoniano e finalmente o emaranhamento do estado fundamental do modelo. No capítulo 4 apresentamos o método do análogo clássico do modelo de JT, com o objetivo de obter as equações de movimento do sistema para discutir as estruturas clássicas de interesse. Tais são os pontos fixos e suas bifurcações com o parâmetro de acoplamento e o mapa de Poincaré que nos permite analisar a natureza da dinâmica clássica associada (caos ou regularidade). No capítulo 5 apresentamos a função de Husimi, particularmente do estado fundamental do modelo que nos permite fazer a ponte entre os aspectos clássico e quântico do sistema, em particular no que tange à TFQ e a bifurcação do ponto fixo estável. Algumas conclusões são delineadas no capítulo 6, particularmente em relação à presença de caos no modelo. Nos apêndices apresentamos algumas fórmulas importantes para a solução do problema quântico e detalhes da obtenção do ponto fixo da dinâmica clássica.

Capítulo 2

Conceitos Fundamentais

A análise do emaranhamento em sistemas tipo spin-bóson tem sido tema de diversos artigos científicos [16, 4]. Recentemente, tem sido relacionado a esse estudo a análise do análogo clássico; mais especificamente, há uma conjectura de que uma transição de fase quântica (TFQ) do sistema quântico se relaciona com uma bifurcação do(s) ponto(s) fixo(s), com ambos os fenômenos ocorrendo para o mesmo valor do parâmetro crítico do sistema [17, 18]. Neste trabalho, faremos o estudo do emaranhamento e relacionaremos com o análogo clássico no modelo de Jahn-Teller $E \otimes \beta$. Mas para tal, precisamos estabelecer as ferramentas a serem utilizadas e expor os princípios e conceitos base para nosso estudo.

2.1 Transição de Fase Quântica

Uma classe de fenômenos que tem sido objeto de vários trabalhos é a transição de fase quântica. Assim como a bem conhecida transição de fase clássica (TFC), onde temos como exemplo a ebulição da água e a mudança da fase ferromagnética para a fase paramagnética em metais como níquel e cobre ao mudarmos a temperatura, a TFQ também se caracteriza por uma mudança entre duas configurações estruturais distintas do sistema, induzida pela mudança de um parâmetro crítico do sistema. Mas enquanto a TFC está relacionada a uma mudança nos parâmetros temperatura e/ou pressão e ocasiona mudanças de ordem macroscópica, a transição de fase quântica ocorre à temperatura de zero absoluto e ocasiona uma mudança morfológica no estado fundamental do sistema. Assim como as TFC, as TFQ podem ser de 1^a ou de 2^a ordem.

Para entendermos essas classificações, vamos observar com mais detalhes como ocorre e quais as consequências da TFQ.

Consideremos um Hamiltoniano $\hat{H}(\lambda)$ associado a um sistema de N átomos ou N sítios de uma rede, onde λ é um parâmetro de acoplamento adimensional. Para uma rede finita, o estado fundamental em geral será uma função analítica e suave de λ . Mas, dependendo da forma do Hamiltoniano e dos acoplamentos envolvidos, pode existir um ponto de não analiticidade da energia do estado fundamental em $\lambda = \lambda_c$ onde ocorre um cruzamento de níveis, ou seja, onde o primeiro estado excitado se torna o estado fundamental. Se tomarmos o limite quando a rede tende ao infinito $(N \to \infty)$, podemos ter uma situação onde, existindo uma repulsão de níveis na vizinhança de um ponto λ_c para o caso de rede finita, à medida que a rede aumenta a distância entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado diminui até que o ponto de repulsão se colapse dando origem a um ponto de não analiticidade para o limite da rede infinita. Qualquer ponto de não analiticidade na energia do estado fundamental de um sistema de rede infinita é identificado como uma transição de fase quântica. A não analiticidade pode ser tanto um cruzamento de níveis como um caso limite de uma repulsão de níveis.

Assim como a TFC, a TFQ também pode ser classificada como uma transição de 1^{*a*} ou de 2^{*a*} ordem [10]. A TFQ de 1^{*a*} ordem caracteriza-se por apresentar um cruzamento de níveis para N qualquer, inclusive no limite quando $N \to \infty$. A TFQ de 2^{*a*} ordem caracteriza-se pelo anulamento da escala de energia característica das flutuações acima do estado fundamental para $\lambda = \lambda_c$. Sendo Δ a escala que caracteriza uma densidade espectral relevante de flutuações para $\lambda \neq \lambda_c$, na maioria dos casos, quando $\lambda \to \lambda_c$, Δ se anula na forma:

$$\Delta \sim J |\lambda - \lambda_c|^{z\nu} \,, \tag{2.1}$$

onde J é a escala de energia de um acoplamento microscópico característico e $z\nu$ é o expoente crítico que caracteriza a rapidez com que isto acontece.

Outra característica da TFQ de 2^a ordem é que estas possuem um comprimento de escala característico divergente da seguinte forma:

$$\xi^{-1} \sim \Lambda |\lambda - \lambda_c|^{\nu} , \qquad (2.2)$$

indicando que nas proximidades do ponto crítico, sítios cada vez mais distantes da rede se tornam correlacionados [11]

Uma vez que a TFQ ocorre somente para T = 0 e pelo fato de todos os experimentos reais serem feitos em $T \neq 0$, um desafio no estudo das TFQ é entender como a singularidade a temperatura nula se reflete nas propriedades e características do sistema a temperaturas não nulas.

Um outro fato interessante é que, se tivermos uma variação do parâmetro λ à temperatura nula, estaremos considerando o caminho *a* na figura 2.1 abaixo.



Figura 2.1: Diagrama de fase na região do ponto crítico λ_c . A linha contínua delimita as duas fases e a linha tracejada indica as regiões de domínio das flutuações térmicas e das flutuações quânticas. As retas com setas indicam possíveis caminhos na evoluções dos parâmetros do sistema e quais as flutuações seriam predominantes em cada um.

Nesse caso, o sistema é dirigido somente por flutuações quânticas, não existindo flutuação térmica. Entretanto, como nos experimentos reais estamos sempre na situação de $T \neq 0$, para que se possa observar características de TFQ é necessário ter-se temperaturas extremamente baixas, afim de minimizar os efeitos dirigidos por flutuações térmicas. Como demonstrado na fig. 2.1, o caminho *b*, ainda que haja atuação de flutuações térmicas, é predominantemente dirigido por flutuações quânticas, enquanto que no caminho *c*, pelas temperaturas atingidas, poder-se-ia desprezar os efeitos oriundos das flutuações quânticas.

Veremos no capítulo 3 que o modelo JT também apresenta um parâmetro crítico, ainda que

não se possa dizer extamente que haja uma transição de fase quântica, já que a mesma requer, além de T = 0, o chamado limite termodinâmico, obtido no limite quando $N \to \infty$, condição esta que não é satisfeita pelo modelo JT.

2.2 Emaranhamento

Uma importante propriedade quântica é o emaranhamento, que é uma correlação quântica sem análogo clássico que surge de superposições coerentes em sistemas quânticos multipartites em geral. Neste trabalho, entretanto, estudaremos o emaranhamento somente em sistemas bipartites, já que o sistema objeto de estudo aqui é um sistema spin-bóson. Para tornar esse conceito um pouco mais claro, vejamos a comparação abaixo.

Inicialmente, o estado geral de um qubit é um estado de superposição dos dois estados $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ de uma base ortonormal no espaço de Hilbert. Assim, podemos escrever o qubit como:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \qquad (2.3)$$

onde α e β são números complexos que satisfazem a condição de normalização do estado $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, ou seja, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Se consideramos agora um produto tensorial de dois qubits, temos por exemplo:

$$|\psi_{2q}\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} \left(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle\right), \tag{2.4}$$

onde $|ab\rangle \equiv |a\rangle \otimes |b\rangle$. Este estado é um estado separável, porque o estado de cada um de seus constituintes pode ser completamente determinado.

Se considerarmos agora um estado composto de dois qubits mas que não pode ser escrito como um produto tensorial temos, por exemplo, o seguinte estado:

$$|\psi_{bell}\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}.$$
(2.5)

Este estado é conhecido como estado de Bell e é um exemplo de estado emaranhado. Identificamos que há dois qubits, mas não conseguimos ter o estado bem determinado de cada qubit, ou seja, não conseguimos separar o estado em um produto tensorial de dois qubits.

O interesse pelo entendimento do emaranhamento aumentou com a possibilidade de aproveitamento do emaranhamento como recurso utilizável para comunicação e computação quântica. A realização experimental de geração de estados emaranhados em alguns sistemas reais mostrou a possibilidade de controle de alguns aspectos negativos e aproveitamento de outros aspectos positivos. O principal aspecto negativo é a perda de coerência do sistema, inevitável para sistemas reais não isolados. Uma vez que é possível ocorrer o emaranhamento entre subsistemas ou entre o sistema e o aparelho de medição, é importante que tenhamos o controle da dinâmica desse emaranhamento para evitar a decoerência ou, ao menos, para realizar as operações antes da perda de coerência. Como aspecto positivo, foi possível implementar os chamados "Quantum Bus" que servem como elemento que carrega ou transfere emaranhamento entre diferentes sistemas quânticos. Os "Quantum Data Bus" são cadeias de sistemas quânticos interagentes com acoplamentos estacionários com os quais é possível maximizar a eficiência na transmissão de informação quântica. O entendimento e controle desses sistemas será fundamental para o avanço da computação quântica(vide por exemplo [19]).

Para o estudo da dinâmica de emaranhamento, utilizamos algumas grandezas para mensurar este em função de algum parâmetro do Hamiltoniano do sistema ou do tempo. Utilizamos aqui duas grandezas: a entropia linear e a entropia de Von Neumann. Elas têm aspectos muito semelhantes e dentro dos limites abordados nesta tese (sistemas bipartites e estados globalmente puros), as duas medidas têm o mesmo comportamento e por isso, em algumas situações, será apresentada uma ou outra. Como estamos estudando somente sistemas bipartites, essas duas grandezas são adequadas, mas cabe lembrar que para casos mais gerais é necessário utilizar outras grandezas para quantificar o emaranhamento. Antes de apresentar a definição de cada uma, observemos um importante operador: o operador densidade.

2.2.1 O Operador Densidade

O conceito de operador densidade vem da mecânica estatística e tem o mesmo papel da função de densidade clássica utilizada em física estatística. Lá, ele é usado por exemplo no cálculo de médias estatísticas de um determinado operador. No nosso caso nos interessa mais especificamente a matriz densidade reduzida do sistema, obtida da matriz densidade, para uso nos cálculos das medidas de emaranhamento.

O estado de sistema isolado na mecânica quântica é um vetor $|\Psi\rangle$ no espaço de Hilbert, que pode ser expressa como uma superposição linear de estados de uma base ortonormal $\{|\phi_i\rangle\}$:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n} c_n |\phi_n\rangle, \qquad (2.6)$$

onde c_n é um número complexo e n é um índice associado aos números quânticos associados a certos observáveis dinâmicos do sistema. O módulo quadrado é a probabilidade de que a medida que realizarmos sobre o sistema irá encontrá-lo com os números quânticos associado a n.

Na mecânica quântica, tratamos com sistemas que interagem com o mundo externo. Neste caso, o que é considerado como realmente isolado é o sistema de interesse mais o mundo externo. O estado $|\Psi\rangle$ neste caso depende tanto das variáveis do sistema como do mundo externo, e ele contém todas as informações. Se quisermos extrair apenas uma parte da informação, por exemplo sobre o sistema de interesse, podemos calcular por exemplo o valor médio quântico do operador O associado ao sistema:

$$\langle \hat{O} \rangle_{Q} = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle.$$
 (2.7)

Na maioria das situações não sabemos exatamente em qual estado $|\Psi\rangle$ o sistema global está, mas podemos saber a probabilidade p_{Ψ} de estar em cada estado $|\Psi\rangle$. Neste caso, devemos tomar não só a média quântica, mas também a média no ensemble sobre vários sistemas idênticos que foram preparados de forma similar. Assim, ao invés da média da eq.(2.7), agora devemos ter:

$$\langle \langle \hat{O} \rangle_Q \rangle_{ensemble} = \sum_{\Psi} p_{\Psi} \langle \Psi | O | \Psi \rangle = Tr(\hat{O}\hat{\rho}) ,$$
 (2.8)

onde o operador densidade $\hat{\rho}$ é definido por

$$\hat{\rho} = \sum_{\Psi} p_{\Psi} |\Psi\rangle \langle\Psi|, \qquad (2.9)$$

sendo que a soma das probabilidades satisfaz $\sum_{\Psi} p_{\Psi} = 1$. No caso particular onde p_{Ψ} são nulos exceto um para o estado $|\Psi_0\rangle$, então temos simplesmente o projetor:

$$\hat{\rho} = |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|, \qquad (2.10)$$

e o estado é chamado de um estado puro. Segue da conservação de probabilidade que $Tr \hat{\rho} = 1$. Também no caso de um estado puro temos que:

$$Tr\,\hat{\rho}^2 = 1$$
. (2.11)

Para um dado estado semelhante ao qubit dado em (2.3), a matriz densidade é dada por:

$$\hat{\rho} = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(\alpha^*\langle 0| + \beta^*\langle 1|)$$

$$= |\alpha|^2 |0\rangle\langle 0| + |\beta|^2 |1\rangle\langle 1| + \alpha\beta^*|0\rangle\langle 1| + \alpha^*\beta|1\rangle\langle 0|$$

$$= \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix}.$$
(2.12)

Se tivéssemos dois qubits como em (2.4), a matriz densidade seria:

e para um estado emaranhado como um estado de Bell dado por (2.5), temos:

$$\hat{\rho}_{bell} = \left(\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}\right) \left(\frac{\langle 00| + \langle 11|}{\sqrt{2}}\right)$$
$$= \frac{1}{2} \left(\begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 1\end{array}\right).$$
(2.14)

Já no caso de uma mistura estatística, na expressão (2.9) teremos mais um p_k não nulo de forma que existe uma probabilidade p_0 de o mesmo se encontrar no estado $|\psi_0\rangle$, probabilidade p_1 de estar no estado $|\psi_1\rangle$ e assim por diante, onde pelo menos dois p_k são não nulos e respeitam a conservação de probabilidade $\sum_i p_i = 1$. Uma importante característica de uma mistura estatística é que a mesma não pode ser escrita como uma superposição de estados de uma determinada base, diferentemente do que ocorre com um estado puro. Tomando como exemplo

um sistema com as probabilidades p_1 e p_2 $(p_1 + p_2 = 1)$ associadas aos estados $|00\rangle$ e $|11\rangle$ temos que sua matriz densidade é dada por:

Este caso demonstra o caso diagonal de uma mistura estatística de dois estados da base computacional. Note que poderíamos ter um caso onde os estados envolvidos não são da base computacional, mas uma combinação linear deles de modo que o resultado escrito na base computacional não chega a ser uma mistura estatística completa. Supondo que tivéssemos um um sistema com as probabilidades p_1 e p_2 associadas aos estados $|\psi_{2q}\rangle$ e $|\psi_{bell}\rangle$, sua matriz densidade seria:

$$\hat{\rho} = p_1 |\psi_{2q}\rangle \langle \psi_{2q}| + p_2 |\psi_{bell}\rangle \langle \psi_{bell}| = \begin{pmatrix} \frac{p_1}{4} + \frac{p_2}{2} & \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} + \frac{p_2}{2} \\ \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} \\ \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} \\ \frac{p_1}{4} + \frac{p_2}{2} & \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} & \frac{p_1}{4} + \frac{p_2}{2} \end{pmatrix}.$$
(2.16)

Observando as matrizes (2.13) e (2.15) podemos compreender melhor os conceitos de população e coerência. Os termos diagonais da matriz densidade são, de forma geral, dados por:

$$\hat{\rho}_{nn} = \sum_{k} p_k \langle \phi_n | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \phi_n \rangle = \sum_{k} p_k |c_k^n|^2 , \qquad (2.17)$$

onde a população $\hat{\rho}_{nn}$ corresponde à média estatística das probabilidades quânticas $|c_k^n|^2$ associadas aos estados de base $|\phi_n\rangle$.

Por outro lado, os termos fora da diagonal são dados por:

$$\hat{\rho}_{mn} = \sum_{k} p_k \langle \phi_m | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \phi_n \rangle = \sum_{k} p_k (c_k^n)^* c_k^m \,. \tag{2.18}$$

O termo $(c_k^n)^* c_k^m$ está relacionado ao termo de interferência entre os estados $|\phi_m\rangle \in |\phi_n\rangle$ do sistema que está inicialmente no estado $|\psi_k\rangle$. Novamente, como o elemento $\hat{\rho}_{mn}$ é dado em termos da média sobre todos os $|\psi_k\rangle$, temos a média desse efeito de interferência. Se esse elemento

é nulo, não existe interferência entre os estados $|\phi_m\rangle$ e $|\phi_n\rangle$, ou seja, não existem correlações quânticas entre os dois estados que produzam interferência. Note que a média pode ser nula sem que cada termo $(c_k^n)^* c_k^m$ seja necessariamente nulo. Por outro lado, $\hat{\rho}_{mn} \neq 0$ significa que existem correlações quânticas (ou coerência) entre os estados $|\phi_m\rangle$ e $|\phi_n\rangle$ que produzem interferência. Por isso, esses elementos da matriz densidade são chamados de coerências.

Quando trabalhamos com sistemas que contêm dois ou mais subsistemas, freqüentemente nos interessa a análise de grandezas associadas a somente um deles. Nesses casos, precisamos tomar o traço sobre toda a informação a respeito dos outros subsistemas de modo a deixar evidenciado somente o subsistema de interesse. Para isso, calculamos a matriz densidade reduzida do subsistema de interesse. A matriz densidade reduzida de um subsistema é definida como sendo o traço parcial da matriz densidade no(s) subsistema(s) restantes. Assim, se tivermos um sistema bipartite e quisermos a matriz densidade reduzida do subsistema 1, fazemos o traço parcial no subsistema 2:

$$\hat{\rho}_1 = Tr_2 \,\hat{\rho} \,, \tag{2.19}$$

ou se quisermos a matriz densidade reduzida do sistema 1, fazemos o traço parcial no sistema 2 No caso dos dois qubits, coincidentemente as matrizes densidades dos dois qubits são iguais e dadas por:

$$\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} .$$
(2.20)

O mesmo ocorre para os constituintes do estado de Bell, e temos:

$$\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} .$$
(2.21)

Nesta tese, não vamos tratar o caso geral de um sistema aberto, somente um sistema bipartite tipo átomo-campo. Dessa forma, usaremos as matrizes densidade reduzida de campo que é calculada tomando o traço no grau de liberdade do spin, e a matriz densidade reduzida de spin, onde tomamos o traço no grau de liberdade do campo.

2.2.2 Medidas de emaranhamento

Feitas as devidas observações acerca da matriz densidade, temos que a entropia linear associada ao subsistema n é definida como:

$$S_L^n = \frac{N}{N-1} (1 - Tr \,\hat{\rho}_n^2) \,, \tag{2.22}$$

onde $\hat{\rho}_n$ é a matriz densidade reduzida de um subsistema *n* qualquer. A entropia de Von Neumann associada ao subsistema *n* é dada por:

$$S_N^n = -k_B Tr\left(\hat{\rho}_n \log_N \hat{\rho}_n\right) = -\sum_k \lambda_k \log_N \lambda_k \,, \tag{2.23}$$

onde λ_k são os autovalores da matriz densidade reduzida do subsistema de interesse e \mathcal{N} é a quantidade de subsistemas em estudo. Para o caso de sistemas bipartites, $\mathcal{N} = 2$.

A entropia linear tem como característica ser positiva definida e limitada entre 0 e 1, onde seu valor igual a zero ocorre para estado puro e igual a unidade para sistemas maximamente emaranhado. Essa medida tem sido muito utilizada na análise de sistemas tipo SB por ser bastante simples seu cálculo e por dar origem a resultados tão reveladores quanto de outras medidas de emaranhamento.

A entropia de von Neumann também é positiva definida mas em geral não é limitada superiormente. Seu valor nulo também ocorre para estado puro. Particularmente neste trabalho onde estudamos um sistema de spin 1/2, a entropia de von Neumann tem seu valor máximo em 1, da mesma forma como a entropia linear. A entropia de von Neumann teve sua origem em 1927 quando John von Neumann definiu quanticamente sua entropia como uma generalização da expressão clássica de Boltzmann e Gibbs.

2.3 Estados coerentes de oscilador harmônico (OH) e de spin

Dois importantes estados utilizados e que fazem a ligação entre a análise qüântica e clássica do sistema são os estados coerentes de oscilador harmônico e de spin. Começamos apresentando o estado coerente de oscilador harmônico (ECOH). Este estado é o autoestado do operador aniquilação do oscilador harmônico:

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle. \tag{2.24}$$

Pode-se mostrar também, utilizando propriedades do operador deslocamento, que um estado coerente pode ser gerado através de um deslocamento do vácuo:

$$|z\rangle = \hat{D}(z)|0\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$
 (2.25)

Uma importante propriedade deste estado é que ele é um estado de mínima incerteza, obedecendo a relação $\Delta q = \hbar/2\Delta p$ para o estado fundamental ao longo do tempo, e ele mantém essa incerteza quando evoluído sob a dinâmica de OH. Em outras palavras, pensando no pacote de onda associado ao estado coerente, ao contrário de outros estados que têm sua variância aumentada com o tempo, o estado coerente a mantém constante mantendo o seu formato original ao longo de toda sua evolução. Além disso, um ponto fundamental se revela quando estudamos por exemplo o campo EM e o estado coerente. Como é sabido, o operador de campo EM quântico pode ser escrito como [20]:

$$\hat{H}_{EM} = \sum_{i} \hbar \omega_i \left(a_i^{\dagger} \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right) \,. \tag{2.26}$$

Se calcularmos a média deste operador no estado coerente, temos que:

$$\mathcal{H}_{EM} = \sum_{i} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_i^2 \right) \,. \tag{2.27}$$

Vemos que esse resultado é exatamente o campo EM clássico. Em virtude desse resultado, para o cálculo do análogo clássico do Hamiltoniano JT faremos a média sobre o estado coerente de campo (OH). Mas com isso surge a pergunta: se o estado coerente de campo leva ao campo EM clássico correto e por isso usaremo-lo no cálculo do análogo clássico, o que usaremos para o cálculo do spin, já que o mesmo é uma propriedade puramente quântica não tendo análogo clássico? De fato não existe um efeito ou propriedade clássica relacionada ao spin, e realmente uma média do spin não tem o mesmo caráter que a média do campo EM quântico, mas ainda assim, podemos definir um estado relacionado ao spin com todas as propriedades do estado coerente de campo. Esse estado é o estado coerente de spin.

O estado coerente de spin (ECS), primeiramente definido por Arecchi et al. [21], tem construção e propriedades análogas ao estado coerente de campo, mas com uma importante diferença: enquanto no campo temos um plano no espaço bidimensional, no spin temos uma

superfície esférica no espaço tridimensional. Um dos reflexos práticos desse fato é que, enquanto o estado coerente de campo é autoestado do operador \hat{a} , o estado coerente de spin é autoestado de uma composição dos operadores \hat{J}_+ , \hat{J}_- , \hat{J}_z , obedecendo a equação de autovalor:

$$\left[\hat{J}_{-}e^{\mathrm{i}\phi}\cos^{2}(\theta/2) - \hat{J}_{+}e^{-\mathrm{i}\phi}\sin^{2}(\theta/2) + \hat{J}_{z}\sin\theta\right]|w\rangle = 0, \qquad (2.28)$$

onde θ é o ângulo azimutal e ϕ é o ângulo polar no espaço de momento angular. Analogamente ao ECOH, o ECS também pode ser gerado através de um deslocamento do estado de mais baixo momento angular $|-J\rangle$

$$|w\rangle = R_{\theta,\phi}|-J\rangle = e^{\zeta \hat{J}_{+} - \zeta^{*} \hat{J}_{-}} |-J\rangle, \qquad (2.29)$$

onde $\zeta = \frac{1}{2}\theta e^{-i\phi}$; entretanto, diferentemente do que ocorre com o ECOH, o deslocamento é limitado ao valor de +*J*, já que

$$\hat{J}_+ \left| J \right\rangle = 0 \,. \tag{2.30}$$

Uma outra importante característica é que o ECS também é um estado de mínima incerteza, ou seja, não muda sua largura a medida que evolui no tempo.

No apêndice A apresentamos alguns resultados úteis relacionados aos ECS.



Figura 2.2: Superfície esférica de Bloch, com a indicação dos ângulos $\phi \in \theta$, a relação desses ângulos com o parâmetro w do ECS e a conexão com o plano obtido após planificação da superfície esférica.

Por fim, devido a característica dos estados coerentes de boa conexão do quântico com o clássico, é possível associarmos aos parâmetros z e w as coordenadas no espaço de fase clássico. No caso do bóson (OH), o parâmetro z pode ser associado às coordenadas q e p do plano e o spin, às coordenadas angulares $\theta e \phi$ da esfera de Bloch, com r = 1 [22]. Escrevendo essas coordenadas em termos das coordenadas retangulares s_x , $s_y e s_z$, temos que w pode ser escrito como:

$$z = \frac{q_2 + i\,p_2}{\sqrt{2}} \tag{2.31}$$

e

$$w = \frac{s_x - i \, s_y}{1 - s_z} \,. \tag{2.32}$$

Entretanto, podemos planificar a superfície esférica de Bloch, de forma que ao invés de trabalharmos com as coordenadas $\theta \in \phi$ em cima da esfera, trabalhamos no plano com as coordenadas $q \in p$ [45]. Assim, temos que as coordenadas da esfera se relacionam com as coordenadas no plano através das seguintes expressões:

$$s_x = \frac{1}{2}\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)} q_1 \tag{2.33}$$

$$s_y = \frac{1}{2}\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)} p_1 \tag{2.34}$$

$$s_z = -\frac{1}{4} [4 - 2(q_1^2 + p_1^2)], \qquad (2.35)$$

e com isso, chegamos que o parâmetro w pode ser expresso em termos das coordenadas no plano por:

$$w = \frac{q_1 - i p_1}{\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}}.$$
(2.36)

Essas expressões serão importantes no cálculo do análogo clássico que faremos.

2.4 Mapa de Poincaré

Um dos instrumentos mais conhecidos na análise da dinâmica clássica é o mapa de Poincaré. Através da observação dele podemos entender: (i) por qual região do espaço de fase a partícula se desloca; (ii) se a partícula segue uma dinâmica regular ou caótica; (iii) se existem e onde se localizam as regiões de instabilidade e estabilidade.

Começamos relembrando alguns conceitos da mecânica clássica. Dentre os vários tipos de sistemas dinâmicos encontramos os sistemas hamiltonianos, que são amplamente estudados tanto por suas propriedades como por sua importância na mecânica de sistemas conservativos. Inicialmente, o espaço de fase associado aos sistemas Hamiltonianos são caracterizados por um número par de dimensões N dada por:

$$N = 2n \,, \tag{2.37}$$

onde n é o número de graus de liberdade do sistema. As 2n variáveis do sistema são as coordenadas e momentos generalizados, em geral, escritas como:

$$q_1, q_2, \dots, q_n$$
 p_1, p_2, \dots, p_n . (2.38)

Um sistema Hamiltoniano é descrito por uma única função das 2n variáveis, função esta chamada de Hamiltoniana do sistema:

$$\mathcal{H}(q_1,\ldots,p_n)\,,\tag{2.39}$$

e as equações básicas para as variáveis são:

$$\frac{d q_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \qquad \qquad \frac{d p_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}. \tag{2.40}$$

Estas equações são as chamadas equações de Hamilton ou equações de movimento e essas variáveis são chamadas de variáveis conjugadas.

Para entendermos agora como o mapa é obtido e suas propriedades, consideremos uma partícula que se desloque no plano sob a ação de um potencial bidimensional plano V(x, y):

$$\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$
 $\ddot{y} = -\frac{\partial V}{\partial y}$. (2.41)

Temos então dois graus de liberdade: x e y. Nossas variáveis conjugadas no espaço de fase são dadas por:

$$q_1 = x, \quad q_2 = y, \quad p_1 = \dot{x}, \quad p_2 = \dot{y}$$
 (2.42)

e a Hamiltoniana do sistema é dada por:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + V(q_1, q_2), \qquad (2.43)$$

onde o primeiro termo é o termo cinético e o segundo é o termo associado ao potencial imposto. Independentemente da forma exata desse potencial, podemos dizer que a dinâmica da partícula é descrita por equações de movimento da forma:

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}, t) \,. \tag{2.44}$$

A solução desse conjunto de equações vai nos apresentar as coordenadas da partícula para cada instante de tempo considerado. Cabe lembrar que, em geral, a solução desse sistema de equações diferenciais não costuma ser uma tarefa muito trivial.

Para estudarmos o deslocamento da partícula, uma idéia seria acompanhar toda a sua trajetória e observar como é a trajetória, qual a região do espaço de fase por onde a partícula passa, etc; esse método, porém, seria muito confuso, complicado e de pouca eficiência. Para começar porque o espaço é quadridimensional, o que não nos permite fazer um gráfico de todas as coordenadas simultaneamente. Ainda que omitíssemos uma das coordenadas e fizéssemos um gráfico em 3D, depois de algum tempo não seria mais possível identificar as linhas da trajetória; se quiséssemos observar trajetórias a partir de pontos iniciais diferentes, teríamos que fazer vários gráficos. Mas ao invés de acompanhar toda a trajetória, podemos utilizar o método inventado por Poincaré escolhendo um plano no nosso espaço de fase, por exemplo, o plano q_1p_1 passando por $q_2 = 0$ e marcar neste plano os pontos de interseção da trajetória com o próprio. Temos agora fixas três das quatro coordenadas; faltam as considerações sobre p_2 . Considerando que na interseção da trajetória com o plano pode-se ter $p_2 \le 0$ ou $p_2 > 0$ podemos restringir que os pontos a serem marcados no plano sejam somente aqueles que tenham $p_2 \leq 0$ ou $p_2 > 0$, já que marcar todos não nos traz informação adicional. Dessa forma, podemos acompanhar o deslocamento da partícula por longos períodos de tempo, de modo a termos no plano uma imagem clara de quais regiões são percorridas, se a partícula retorna a algum ponto do espaço de fase, se existe alguma regularidade no seu deslocamento, etc. Dessa forma, temos um método de estudo viável para espaços qudridimensionais, assim como para tantas condições iniciais quanto se queira. O gráfico resultante dessas marcas feitas no plano escolhido é chamado de mapa de Poincaré [23].

Não existe uma regra para a escolha do plano de observação; ele é escolhido conforme as condições do sistema, levando-se em conta a energia, simetrias, aspectos a serem observados, simplicidade de cálculo, etc... Podemos identificar nestes mapas diversas estruturas, cada qual

com suas propriedades [24, 25].

A primeira estrutura é o ponto fixo. Sua característica é que a velocidade associada ao sistema que esteja em um ponto fixo é nula. Ou seja, sendo $(q_{1pf}, p_{1pf}, 0, p_{2pf})$ um ponto fixo no referido plano e se o sistema possui condições iniciais tais que no tempo t_0 suas coordenadas no espaço de fase são $(q_{1pf}, p_{1pf}, 0, p_{2pf})$, ele permanecerá com essas coordenadas em qualquer instante de tempo t. Os pontos fixos são chamados também de pontos estacionários e são classificados pela influência que exercem sobre trajetórias que passam por pontos próximos [14]. Para entender essa influência, precisamos observar o comportamento na vizinhança do ponto fixo. Para isso, fazemos a expansão em série de Taylor da equação de movimento em torno do ponto fixo. Considerando a forma geral dada em (2.44), temos a expansão:

$$\dot{\mathbf{x}} \approx Df(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \mathcal{O}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^2), \qquad (2.45)$$

onde $Df(\mathbf{x}_0)$ é a matriz Jacobiana no ponto fixo \mathbf{x}_0 , definida como:

$$\left[Df(\mathbf{x}_0)\right]_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}.$$
(2.46)

Desprezando o termo de segunda ordem na expansão, temos as equações de movimento linearizadas. A linearização das equações de movimento é um recurso usado para o estudo analítico da dinâmica na vizinhança de pontos fixos quando as equações de movimento não possuem solução analítica. É a análise dos autovalores da matriz Jacobiana que nos permite distinguir o comportamento de cada ponto fixo. Para facilitar a discussão, consideremos agora um sistema com um grau de liberdade. Dessa forma, o espaço de fase tem dimensão 2 e a matriz Jacobiana possui dois autovalores. Dessa forma, temos, dentre outras, as possibilidades que seguem:

- Dois autovalores reais e positivos: o ponto fixo considerado é dito ser um nodo instável. Nesse caso, uma trajetória vizinha forma uma parábola no espaço de fase. Uma trajetória que comece perto desse ponto fixo vai se afastar dele.
- Dois autovalores reais e negativos: o ponto fixo considerado é um nodo estável. Uma trajetória vizinha forma no espaço de fase também uma parábola, mas nesse caso temos que uma trajetória que comece perto desse ponto fixo vai se aproximar dele.
- Dois autovalores reais com um positivo e outro negativo: o ponto fixo é um ponto de sela. Nesse caso, uma trajetória que comece perto desse ponto vai apresentar um dos dois

comportamentos distintos, dependendo dos eixos de aproximação e repulsão da sela e da trajetória seguida: ou pode se afastar do ponto ou se manter próximo ao mesmo.

- Dois autovalores reais iguais e positivos: o ponto fixo considerado é uma estrela instável. As trajetória vizinhas são retas passando pelo ponto fixo, mas cujo sentido é o de afastamento deste.
- Dois autovalores reais iguais e negativos: o ponto fixo considerado é uma estrela estável. As trajetória vizinhas são retas passando pelo ponto fixo, mas cujo sentido é o de aproximação deste.
- Dois autovalores complexos cujas partes reais são positivas: ponto fixo é um foco instável. Nesse caso, uma trajetória vizinha forma uma espiral no espaço de fase e uma trajetória que comece perto desse ponto fixo vai lentamente se afastando deste ponto.
- Dois autovalores complexos cujas partes reais são negativas: ponto fixo é um foco estável. Novamente, nesse caso uma trajetória vizinha forma uma espiral no espaço de fase, mas aqui uma trajetória que comece perto desse ponto fixo vai lentamente se aproximando dele.
- Dois autovalores puramente imaginários: ponto fixo é um centro. Nesse caso, trajetórias vizinhas formam círculos concêntricos ao redor do ponto fixo e não possuem comportamento nem de aproximação nem de afastamento.

Outro aspecto muito relevante na análise de um mapa de Poincaré é o caos. Diferentemente do que ocorre na vizinhança de pontos fixos, onde é possível identificar aspectos de regularidade do movimento, a região de caos se caracteriza pela ausência de qualquer regularidade; se observarmos os pontos dessa região, eles parecem "pular" de um ponto para outro de forma aleatória sobre o plano. Esse aspecto denota uma imprevisibilidade do sistema e uma extrema sensibilidade às condições iniciais do sistema.

2.4.1 Bifurcação de ponto fixo

Alguns sistemas dinâmicos apresentam também outro comportamento muito interessante e que também pode ser observado no mapa de Poincaré: bifurcação de seu(s) ponto(s) fixo(s)

conforme variamos um parâmetro crítico associado ao modelo. Não são todos os sistemas que apresentam tal comportamento e quando ele está presente não são todos os pontos fixos que sofrem bifurcação. A ocorrência de uma bifurcação está relacionada à topologia do espaço de fase na vizinhança do ponto fixo. A teoria de bifurcação é um campo vasto dentro da teoria de sistemas dinâmicos, mas nos restringiremos aqui aos conceitos mínimos para a compreensão dos resultados que apresentaremos nos capítulos subseqüentes desta dissertação.

Bifurcar significa separar, dividir. Quando falamos em bifurcação de um ponto fixo, estamos dizendo que este ponto se divide em outros pontos fixos, sob a variação de um parâmetro crítico do sistema. Mas um ponto fixo só pode sofrer uma bifurcação se ele for um ponto nãohiperbólico. Por definição, um ponto fixo é um ponto hiperbólico se e somente se a matriz Jacobiana tomada no referido ponto não apresentar autovalores zero ou puramente imaginários. Assim, temos um critério para deteção de bifurcações em um sistema: após o cálculo dos pontos fixos, substituímos essas coordenadas na matriz Jacobiana do sistema e calculamos seus autovalores. Se o resultado obtido apresentar autovalores nulos ou puramente imaginários, o ponto fixo é não hiperbólico e pode sofrer bifurcação. Em geral, os sistemas tratados na prática possuem parâmetros que podem ser variados; nesse caso os autovalores obtidos serão função desses parâmetros e a análise sobre a hiperbolicidade ou não dos pontos fixos dependerá do valor ou do intervalo de variação de tais parâmetros.

Uma vez constatado que um ponto fixo pode sofrer bifurcação temos que esta pode ser de vários tipos, conforme as características associadas à mesma; entretanto, chamamos a atenção para duas em especial. A primeira bifurcação é a tipo 'pitchfork'. Nessa bifurcação temos que, quando um parâmetro do sistema assume seu valor crítico, um ponto não hiperbólico se divide em dois ou mais (em número finito) pontos fixos. O outro tipo de bifurcação é a tipo 'Hopf'. Nesse caso, temos que de um ponto fixo emergem infinitos pontos fixos, os quais localizam-se sobre uma curva fechada localizada a uma determinada distância do ponto fixo inicial. Citamos esses dois tipos de bifurcação porque elas já foram observadas no estudo de alguns sistemas tipo spin-bóson como o tratado neste trabalho. A birfucação tipo 'Hopf' é encontrada no análogo clássico do modelo de Dicke conforme [16]. Veremos no cap.4 que o análogo clássico do modelo JT também apresenta uma bifurcação tipo 'pitchfork'.

2.5 Função de Husimi

Algumas vezes, no estudo de sistemas quânticos, interessa-nos observar com clareza determinado(s) estado(s) quântico(s) do sistema, mas as ferramentas mais usuais, tais como o vetor de estado e a matriz densidade não cumprem tão bem esse papel. Para clarificar as características e propriedades do(s) estado(s) quântico(s) de interesse, uma ferramenta que se mostra adequada a tais estudos são as funções de quasi-probabilidade [6]. Três dentre as mais conhecidas são a função de Wigner, dada por:

$$W(q,p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \langle q - x | \hat{\rho}_s | q + x \rangle e^{2i \, px/\hbar} \,, \tag{2.47}$$

a função P, dada por:

$$P = \frac{1}{\pi} \sum_{ij} \rho_{ij}^{(a)} \alpha^{i} \alpha^{*j} , \qquad (2.48)$$

e a função Q ou função de Husimi, dada por:

$$Q(z) = \frac{1}{2\pi} \langle z | \hat{\rho}_s | z \rangle .$$
(2.49)

Na mecânica clássica, usualmente estudamos a dinâmica de um sistema através da evolução de sua distribuição pelo espaço de fase. Para um oscilador harmônico, por exemplo, acompanhamos a evolução de suas coordenads q e p pelo espaço de fase. Na mecânica quântica, porém, não é possível conhecermos exatamente as coordenadas q e p do oscilador harmônico; temos acesso somente a uma área mínima de valor $2\pi\hbar$. Por esse motivo, não é possível definirmos exatamente uma distribuição de probabilidade em função das coordenads q e p do espaço de fase, mas podemos definir neste mesmo espaço de fase uma função semelhante a distribuição de probabilidade elássica e que ilustre o comportamento de determinado estado do sistema. Por isso, a função é chamada de função de quasi-probabilidade. Além disso, algumas dessas funções possuem uma característica não probabilística: possuem uma amplitude negativa. Esse fenômeno é interpretado como uma demonstração de interferência quântica no sistema.

Com isso, podemos ver que o interesse no uso das funções de quasi-probabilidade vai além da ilustração de um estado quântico: através dessas funções podemos fazer uma conexão entre as análises clássica e quântica do sistema através do espaço de fase. De fato, o que pode ser encontrado na literatura [18, 26] é que há uma concordância entre os pontos fixos do análogo clássico do sistema e as regiões de maior amplitude da função de quasi-probabilidade.

Apesar das particularidades de cada distribuição, todas elas devem obedecer a 4 requisitos, sintetizados por Stratonovich [27], a saber:

- O espaço sobre o qual deve ser definida uma função de quasi-probabilidade deve ser o espaço de fase clássico.
- A função deve ser real
- A função depende linearmente do operador densidade associado ao espaço
- Médias estatísticas da função real associada a um observável do sistema através das funções de quasi-probabilidade devem coincidir com os resultados do valor médio do operador calculado através da matriz densidade.

Como enunciado acima, podemos calcular o valor esperado de um determinado operador quântico usando as funções de quasi-probabilidade assim como na mecânica estatística é calculada a média de uma grandeza utilizando a função de distribuição. Mas deve ser observado que, diferentemente do que ocorre na mecânica clássica, na mecânica quântica as variáveis em geral não comutam. Assim, no caso clássico a média de uma grandeza O(x, p), função de suas variáveis conjugadas, é dada por:

$$\langle O(x,p)\rangle = \int dx \, \int dp \, O(x,p) P^{cl}(x,p) \,, \tag{2.50}$$

e a integração é feita sem qualquer restrição de ordem das coordenadas x e p nas funções O(x, p)e $P^{cl}(x, p)$, no caso quântico o operador $\hat{O}(\hat{x}, \hat{y})$ e a distribuição usada devem estar em uma ordem específica. Consideremos por exemplo os operadores \hat{a} e \hat{a}^{\dagger} do oscilador harmônico. Estes três operadores podem ser ordenados nas seguintes formas:

$$\frac{1}{2}(\hat{a}^{\dagger}\,\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^{\dagger}\,) \quad \text{ordenamento simétrico} \\ \hat{a}^{\dagger}\,\hat{a} \qquad \text{ordenamento normal} \qquad (2.51) \\ \hat{a}\hat{a}^{\dagger} \qquad \text{ordenamento antinormal}\,.$$

Com isso, as três funções citadas acima são associadas a estes ordenamentos de forma que a função de Wigner está associada ao ordenamento simétrico, a função P ao ordenamento normal e a função de Husimi ao ordenamento antinormal. Uma explanação mais detalhada foge

do escopo deste trabalho, mas a dedução de qual distribuição está relacionada a qual ordenamento e quais as consequências do uso de distribuições e ordenamentos incompatíveis pode ser encontrado em Schleich [28].

Além disso, as funções P (ou de Glauber-Sudarshan) e de Husimi se diferenciam da função de Wigner por serem funções baseadas nos estados coerentes, enquanto que a função de Wigner é a transformada de Fourier do operador densidade.

Nas análises que faremos em capítulos posteriores, utilizaremos a função de Husimi para ilustrar um estado coerente cuja dinâmica é descrita pelo Hamiltoniano de Jahn-Teller e compararemos esses resultados com os obtidos na análise clássica.
Capítulo 3

O Modelo de Jahn-Teller

3.1 Introdução Histórica

O efeito Jahn-Teller é observado no estudo de moléculas poliatômicas que apresentam degenerescência orbital. A idéia inicial que levou ao entendimento desse efeito é, originalmente, de Lev Landau, que ao observar o trabalho de um de seus alunos, propôs a seguinte afirmação: "Uma molécula em um estado eletrônico orbitalmente degenerado é instável com respeito a distorção espontânea da configuração nuclear que remova a degenerescência" [2]. Em 1937, H. Jahn e E. Teller publicaram um artigo [1] no qual a afirmação de Landau foi reformulada de forma mais rigorosa e posteriormente ficou conhecida como teorema de Jahn-Teller, que pode ser enuciado como segue: "Todas as configurações nucleares não-lineares são instáveis para um estado eletrônico orbitalmente degenerado". Ou seja, não é possível haver, simultaneamente, degenerescência orbital e estabilidade, exceto quando se trata de uma molécula linear ou quando os elétrons que causam a degenerescência não são essenciais na ligação da molécula. Neste caso a instabilidade é suave.

Experimentos feitos ao longo dos anos, mostraram que o efeito Janh-Teller acontecia também em alguns sistemas que não atendiam aos requisitos iniciais. Com isso, o efeito foi recebendo novos nomes e especificações para definir o tipo de molécula e características envolvidas [2, 3]. Daí temos o pseudo efeito JT que contempla moléculas com quase-degenerescência, o efeito Renner-Teller cujo alvo são as moléculas lineares, o efeito JT tipo $E \otimes \epsilon$, onde há a interação de dois níveis eletrônicos degenerados e dois modos vibrônicos também degenerados e, entre outros, o efeito JT tipo $E \otimes \beta$, foco desta tese, onde há a interação de dois níveis eletrônicos degenerados e um modo vibrônico. Por outro lado, na década de 1950, E.T. Jaynes e F.W. Cummings publicavam um trabalho fundamental sobre a interação matéria-radiação [29] onde propunham um modelo teórico para o estudo de um átomo de dois níveis acoplado a um modo de campo eletromagnético (EM). O Hamiltoniano completo do modelo obtido da interação aproximada de dipolo elétrico é dado por:

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \hbar\omega_a \hat{\sigma}_{z} + \frac{g}{2} (\hat{a}\hat{\sigma}_{+} + \hat{a}^{\dagger} \hat{\sigma}_{-} + \hat{a}\hat{\sigma}_{-} + \hat{a}^{\dagger} \hat{\sigma}_{+}), \qquad (3.1)$$

onde ω_0 é a freqüência do modo de campo, ω_a é a freqüência da transição entre os dois níveis atômicos, g é o parâmetro de interação e $\hat{\sigma}_z$ é uma das matrizes de Pauli, juntamente com $\hat{\sigma}_x$ e $\hat{\sigma}_y$. De forma geral, para qualquer sistema de dois níveis interagindo com um modo de campo EM incluindo-se o modelo JC, diz-se que o sistema está próximo a ressonância quando $\omega_0 \simeq \omega_a$. Assim, temos que $\hat{\sigma}_{\pm} = (\hat{\sigma}_{x\pm}i\,\hat{\sigma}_{y})/2$ são os operadores de levantamento e abaixamento de momento angular de spin. Na prática, é impossível discutir de forma exata mesmo a interação de um átomo com luz. Porém, quando é possível aproximar o campo EM como sendo praticamente monocromático e cuja freqüência é quase coincidente com uma das freqüências de transição do átomo em questão, então podemos considerar o átomo como um sistema de dois níveis. Para a obtenção de uma solução analítica para esse sistema é necessário utilizar a aproximação de onda girante (RWA - do inglês Rotating Wave Approximation), onde desprezamos os termos de interação que não conservam o número de excitação. Na prática, tal aproximação permite-nos desprezar efeitos muito complicados na dinâmica de átomos de dois níveis (ou de forma geral, pseudo spins, já que tais átomos são análogos a sistemas de spin 1/2), já que esses efeitos estão associados a oscilações da ordem de duas vezes a freqüência do campo. Mas a aproximação só é válida se tivermos o parâmetro de acoplamento q muito menor do que a freqüência do campo ω ($g \ll \omega$). Em experimentos com átomos em cavidades, podemos encontrar valores utilizados seguindo a relação $g/\omega \sim 10^{-7} - 10^{-6}$ [30, 31]. Nesta aproximação, o Hamiltoniano de JC pode ser escrito como:

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \hbar\omega_{\hat{a}} \hat{\sigma}_{z} + \frac{g}{2} (\hat{a} \hat{\sigma}_{+} + \hat{a}^{\dagger} \hat{\sigma}_{-}).$$
(3.2)

Nesse mesmo caminho, Dicke já havia proposto para estudo do fenômeno de superradiância um modelo para N átomos de dois níveis pouco interagentes [32]. E a partir de 1985 com o

experimento de Meschede et. al. [33] foi possível construir uma cavidade com propriedades tais que fosse possível existir dentro dela apenas um modo de campo EM o qual, ao interagir com um átomo introduzido¹, o levaria do seu estado fundamental ao estado excitado. Esse experimento, juntamente com outros que se seguiram em cavidades com fatores de qualidade melhores [34], tornaram o modelo de JC realístico e foi o precursor de uma área que continua em franca expansão: a CQED (do inglês Cavity Quantum Electrodynamics), ou Eletrodinâmica Quântica de Cavidades. E no final dos anos 90 abriu-se uma nova linha de pesquisa, com a realização de diversos experimentos cujo componente central eram as Caixas de Pares de Cooper (CPB)[35, 36, 37]. Isso porque neste experimento também pode-se estabelecer dois estados, com a diferença que estes não são mais os dois níveis de um átomo, mas dois estados de carga da CPB, onde há um par de Cooper em excesso $|1\rangle$ ou não há par em excesso $|0\rangle$. Além disso, a interação eletrostática entre a CPB e um ressonador nanomecânico (NR) [38] que atua "excitando" o sistema pode ser descrita da mesma forma que a interação entre um átomo de dois níveis e um modo de campo EM. Observou-se então que para o estudo e descrição deste sistema, poder-se-ia utilizar o mesmo modelo que descrevia o efeito JT [39, 8], com os dois estados eletrônicos representando os dois estados da CPB e o modo vibrônico representado pelo ressonador. Essa linha de pesquisa compõe também a chamada CQED, mas agora Eletrodinâmica Quântica de Circuito (ou Circuit Quantum Electrodynamics) [40]

A CPB é um circuito microeletrônico composto de uma ilha supercondutora conectada a um reservatório supercondutor por uma junção Josephson tipo túnel, a qual tem capacitância C_J^{CPB} e energia Josephson E_J . Essa junção estabelece uma barreira de potencial regulável entre a caixa e o reservatório, como será exposto abaixo. Um outro fio conectado à CPB permite variações no potencial eletrostático da ilha com a aplicação de uma voltagem V_g na porta ('gate') da CPB através da capacitância C_g . Apresentamos na fig. 3.1, um esquema do circuito experimental.

¹Os átomos utilizados neste tipo de experimento são os chamados átomos de Rydberg e possuem propriedades bem determinadas, entre elas tempo de vida longo o suficiente para que somente o acoplamento com o modo de campo da cavidade seja importante e diferença entre os níveis tal que a aplicação de um modo de campo de baixa ordem seja suficiente para obtenção de um tempo de interação longo. Na prática, o átomo geralmente utilizado é o Rubídio.



Figura 3.1: Esquema de experimento usando Caixa de Pares de Copper, composta da ilha supercondutora (em vermelho) conectada a um reservatório por meio de duas junções Josephson (quadrado com x), acoplado a um ressonador nanomecânico (barra em preto).

Temos então que a energia de Coulomb do sistema é dada por [41]:

$$E_c = \frac{e^2}{2(C_g + C_J)} \,. \tag{3.3}$$

A energia de Josephson efetiva que controla a ressonância entre o oscilador e a CPB pode ser regulada através de um fluxo magnético aplicado na CPB. Ela é dada por:

$$E_J = 2E_J^{CPB} \cos(\pi \Phi/\Phi_0), \qquad (3.4)$$

onde Φ_0 é o quantum de fluxo dado por h/2e. Uma outra característica importante é que a energia do gap do supercondutor $E\Delta_S$ deve ser a maior energia do sistema. Satisfeita essa condição e a baixas temperaturas, chegamos à situação onde todos os elétrons da ilha formam pares, ou seja, há na caixa N = 2n pares, onde n é o número de elétrons na caixa. Essa é a situação de equilíbrio do sistema, ou o seu estado fundamental. Variando-se a voltagem V_g , é possível controlar a entrada de um par de Cooper na caixa, o que se dá por meio de tunelamento pela junção Josephson. Consequentemente, altera-se também a energia dos estados fundamental e excitado. E por meio de um ajuste no fluxo magnético é possível controlar a diferença de energia entre os dois estados. No caso em que $\Phi = \Phi_0/2$, a distância entre os níveis tem valor nulo e os sistemas entram em ressonância. Na fig. 3.2, apresentamos o diagrama de energia para os dois estados da CPB.



Figura 3.2: Diagrama de energia para a CPB ilustrando os níveis de energia em função da carga induzida na caixa $Q_0/e = N_g$. As linhas tracejadas indicam os mesmos níveis na situação de ressonância, onde $E_J = 0$.

Para descrever este experimento, o Hamiltoniano do sistema é composto do Hamiltoniano do CPB, do ressonador nanomecânico e do Hamiltoniano de interação entre eles, ou:

$$\hat{H} = \hat{H}_{CPB} + \hat{H}_{NR} + \hat{H}_{int},$$
(3.5)

onde

$$\hat{H}_{CPB} = 4E_c \sum_{N} \left(N - N_g\right)^2 |N\rangle \langle N| - \frac{E_J}{2} \sum_{N} \left(|N+1\rangle \langle N| + |N\rangle \langle N+1|\right)$$
(3.6)

onde N é o número total de pares existentes dentro da caixa N_g é a carga injetada na caixa. Este termo pode ser escrito como:

$$\hat{H}_{CPB} = -2E_c(1-2N_g)\hat{\sigma}_{\mathbf{z}} - \frac{E_J}{2}\hat{\sigma}_{\mathbf{x}}$$
(3.7)

$$\hat{H}_{NR} = \hbar \omega \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \tag{3.8}$$

$$\hat{H}_{int} = \lambda (\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}) \hat{\sigma}_{z} \,. \tag{3.9}$$

onde

$$\lambda = \frac{-2E_c C_g V_g}{2ed} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$
(3.10)

e d é a distância entre a ilha e o ressonador.

Dessa forma, quando $N_g = 1/2$, temos exatamente o Hamiltoniano JT tipo $E \otimes \beta$. Reescrevendo-o na notação utilizada neste trabalho temos:

$$\hat{H}_{JT} = \Delta \hat{\sigma}_{\mathbf{x}} + \frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}} (\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}) \hat{\sigma}_{\mathbf{z}} + \epsilon \hat{a}^{\dagger} \hat{a} , \qquad (3.11)$$

onde Δ está associado a intensidade do campo magnético atuando perpendicularmente ao acoplamento, G é proporcional ao parâmetro de acoplamento e ϵ é a freqüência do campo EM. Apesar de ser muito semelhante ao Hamiltoniano do modelo JC, diferindo deste por uma rotação das matrizes de Pauli, com o modelo de JT podemos estudar situações não contempladas quando utilizamos a aproximação de RWA. Em sistemas onde o acoplamento átomo-campo é tipo dipolo, é possível se obter experimentalmente a relação $g/\omega \sim 10^{-3}$ [42, 43] e em sistemas onde o acoplamento é capacitivo pode-se obter valores ainda maiores, saindo da região de validade da RWA. Por isso torna-se interessante o estudo do modelo de JT, já que para seu estudo não é necessário fazer a aproximação de RWA e conseqüentemente podemos utilizá-lo para descrição de regimes com acoplamento forte. Na prática, é interessante a utilização de acoplamento forte já que no regime de acoplamento fraco o processamento de informação quântica é mais lento, tendo por conseqüência a realização de uma quantidade menor de operações durante o tempo de coerência do sistema.

3.2 O Hamiltoniano de Jahn-Teller

Assim como o Hamiltoniano de JC, o Hamiltoniano de JT dado por (3.11) possui uma parte integrável, mas se considerado com todos os seus termos, até o momento só possui solução numérica. Os termos que compõem o Hamiltoniano integrável são:

$$\hat{H}_G = \frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}} (\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}) \hat{\sigma}_{\mathbf{z}} + \epsilon \hat{a}^{\dagger} \hat{a} .$$
(3.12)

Para chegarmos à solução analítica, consideremos antes o caso mais simples: o oscilador harmônico simples. Se fizermos G = 0, temos

$$\hat{H}_{OH} = \epsilon \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \,, \tag{3.13}$$

que é o Hamiltoniano do oscilador harmônico desprezando-se a energia de ponto zero. Como já é bem conhecido, sua solução é:

$$\hat{H}_{OH}|n\rangle = E_n|n\rangle, \qquad (3.14)$$

 $\operatorname{com} E_n = \epsilon n.^2$

Antes de apresentarmos a solução para o caso $G \neq 0$, observemos com mais cuidado a base do oscilador harmônico, conhecida como base de Fock. Sabendo que $|n\rangle$ é autoestado do oscilador harmônico simples, projetando-o no espaço de coordenadas, temos:

$$\chi_n(q) = \langle q | \chi_n \rangle \equiv \langle q | n \rangle = a_n e^{-(q^2/2)} H_n(q) , \qquad (3.15)$$

onde

$$a_n = \frac{1}{\pi^{1/4} 2^{n/2} \sqrt{n!}},\tag{3.16}$$

e $H_n(q)$ é o polinômio de Hermite. Se atuarmos com o operador deslocamento no espaço de fase $\hat{D}(z)$ definido como:

$$\hat{D}(z) = e^{(z\hat{a}^{\dagger} - z^*\hat{a})}, \qquad (3.17)$$

em $|n\rangle$ antes de projetarmos no espaço das coordenadas, temos justamente um deslocamento no argumento das funções. Assim, temos:

$$\chi_n^R(q) = \langle q | \chi_n^R \rangle \equiv \langle q | \hat{D}(z) | n \rangle = a_n e^{-(q-z)^2/2} H_n(q-z)$$

$$\chi_n^L(q) = \langle q | \chi_n^L \rangle \equiv \langle q | \hat{D}(-z) | n \rangle = a_n e^{-(q+z)^2/2} H_n(q+z).$$
(3.18)

Comparando as equações (3.18), podemos perceber que, enquanto em (3.15) temos $(q - q_0) = q \Rightarrow q_0 = 0$, ou seja, o oscilador está centrado em zero, em (3.18) temos $(q - q_0) = q \pm z$, ou seja, o oscilador está centrado em $\pm z$. Dessa forma, diz-se que o oscilador foi deslocado para a esquerda (-z) ou para a direita (+z). Por isso essa base é chamada de base de Fock deslocada (FD). Estes estados descrevem um oscilador harmônico deslocado do centro do eixo das coordenadas. Neste trabalho o superíndice L, R indicam se o deslocamento foi feito para a esquerda ou direita da origem, respectivamente. Listamos algumas propriedades e resultados da

²Note que usualmente a energia do oscilador harmônico é dada por $E_n = \epsilon n + 1/2$, mas a origem do fator 1/2é justamente a energia de ponto zero que não foi considerada aqui. Por isso a energia E_n de (3.13) não possui o fator 1/2.

base deslocada que usaremos ao longo deste trabalho no apêndice A. Posto isso, consideremos agora o caso com interação $G \neq 0$, onde temos também o spin. Conforme apêndice A,

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{z}}|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \qquad \hat{\sigma}_{\mathbf{z}}|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle.$$
(3.19)

Assim, o autoestado do sistema deve ser constituído não somente pelo autoestado do oscilador harmônico mas também pelo do spin. Consideremos que sejam:

$$|\psi_n^L\rangle = |\chi_n^L\rangle \otimes |\uparrow\rangle \qquad |\psi_n^R\rangle = |\chi_n^R\rangle \otimes |\downarrow\rangle.$$
(3.20)

Numa notação mais concisa, escrevemos:

$$|\psi_n^{\mu}\rangle = |\chi_n^{\mu}\rangle \otimes |s_{\mu}\rangle, \qquad (3.21)$$

onde $\mu = L, R$ e convencionamos daqui em diante:

$$|s_{\mu}\rangle = \begin{cases} |\uparrow\rangle & \text{se } \mu = L \\ |\downarrow\rangle & \text{se } \mu = R. \end{cases}$$
(3.22)

Vamos mostrar que os estados (3.20) são realmente a solução do problema integrável. Atuando o Hamiltoniano neste estado temos:

$$\hat{H}_{G}|\psi_{n}^{\mu}\rangle = \begin{cases} \left[\frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}}(\hat{a}+\hat{a}^{\dagger})+\epsilon\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right]|\psi_{n}^{L}\rangle; & \mu = L\\ \\ \left[-\frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}}(\hat{a}+\hat{a}^{\dagger})+\epsilon\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\right]|\psi_{n}^{R}\rangle; & \mu = R. \end{cases}$$
(3.23)

Utilizando as relações (A.20) do apêndice A, temos que:

$$\hat{H}_{G}|\psi_{n}^{\mu}\rangle = \begin{cases}
\hat{D}^{\dagger}(\beta/2) \left[\epsilon \hat{a}^{\dagger} \hat{a} - \frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}}\right] \hat{D}(\beta/2) |\psi_{n}^{L}\rangle \\
\hat{D}(\beta/2) \left[\epsilon \hat{a}^{\dagger} \hat{a} - \frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}}\right] \hat{D}^{\dagger}(\beta/2) |\psi_{n}^{R}\rangle \\
= \begin{cases}
\left[\epsilon n - \frac{G^{2}}{2m\epsilon^{2}}\right] |\psi_{n}^{L}\rangle \\
\left[\epsilon n - \frac{G^{2}}{2m\epsilon^{2}}\right] |\psi_{n}^{R}\rangle.
\end{cases}$$
(3.24)
(3.25)

Assim, podemos ver que, de fato, os estados (3.20) são a base de autoestados do modelo JT integrável e que o sistema apresenta degenerescência, já que tanto o estado L quanto o R têm energia:

$$E_n^{(0)} = \epsilon n - \frac{G^2}{2m\epsilon^2}.$$
(3.26)

Vemos também que como $\beta = \frac{G}{\epsilon} \sqrt{\frac{2}{m\epsilon}}$ e o deslocamento da função de onda do OH é $\frac{G}{\epsilon\sqrt{2m\epsilon}}$, o parâmetro do sistema que efetivamente desloca o autoestado é o G. Na figura 3.3 apresentamos o gráfico da função de onda dos dois estados em função da posição para alguns valores de G.



Figura 3.3: Funções de onda do estado fundamental degenerado do oscilador harmônico deslocado em função da posição para alguns valores do parâmetro de acoplamento *G*.

Podemos ver que quando G = 0, as duas funções de onda estão sobrepostas ao redor do q = 0 e dessa forma a amplitude total é o dobro da amplitude de cada estado. À medida que aumentamos G, as duas funções de onda vão se separando até estarem completamente separadas em $G \sim 3.5$. Para valores de G maiores que 3.5, o efeito é o distanciamento dos dois estados. Esse comportamento caracteriza o efeito JT mais simples, onde o estado fundamental corresponde a uma função de onda 'bifurcada'.

Por fim, inserimos o termo que faz com que o sistema deixe de ser integrável:

$$\hat{H}_{\Delta} = \Delta \hat{\sigma}_{\mathbf{x}} \,. \tag{3.27}$$

Este termo está associado a um campo magnético externo atuando na direção do \hat{s}_x , perpendicularmente ao acoplamento que ocorre na direção \hat{s}_z e cujo efeito é quebrar a degenerescência do sistema. Δ é o parâmetro que indica a intensidade deste campo. Como para $\Delta \neq 0$ o sistema não possui solução analítica, calculamos os elementos de matriz do Hamiltoniano para visualizarmos como ocorre a inserção do termo \hat{H}_{Δ} no sistema integrável. Assim:

$$\hat{H}_{mn}^{\mu\nu} = \langle \psi_m^{\mu} | (\hat{H}_G + \hat{H}_{\Delta}) | \psi_n^{\nu} \rangle
= \langle \psi_m^{\mu} | \hat{H}_G | \psi_n^{\nu} \rangle + \Delta \langle \chi_m^{\mu} | \chi_n^{\nu} \rangle \langle \hat{s}_{\mu} | \hat{s}_{\mathbf{x}} | \hat{s}_{\nu} \rangle
= E_n^{(0)} \, \delta_{\mu\nu} \, \delta_{mn} + \Delta \langle \chi_m^{\mu} | \chi_n^{\nu} \rangle \, (1 - \delta_{\mu\nu}) \,.$$
(3.28)

Dessa forma, para $\mu = \nu$ temos somente os termos originários do Hamiltoniano integrável

$$\hat{H}_{m,n}^{\mu,\mu} = E_{(0)}^{\mu} \,\delta_{mn} \,, \tag{3.29}$$

com $E_{(0)}^{\mu}$ dado conforme (3.26), enquanto que para $\mu \neq \nu$, aparecem somente os termos da quebra de degenerescência:

$$\hat{H}_{mn}^{\mu\nu} = \Delta \langle \chi_m^{\mu} | \chi_n^{\nu} \rangle , \qquad (3.30)$$

Como a base FD não é uma base ortogonal³no espaço de estados do OH, os termos $\langle \chi_m^{\mu} | \chi_n^{\nu} \rangle$ não se anulam para $m \neq n$ e $\mu \neq \nu$ e o produto interno dessa base é dado por:

$$\langle \chi_{m}^{L} | \chi_{n}^{R} \rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{n!}{m!}} (\beta^{*})^{m-n} e^{-\beta^{2}/2} L^{m-n} (\beta^{2}) & (n \leq m) \\ \\ (-1)^{n-m} \sqrt{\frac{m!}{n!}} \beta^{n-m} e^{-\beta^{2}/2} L^{n-m} (\beta^{2}) & (n \geq m) . \end{cases}$$
(3.31)

Os cálculos que levam ao resultado acima são apresentados com mais detalhes no apêndice 2.

3.3 Emaranhamento no modelo de Jahn-Teller

Conforme discutido na seção 2.1, se um sistema possui um parâmetro crítico, ele apresenta uma significativa mudança da sua configuração estrutural quando o parâmetro λ assume seu

³Note que a base FD é somente $\{|\chi_m^{\mu}\rangle\}$. A base solução do Hamiltoniano JT integrável $\{|\psi_m^{\mu}\rangle\}$ no espaço de estados $\mathcal{E}_{OH} \otimes \mathcal{E}_{spin}$ é ortogonal porque é o produto da base FD com a base de spin que é ortogonal.

valor crítico λ_c . No caso do modelo de JT $E \otimes \beta$, o parâmetro crítico do sistema é o α que é expresso em termos dos outros parâmetros como:

$$\alpha = \frac{G^2}{m\epsilon^2 \Delta} \,. \tag{3.32}$$

Como demonstrado por Levine e Muthukumar [12], é esperado que a entropia do estado fundamental do modelo no limite quando $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$ tenha o comportamento mostrado na fig. 3.4:



Figura 3.4: Entropia de von Neumann para o caso limite $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$.

Ainda que no modelo de JT tenhamos apenas 1 átomo, longe do requisito de $N \to \infty$ da teoria de TFQ, conforme discutido na literatura [12, 4], o limite massivo do oscilador, no qual $m \to \infty$ com $m\epsilon^2 = cte$, ou equivalentemente [4] $\Delta/\epsilon \to \infty$, produz no sistema efeitos similares aos que ocorrem quando se toma o limite termodinâmico $N \to \infty$ em um sistema que possui uma TFQ. O limite massivo do oscilador é o equivalente ao limite em que o oscilador se torna clássico. Por isso, no estudo do emaranhamento no modelo JT, é interessante observarmos a entropia linear e de Von Neumann do estado fundamental em função do parâmetro de acoplamento G e do parâmetro crítico α .

Com relação as entropias de von Neumann e linear, para um sistema bipartite, como é o

caso do modelo JT, as expressões (2.22) e (2.23) reduzem-se a:

$$S_L = 1 - Tr\,\hat{\rho}_n^2\,,\tag{3.33}$$

e

$$S_N = -Tr\left(\hat{\rho}_n \log_2 \hat{\rho}_n\right) = -\sum_k \lambda_k \log_2 \lambda_k \,, \tag{3.34}$$

onde fizemos também a constante de Boltzmann igual a unidade.

(i) Caso integrável: neste caso, temos que $|\psi_0^L\rangle$ e $|\psi_0^R\rangle$ são os dois estados degenerados que correspondem a energia do estado fundamental. Assim, temos que um estado fundamental mais geral é a combinação linear destes dois estados. Ou seja:

$$|\psi_0\rangle = c_1|\psi_0^L\rangle + c_2 e^{i\phi}|\psi_0^R\rangle = c_1|\chi_0^L\rangle \otimes |\uparrow\rangle + c_2 e^{i\phi}|\chi_0^R\rangle \otimes |\downarrow\rangle, \qquad (3.35)$$

com $c_1^2 + c_2^2 = 1$ e ϕ é uma fase. Assim o operador densidade para este estado é dado por:

$$\hat{\rho}_0 = c_1^2 |\psi_0^L\rangle \langle \psi_0^L| + c_1 c_2 (e^{-i\phi} |\psi_0^L\rangle \langle \psi_0^R| + e^{i\phi} |\psi_0^R\rangle \langle \psi_0^L|) + c_2^2 |\psi_0^R\rangle \langle \psi_0^R|.$$
(3.36)

Conforme discutido no capítulo 2, temos que a matriz densidade de spin é obtida através do traço da matriz densidade sobre a variável de campo:

$$\hat{\rho}_{0,S} = \sum_{\mu=L,R} \langle \chi_0^{\mu} | \hat{\rho}_0 | \chi_0^{\mu} \rangle \,. \tag{3.37}$$

Utilizando as equações (3.20), temos que

$$\hat{\rho}_{0,S} = c_1^2 |\uparrow\rangle \langle\uparrow| + c_1 c_2 \hat{D}_{00}(\beta) (e^{-i\phi} |\uparrow\rangle \langle\downarrow| + e^{i\phi} |\downarrow\rangle \langle\uparrow|) + c_2^2 |\downarrow\rangle \langle\downarrow|, \qquad (3.38)$$

e conforme relação (A.29) do apêndice A, $\hat{D}_{00}(\beta) = \langle 0|\hat{D}(\beta)|0\rangle = e^{-\beta^2/2}$ e portanto:

$$\hat{\rho}_{0,S} = \begin{pmatrix} c_1^2 & c_1 c_2 e^{-(\beta^2/2 + i\phi)} \\ c_1 c_2 e^{-(\beta^2/2 - i\phi)} & c_2^2 \end{pmatrix}.$$
(3.39)

Daí temos que:

$$Tr\hat{\rho}_{0,S} = 1$$
 e $det\,\hat{\rho}_{0,S} = c_1^2(1-c_1^2)(1-e^{-\beta^2}).$ (3.40)

Calculando as raízes do polinômio característico:

$$P(\lambda) = \lambda^2 - Tr\hat{\rho}_{0,S}\,\lambda + \det\hat{\rho}_{0,S}\,,\tag{3.41}$$

obtemos os seguintes autovalores:

$$\lambda_{+} = \frac{1}{2} \left[1^{+} \sqrt{1 - 4c_{1}^{2}(1 - c_{1}^{2})(1 - e^{-\beta^{2}})} \right].$$
(3.42)

Por fim, a entropia de von Neumann do sistema é:

$$S_N = -\lambda_- \log_2 \lambda_- - \lambda_+ \log_2 \lambda_+ \,. \tag{3.43}$$

Apresentamos na fig.3.5 a entropia de Von Neumann para este estado em função do parâmetro de acoplamento G (neste caso não há α definido) e do coeficiente da combinação linear c_1 .



Figura 3.5: Entropia de von Neumann para o caso integrável em função do parâmetro de acoplamento e do coeficiente da combinação linear.

Podemos observar que o emaranhamento do sistema aumenta com G até atingir seu valor máximo $(S_N = 1)$ e que o máximo emaranhamento é obtido para uma superposição de pesos iguais dos dois estados $|\psi_0^L\rangle$ e $|\psi_0^R\rangle$. Isso se deve ao fato de que, quando consideramos $|\psi\rangle$ dado em (3.35), com $c_1 \neq 0$ e $c_2 \neq 0$, temos o emaranhamento do estado L com o estado R, enquanto que se tivermos $c_1 = 0$ ou $c_2 = 0$, não tem como haver emaranhamento já que temos apenas um produto tensorial de dois estados de espaços diferentes e, conseqüentemente, um estado separável.

(ii) Caso não integrável: neste caso, a degenerescência do sistema já foi quebrada pela atuação do campo magnético e agora o estado fundamental é único. Assim, observemos o comportamento deste estado em função do parâmetro de acoplamento G/ϵ e do parâmetro crítico α .



Figura 3.6: Entropia de von Neumann para o caso não integrável em função do parâmetro de acoplamento G/ϵ .

Nas fig. 3.6 e 3.8 apresentamos a evolução do emaranhamento do sistema em função do parâmetro de acoplamento G/ϵ para diferentes valores de Δ/ϵ . Apresentamos nestes mesmos gráficos, a título de comparação, o caso em que $\Delta/\epsilon = 0$ (curvas com círculo em preto). Nesse caso, conforme discutido no ítem anterior, escrevemos o estado fundamental como uma superposição dos dois estados degenerados e escolhemos a situação onde $c_1 = c_2$, já que nessas condições o emaranhamento como função de G/ϵ é máximo.

Da fig. 3.6 vemos que quanto maior o Δ/ϵ , maior deverá ser o acoplamento G/ϵ para que o sistema comece a ter emaranhamento. Já na fig.3.7, vemos que à medida que Δ/ϵ cresce o emaranhamento tende a ser menos suave e mais abrupto na região de $\alpha = 1$. De fato, no limite quando $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$, a curva de emaranhamento em função de α tende à da fig. 3.4. Podemos observar também que os comportamentos discutidos podem ser visualizados pela entropia linear ou entropia de von Neumann.



Figura 3.7: Entropia de von Neumann para o caso não integrável em função do parâmetro crítico α .

Para a obtenção dos resultados mostrados acima, uma vez que o sistema não possui solução analítica, realizamos o cálculo dos elementos da matriz do Hamiltoniano, diagonalização e cálculo das entropias para o estado fundamental numericamente. Com exceção do trecho relativo à diagonalização, todos os programas necessários foram construídos durante o período de realização deste trabalho, em FORTRAN77 e utilizamos uma truncagem da base do oscilador ~ 250 . Devido a uma grave instabilidade numérica, a base utilizada na programação também deve ser a base FD, diferentemente da usual base de números do oscilador harmônico simples. Os elementos advindos da não ortogonalidade da base necessitam de um tratamento cuidadoso afim de evitar divergências numéricas e deterioração dos resultados.

3.4 Análise do comportamento das energias do sistema

Dando continuidade a discussão de que o limite massivo do oscilador causaria no sistema efeitos semelhantes aos de um limite termodinâmico, é interessante observarmos também o comportamento dos níveis de energia do sistema e particularmente algumas propriedades do estado fundamental como função do parâmetro crítico α no limite quando $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$.



Figura 3.8: Entropia linear para o caso não integrável em função do parâmetro de acoplamento G/ϵ .

Na análise do espectro de energia do sistema, interessa-nos observar a presença de cruzamentos ou repulsões entre os níveis de energia, especialmente se envolverem o estado fundamental, conforme discutido na seção 2.1. Além disso, entendemos ser pertinente também uma observação mais detalhada do comportamento do estado fundamental. Como dito em 2.1, uma TFQ ocasiona uma mudança morfológica no estado fundamental do sistema. Dessa forma, se o sistema apresenta um parâmetro crítico α e se procede a suposição de que o limite $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$ causa efeitos semelhantes ao do limite termodinâmico, esperamos encontrar algum tipo de mudança no comportamento do estado fundamental na vizinhança de $\alpha = 1$ à medida que Δ/ϵ é aumentado. Na seção anterior já constatamos que o aumento de Δ/ϵ nos indica que no limite massivo o sistema apresenta uma mudança abrupta no seu emaranhamento para $\alpha = 1$, caracterizando α efetivamente como um parâmetro crítico do sistema. Resta a comprovação sobre a possível analogia entre o limite termodinâmico e o limite massivo ou $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$.

Feitas essas considerações apresentamos nas figs. 3.10, 3.11 e 3.12 os espectros de energias para os 14 primeiros níveis de energia em função de α , para $\Delta/\epsilon = 1.5$, 10.0, 30, 0 respectivamente.

No espectro para o caso $\Delta/\epsilon = 1.5$, o sistema apresenta diversas repulsões entre níveis,



Figura 3.9: Entropia linear para o caso não integrável em função do parâmetro crítico α .

mas nenhuma que envolva o estado fundamental. Alguns pontos apesar de se assemelharem muito a um cruzamento, são na realidade somente repulsão de níveis quando vistos numa escala amplificada. No caso $\Delta/\epsilon = 10.0$, podemos ver que o comportamento de repulsão entre os níveis apresentados já não existe mais. Em contrapartida, podemos ver que para valores grandes de α os níveis tendem a se degenerar dois a dois. Aumentando ainda mais o valor de Δ/ϵ como apresentado na fig. 3.12, vemos que o ponto de colapso entre os níveis vai se aproximando cada vez mais do valor $\alpha = 1$, indicando uma mudança na estrutura dos níveis de energia no valor crítico de α à medida que evoluímos para o limite $\Delta/\epsilon \to \infty$.

Analisemos agora em particular o estado fundamental. Considerando que ocorre de fato uma alteração morfológica do nível de energia, essa mudança deve se refletir de forma mais incisiva em algum outro aspecto. Seguindo a análise feita em [44], vamos observar o comportamento da derivada segunda da energia do estado fundamental, conforme apresentado no gráfico 3.13

Podemos ver claramente que com o aumento de Δ/ϵ , o mínimo da derivada segunda da energia se acentua cada vez mais, tornando-se cada vez mais estreito, sugerindo a formação de uma cúspide em $\alpha_c = 1$. No referido artigo, é possível observar que o sistema (maser de Dicke) tende a uma descontinuidade na derivada segunda da energia para o limite termodinâmico. Nesse caso, tal efeito é interpretado como uma manifestação da TFQ para o sistema



Figura 3.10: Espectro de energia em função do parâmetro crítico α para $\Delta/\epsilon = 1.5$.

em questão. No caso do modelo JT, já que não há limite termodinâmico, tal efeito, juntamente com as observações sobre o comportamento da entropia, comprova a suposição de que o limite massivo do oscilador, equivalente ao limite $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$, produz no sistema efeitos similares aos observados nos modelos com TFQ quando tomado o limite termodinâmico.



Figura 3.11: Espectro de energia em função do parâmetro crítico α para $\Delta/\epsilon = 10.0$.



Figura 3.12: Espectro de ene r
gia em função do parâmetro crítico α par
a $\Delta/\epsilon=30.0.$



Figura 3.13: Derivada segunda da energia do estado fundamental em função do parâmetro crítico α .

Capítulo 4

O Análogo Clássico do modelo de Jahn-Teller

Um recurso muito interessante no estudo de sistemas quânticos é a análise do análogo clássico do sistema em questão. Essa análise pode evidenciar aspectos da dinâmica do análogo clássico do sistema em função de parâmetros característicos e auxiliar o entendimento de fenômenos quânticos observados. Como dito na seção 2.1, acredita-se que as TFQ têm uma relação com a ocorrência de bifurcações no análogo clássico. Assim, se um sistema apresenta aspectos de uma TFQ para um determinado valor do parâmetro crítico do sistema, o análogo clássico dele apresentaria uma bifurcação para o mesmo valor ¹ do parâmetro crítico. Essa teoria já foi constatada ser verdadeira para sistemas como o modelo de Dicke [16] e para o maser integrável [18] onde temos, na análise do análogo clássico, uma bifurcação tipo 'pitchfork' para o primeiro e uma bifurcação tipo 'Hopf' para o segundo. Nosso objetivo é estudar se ocorrem bifurcações para o análogo clássico para o modelo de Jahn-Teller e para quais valores de α . Para isso, vamos começar falando sobre como calcular o análogo clássico de um sistema quântico.

4.1 Hamiltoniano clássico e equações de movimento

Com discutido na seção 2.3, o estado no qual se calcula o valor esperado do operador quântico e que reproduz o campo EM clássico é o estado coerente de oscilador harmônico;

¹ou valor λ_c para o qual tende o valor crítico quântico λ_c^q no limite clássico

para o spin que não tem uma grandeza clássica associada (mas corresponde a um momento angular), vimos que existe o estado coerente de spin que é um estado coerente de momento angular (correspondente ao grupo SU(2)) é o estado similar ao estado coerente de campo e, portanto, o mais adequado para o cálculo do análogo clássico do spin. Definidos estes dois estados, podemos calcular o análogo clássico do Hamiltoniano JT, que é dado pela média do Hamiltoniano nos estados coerentes de campo e de spin:

$$\mathcal{H} = \langle z, w | \hat{H} | z, w \rangle = \langle z, w | \hat{H}_G + \hat{H}_\Delta | z, w \rangle$$

$$= \frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}} \langle z | (\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}) | z \rangle \langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{z}} | w \rangle + \epsilon \langle z | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | z \rangle + \Delta \langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{x}} | w \rangle$$

$$= -\frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}} (z + z^*) \frac{1 - w w^*}{1 + w w^*} + \epsilon z \, z^* + \Delta \, \frac{w + w^*}{1 + w \, w^*} \,. \tag{4.1}$$

Como discutido no capítulo 2, o z e o w podem ser relacionados a coordenadas no espaço de fase. Como são espaços distintos cada um com dimensão 2, o espaço de fase total tem dimensão 4. Assim, reescrevendo em termos das coordenadas do espaço de fase total, temos que:

$$\mathcal{H} = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} \frac{q_2}{2} \left[2 - (p_1^2 + q_1^2) \right] + \frac{\epsilon}{2} (p_2^2 + q_2^2) + \Delta \frac{q_1}{2} \sqrt{4 - (p_1^2 + q_1^2)} \,. \tag{4.2}$$

Agora, podemos fazer as análises pertinentes ao estudo de sistemas clássicos. Começamos calculando as equações de Hamilton que descrevem a dinâmica clássica associada ao sistema:

$$\dot{q}_1 = p_1 \left(\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_2 - \frac{\Delta}{2} \frac{q_1}{\sqrt{4 - (p_1^2 + q_1^2)}} \right)$$
(4.3)

$$\dot{p}_1 = -q_1 \left(\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_2 - \frac{\Delta}{2} \frac{q_1}{\sqrt{4 - (p_1^2 + q_1^2)}} \right) - \frac{\Delta}{2} \sqrt{4 - (p_1^2 + q_1^2)}$$
(4.4)

$$\dot{q}_2 = \epsilon p_2 \tag{4.5}$$

$$\dot{p}_2 = \frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}} [2 - (p_1^2 + q_1^2)] - \epsilon q_2.$$
(4.6)

Pode-se observar que as equações são acopladas e que não apresentam simetrias entre si, exceto para o $\Delta = 0$. Olhemos com mais cuidado esse caso então.

4.1.1 Dinâmica no caso integrável

Para o caso integrável as equações tornam-se:

$$\dot{q}_1 = \frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} p_1 q_2 \tag{4.7}$$

$$\dot{p}_1 = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_1 q_2 \tag{4.8}$$

$$\dot{q}_2 = \epsilon p_2 \tag{4.9}$$

$$\dot{p}_2 = \frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}} [2 - (p_1^2 + q_1^2)] - \epsilon q_2.$$
(4.10)

Multiplicando por q_1 e p_1 as expressões (4.7) e (4.8) respectivamente, temos:

$$q_1 \dot{q}_1 = \frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_1 p_1 q_2 \tag{4.11}$$

$$p_1 \dot{p}_1 = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_1 p_1 q_2 \,. \tag{4.12}$$

E com estas equações pode-se mostrar que:

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}(q_1^2 + p_1^2)\right] = 0.$$
(4.13)

Dessa forma, o termo $\frac{1}{2}(q_1^2 + p_1^2) = \mathcal{H}_1$ é uma contante de movimento. Pode-se verificar facilmente que $\{\mathcal{H}, \mathcal{H}_1\} = 0$ onde $\{,\}$ é o parênteses de Poisson. Com essa constante e de (4.9) e (4.10), facilmente pode-se mostrar que:

$$p_2 = p_{20} \cos(\epsilon t + \phi_2) \tag{4.14}$$

$$q_2 = p_{20} \epsilon \sin(\epsilon t + \phi_2) + \frac{G}{\epsilon \sqrt{m\epsilon}} \left[1 - \frac{1}{2} (q_1^2 + p_1^2) \right] , \qquad (4.15)$$

onde $p_{20} e \phi_2$ são constantes associadas às condições iniciais. Essas expressões descrevem a dinâmica relacionada ao campo. Podemos ver que ambas possuem basicamente um comportamento ondulatório e q_2 é deslocada por um fator proprocional à constante de movimento E_1

Com relação a dinâmica do spin, utilizando as expressões (4.11), (4.12) e (4.13), pode-se mostrar que é descrita por:

$$q_1 = q_{10} \sin\left\{-\frac{G\epsilon}{\sqrt{m\epsilon}}p_2 + \frac{G^2}{m\epsilon^2}(1-E_1)t + \phi_1\right\}$$
(4.16)

$$p_1 = q_{10} \cos\left\{-\frac{G\epsilon}{\sqrt{m\epsilon}}p_2 + \frac{G^2}{m\epsilon^2}(1-E_1)t + \phi_1\right\},$$
(4.17)

onde q_{10} é a constante associada às condições iniciais e ϕ_1 é a constante associada a integração realizada. Notamos que aqui também as soluções têm comportamento oscilatório.

4.1.2 Dinâmica no caso não integrável

No caso não integrável, não é possível encontrarmos uma constante de movimento e a solução do sistema. Mas podemos fazer a análise do sistema através dos pontos fixos e das equações de movimento linearizadas.

Para o cálculo dos pontos fixos, fazemos a derivada temporal nula nas equações de movimento:

$$0 = p_1 \left(\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_2 - \frac{\Delta}{2} \frac{q_1}{\sqrt{4 - (p_1^2 + q_1^2)}} \right)$$
(4.18)

$$0 = -q_1 \left(\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_2 - \frac{\Delta}{2} \frac{q_1}{\sqrt{4 - (p_1^2 + q_1^2)}} \right) - \frac{\Delta}{2} \sqrt{4 - (p_1^2 + q_1^2)}$$
(4.19)

$$0 = \epsilon p_2 \tag{4.20}$$

$$0 = \frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}} [2 - (p_1^2 + q_1^2)] - \epsilon q_2.$$
(4.21)

Se considerarmos $p_1 = 0$, temos de (4.21):

$$q_2 = \frac{G}{2\epsilon\sqrt{m\epsilon}} (2 - q_1^2) \,. \tag{4.22}$$

Utilizando (4.19) e (4.22), temos que:

$$(2-q_1^2)\left[\frac{G^2}{2m\epsilon^2}q_1\sqrt{4-q_1^2}-\Delta\right] = 0.$$
(4.23)

Para o caso onde $(2 - q_1^2) = 0$, temos que os pontos fixos são:

$$q_1 = \pm \sqrt{2},$$
 $p_1 = 0,$ $q_2 = 0,$ $p_2 = 0.$ (4.24)

Para o caso onde $\left(\frac{G^2}{2m\epsilon^2}q_1\sqrt{4-q_1^2}-\Delta\right)=0$, temos que os pontos fixos são:

$$q_1 = -\left[2 \pm 2\sqrt{1 - \frac{1}{\alpha^2}}\right]^{1/2}, \quad p_1 = 0, \quad q_2 = \mp \frac{G}{\epsilon\sqrt{m\epsilon}}\sqrt{1 - \frac{1}{\alpha^2}}, \quad p_2 = 0, \quad (4.25)$$

lembrando que $\alpha = G^2/m\Delta\epsilon^2$. Com isso, podemos ver que os pontos (4.25) só estão definidos para $\frac{G^2}{m\epsilon^2\Delta} = \alpha \ge 1$. Pontos fixos que só existem para determinados valores de um certo parâmetro do sistema denotam uma bifurcação clássica e o parâmetro envolvido é chamado de parâmetro crítico do sistema. Com isso, vemos que existe uma concordância do clássico com o quântico no que se refere ao fato de α ser um parâmetro crítico. No clássico observamos uma bifurcação associada ao valor $\alpha = 1$ e para esse mesmo valor no quântico observamos que no limite quando $\Delta/\epsilon \to \infty$ o sistema passa de separável a emaranhado.

É interessante notarmos também que se fizermos os cálculo de pontos fixos para o caso integrável, os seguintes conjuntos de pontos:

$$q_1^2 + p_1^2 = 2, \qquad q_2 = 0, \qquad p_2 = 0.$$
 (4.26)

e

$$q_1 = 0,$$
 $p_1 = 0,$ $q_2 = \frac{G}{\epsilon \sqrt{m\epsilon}},$ $p_2 = 0.$ (4.27)

indicando que podemos ter um conjunto infinito de pontos que satisfazem a restrição $q_1^2 + p_1^2 = 2$ e um único ponto centrado em $q_2 = \frac{G}{\epsilon\sqrt{m\epsilon}}$. Entretanto, se tomarmos os pontos fixos (4.25), escrevermos explicitamente α em termos dos parâmetros G, m, Δ e ϵ e fizermos o limite quando $\Delta \rightarrow 0$, encontraremos os seguintes pontos:

$$q_1 = -4,$$
 $p_1 = 0,$ $q_2 = -\frac{G}{\epsilon\sqrt{m\epsilon}},$ $p_2 = 0.$ (4.28)

e

$$q_1 = 0,$$
 $p_1 = 0,$ $q_2 = \frac{G}{\epsilon \sqrt{m\epsilon}},$ $p_2 = 0.$ (4.29)

Voltando ao gráfico 3.3, vemos que esses dois pontos fixos descrevem os dois picos existentes com comportamento de afastamento à medida que G é aumentado. Como entendermos então porque esse resultado não é obtido tomando-se $\Delta = 0$ inicialmente? Para entendermos isso, vamos fazer uma analogia com um ferromagneto. Se tivermos um material ferromagético, os spins dos elétrons estarão direcionados em direções aleatórias. Quando aplicarmos um campo magnético, teremos um alinhamento desses spins e se desligarmos esse campo externo, os spins permanecerão alinhados, até que outro fator externo mude esse alinhamento. Esse alinhamento que permanece após o desligamento do campo funciona como uma espécie de "memória" do sistema. Não há mais um campo externo, mas existe um efeito remanescente da existência de um campo em um instante anterior. Algo semelhante ocorre quando tomamos o limite $\Delta \rightarrow 0$. Se fazemos $\Delta = 0$ inicialmente, o sistema não terá nenhum efeito remanescente do campo, e daí temos os pontos dados por (4.28). Porém, quando tomamos o limite, o sistema terá um efeito remanescente do campo externo associado ao Δ , o qual terá por conseqüência a geração dos pontos dados por (4.29). Com relação ao gráfico 3.3, apesarmos de termos $\Delta = 0$, temos também uma conexão entre os coeficientes da combinação linear dos autoestados degenerados e o efeito remanescente do campo associado a Δ . Observando o gráfico 3.6, temos que a curva em preto é a entropia de von Neumann para o caso $\Delta = 0$ com coeficientes da combinação linear iguais ($c_1 = c_2$), já que, conforme gráfico 3.5, quando $c_1 = c_2$ a entropia de von Neumann tem seu máximo valor (1). Mas observando as curvas para $\Delta \neq 0$ do gráfico 3.6, vemos que a curva do caso $\Delta = 0$ possui total compatibilidade com as demais e pode ser entendida como o resultado quando tomamos o limite onde $\Delta \rightarrow 0$. E as mesmas condições e parâmetros utilizados na curva da entropia de von Neumann para o caso $\Delta = 0$, foram utilizados no gráfico 3.3. Por isso, apesar destes resultados serem obtidos tomando-se $\Delta = 0$, por termos feito $c_1 = c_2$ manifesta-se um efeito residual do campo externo associado ao Δ e podemos associar os resultados dos gráficos 3.6 e 3.3 aos pontos fixos dados por (4.29).

Para entendermos a influência dos pontos fixos na vizinhança, vamos analisar as equações de movimento linearizadas em torno desses pontos. Sendo P_f um ponto fixo do sistema com coordenadas q_{10} , p_{10} , q_{20} , p_{20} as coordenadas de um ponto P na vizinhança do ponto fixo podem ser escritas como:

$$q_1 = q_{10} + \delta q_{10} \tag{4.30}$$

$$p_1 = p_{10} + \delta p_{10} \tag{4.31}$$

$$q_2 = q_{20} + \delta q_{20} \tag{4.32}$$

$$p_2 = p_{20} + \delta p_{20} \tag{4.33}$$

onde $\delta q_{10}, \delta p_{10}, \delta q_{20}, \delta p_{20}$ são pequenos deslocamentos a partir de P_f . Escrevendo as equações de movimento para esse ponto P e desprezando os termos de segunda ordem em δq e δq , temos que:

$$\dot{\delta q_1} = \frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} \,\delta p_1 \,\,\delta q_2 \tag{4.34}$$

$$\dot{\delta p_1} = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} \,\delta q_1 \,\,\delta q_2 \tag{4.35}$$

$$\dot{\delta q_2} = \epsilon \delta p_2 \tag{4.36}$$

$$\dot{\delta p_2} = \frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}} [2 - (\delta p_1^2 + \delta q_1^2)] - \epsilon \delta q_2.$$
 (4.37)

Realizando os cálculos indicados na seção 2.4.1, montamos a matriz Jacobiana e calculamos seus autovalores afim de termos um entendimento se os pontos fixos do sistema são ou não

hiperbólicos. Para os pontos fixos 4.24 conseguimos chegar a expressões analíticas fechadas para os autovalores, mas para os pontos 4.25, tivemos que fazer o cálculo numericamente. Pudemos observar que os pontos 2.4.1 têm como resultado, independente do valor de Δ/ϵ e de α , autovalores puramente imaginários, denotando que os mesmos não são pontos hiperbólicos. Para os pontos 4.25, os quais são definidos somente para $\alpha \ge 1$, obtivemos comportamento bem diferente. Exatamente quando $\alpha = 1$ estes pontos são não hiperbólicos, mas para qualquer outro valor de $\alpha > 1$, os autovalores são reais ou complexos com parte real não nula, denotando a hiperbolicidade desses pontos. Dessa forma, conforme exposto na seção 2.4.1, constatamos que o sistema apresenta somente uma possibilidade de bifurcação, a qual ocorre para $\alpha = 1$, já que os pontos fixos 4.24 existentes para $\alpha < 1$ são não hiperbólicos e os pontos 2.4.1 existentes somente para $\alpha > 1$ são hiperbólicos.

Feitos os cálculos analíticos possíveis, para fazermos uma análise mais geral da dinâmica é necessária a utilização do cálculo numérico. Apresentamos na próxima seção os resultados obtidos com o emprego desse método.

4.2 Resultados numéricos e mapas de Poincaré

Para sistemas que não apresentam solução analítica, a saída para uma análise mais geral é o cálculo numérico. A idéia é escolher uma seção no espaço de fase e, a partir de uma condição inicial arbitrária, acompanhar a partícula na sua trajetória e armazenar os pontos de interseção da trajetória com o plano escolhido. Dessa forma, as equações diferenciais que descrevem o movimento são calculadas numericamente em intervalos discretos de tempo, de forma que as trajetórias obtidas não são contínuas no espaço de fase, e de forma recursiva. Fixando o plano da seção e realizando o procedimento descrito para diferentes condições iniciais obtemos um mapa que nos permite ter um bom entendimento sobre a dinâmica geral da partícula no espaço de fase.

Voltando aos pontos fixos dados em (4.24) e (4.25), vemos que a coordenada p_1 é nula antes e depois da bifurcação. Vemos também que após a bifurcação as coordenadas q_1 e q_2 sofrem mudanças não contínuas em seus valores. Por esses motivos, escolhemos fazer a seção no plano $p_1 = 0$ e observarmos nesse plano as coordenadas q_2 e p_2 . Apresentamos na fig. 4.1 o mapa para $\Delta/\epsilon = 1.5$ antes da bifurcação. Podemos ver que no plano (q_2, p_2) existem a sobreposição de dois conjuntos de toros distintos, que correspondem a duas projeções correspondentes a superfícies distintas. Tal fato fica explícito na visualização tridimensional, mostrada na fig. 4.2. Isso ocorre porque o espaço de fase do sistema é, na realidade, quadridimensional e ao projetarmos essas trajetórias quadridimensionais no plano bidimensional podemos ter a superposição de duas superfícies distintas.



Figura 4.1: Mapa de Poincaré para $\alpha = 0.7$ e $\Delta/\epsilon = 1.5$.

Para facilitar a visualização dos mapas, entretanto, escolhemos fazer um corte no espaço de modo a termos projetado no plano somente uma das duas superfícies existentes. Na fig. 4.3 mostramos as superfícies e o plano de corte introduzido.

Apresentamos agora os mapas para $\Delta/\epsilon = 1.5$ e $\Delta/\epsilon = 10.0$ para as situações onde $\alpha = 0.5$ (antes da bifurcação), $\alpha = 1.2$ e $\alpha = 1.4$ (depois da bifurcação) com os cortes apropriados.

Antes de discutirmos os aspectos relevante de cada gráfico, é importante deixar claro que para a obtenção dos mapas mostrados, utilizamos uma normalização nas variáveis q_1 , p_1 , q_2 e p_2 cujo efeito é colocar todos os gráficos dentro da mesma escala. Ressaltamos que essa normalização não tem qualquer efeito nas características da dinâmica do sistema, somente na escala dos gráficos. O objetivo é evidenciar os aspectos da dinâmica relativos a mudança nos parâmetros α e Δ/ϵ e facilitar a comparação dos gráficos para diferentes valores desses parâmetros.



Figura 4.2: Visualização tridimensional do mapa de Poincaré para $\alpha=0.7$ e $\Delta/\epsilon=1.5.$

Na análise dos gráficos, inicialmente destacamos que para $\alpha < 1$ (figs. 4.4 e 4.7) existe um ponto fixo nos mapas e para $\alpha > 1$ (figs. 4.5, 4.6, 4.8 e 4.9) existem dois pontos fixos nos mapas mostrados. De acordo com os cálculos apresentados na seção 4.1.1, era esperado que ocorresse uma mudança não contínua na localização e quantidade de pontos fixos do sistema. Essa mudança caracteriza a bifurcação dos pontos fixos. Uma vez que temos um ponto fixo dando origem a dois outros pontos fixos, a bifurcação é do tipo 'pitchfork'.

Além disso, podemos notar que para todos os valores de Δ/ϵ os mapas apresentam um comportamento bastante regular antes da bifurcação. Entendemos que nesse caso, devido ao ponto fixo estar mais próximo de q = 0 e p = 0, a não-linearidade não é tão preponderante e o comportamento do sistema se aproxima do comportamento do oscilador harmônico. Nesse caso, o caos que ocorre é o chamado caos fino. Depois da bifurcação, os pontos fixos se afastam da origem e a não-linearidade torna-se mais importante, levando ao aparecimento de regiões caóticas maiores.

Depois da bifurcação observamos duas regiões distintas nos mapas: uma região de regularidade ao redor dos pontos fixos e uma região de caos entre elas. Analisando os mapas para $\alpha = 1.4$, vemos que não há mais a presença da região caótica ligando as duas regiões dos pontos fixos. Isso indica que o aumento de α faz com que os pontos na vizinhança da origem do espaço



Figura 4.3: Visualização tridimensional do mapa de Poincaré para $\alpha = 0.7$ e $\Delta/\epsilon = 1.5$ com o plano de corte introduzido.

de fase (q = 0 e p = 0) deixem de satisfazer as condições de energia para o estado fundamental do sistema. Nos casos onde $\alpha = 1.2$, a presença da região caótica indica a instabilidade dessa região para valores de α próximos ao valor crítico $\alpha = 1$. É importante ressaltar que como os comportamentos destacados são observados para todos os valores de Δ/ϵ , o parâmetro que efetivamente controla a existência da região caótica é α .

A luz dos gráficos da entropia linear e de von Neumann em função de α (fig. 3.7 e 3.9), podemos observar que para $\alpha = 0.7$, os valores das entropias de von Neumann para $\Delta/\epsilon =$ 1.5, 10.0 são aproximadamente 0.24 e 0.1 respectivamente. Entretanto, essa diferença não se reflete de forma tão clara no gráfico devido a regularidade que o mesmo apresenta. Para $\alpha = 1.2$, os valores das entropias de von Neumann para $\Delta/\epsilon = 1.5$, 10.0 são aproximadamente 0.4 e 0.3 respectivamente. Neste caso, podemos notar uma diferença sutil na região de caos. Com relação ao caso onde $\alpha = 1.4$, os valores das entropias de von Neumann para $\Delta/\epsilon = 1.5$, 10.0 já são bem mais próximos uns dos outros, aproximadamente 0.46 e 0.5; devido a proximidade dos valores das entropias, as diferenças são extremamente suaves. Entretanto, de forma global, podemos observar que os menores valores da entropia estão associados a $\alpha = 0.7$, e nesse caso os mapas apresentam uma dominância do comportamento regular. No caso de $\alpha = 1.2$



Figura 4.4: Mapa de Poincaré para $\alpha = 0.7$ e $\Delta/\epsilon = 1.5$.

onde temos um aumento no valor da entropia, temos um comportamento bastante regular em torno dos pontos fixos e um forte comportamento caótico ligando as duas regiões. Mas além dessa região caótica, podemos observar a incidência de caos na região mais externa às regiões regulares. Esse comportamento não era observado anteriormente. E para o caso onde $\alpha = 1.4$ onde a entropia tem seu valor aumentado, notamos o desapareciemnto da região caótica ligando as regiões dos pontos fixos; em contrapartida, observamos o aumento do caos em torno das regiões regulares. Dessa forma, podemos ver que existe uma relação entre o aumento no valor da entropia e o aumento na incidência de caos na vizinhança dos pontos fixos do sistema.

4.3 Análise do análogo clássico na esfera de Bloch

Como discutido na seção 2.3 podemos associar ao parâmetro w do ECS tanto as coordenadas no espaço de fase plano quanto as coordenadas na esfera de Bloch. Assim, uma outra forma de expressar o análogo clássico é [5]:

$$\mathcal{H} = \frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q \, s_z + \frac{\epsilon}{2} (p^2 + q^2) + \Delta \, s_x. \tag{4.38}$$

O dificultador dessa abordagem é que o espaço de fase total é composto de duas coordenadas planas e duas angulares. Para fins de comparação com os resultados obtidos considerando a



Figura 4.5: Mapa de Poincaré para $\alpha = 1.2$ e $\Delta/\epsilon = 1.5$.

planificação da esfera, podemos calcular as equações de movimento e os pontos fixos na esfera de Bloch. Nesse caso temos que as equações de movimento são dadas por:

$$\dot{q} = \epsilon p \tag{4.39}$$

$$\dot{p} = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}}s_z - \epsilon q \tag{4.40}$$

$$\dot{s_x} = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}}qs_y \tag{4.41}$$

$$\dot{s_y} = \frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q s_x - \Delta s_z \tag{4.42}$$

$$\dot{s_z} = \Delta s_y \,, \tag{4.43}$$

onde as coordenadas da esfera estão sujeitas ao vínculo $s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = 1$. E para o cálculo dos pontos fixos, novamente fazendo a derivada temporal nula, temos:

$$0 = \epsilon p \tag{4.44}$$

$$0 = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}}s_z - \epsilon q \tag{4.45}$$

$$0 = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}}qs_y \tag{4.46}$$

$$0 = \frac{G}{\sqrt{m\epsilon}}qs_x - \Delta s_z \tag{4.47}$$

$$0 = \Delta s_y \,, \tag{4.48}$$



Figura 4.6: Mapa de Poincaré para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 1.5$.

o que nos leva aos pontos

$$q = 0$$
 $p = 0$, $s_x = \pm 1$, $s_y = 0$, $s_z = 0$, (4.49)

válidos para quaisquer valores de α , e os pontos

$$q = -\sqrt{\frac{\Delta\alpha}{\epsilon}} s_z, \quad p = 0, \quad s_x = -\frac{1}{\alpha}, \quad s_y = 0, \quad s_z = \pm\sqrt{1 - \frac{1}{\alpha^2}},$$
 (4.50)

para $\alpha \ge 1$. Apresentamos na fig. 4.10 uma figura esquemática com três das cincos coordenadas para uma melhor visualização da bifurcação dos pontos fixos.

Utilizando as relações (2.33), temos que os pontos fixos (4.49) projetados no plano são:

$$q_1 = \pm \sqrt{2},$$
 $p_1 = 0,$ $q_2 = 0,$ $p_2 = 0.$ (4.51)

e os pontos fixos (4.50) são:

$$q_{1} = -\left[2 \pm 2\sqrt{1 - \frac{m^{2}\epsilon^{4}\Delta^{2}}{G^{4}}}\right]^{1/2}, \quad p_{1} = 0, \quad q_{2} = \mp \frac{G}{\epsilon\sqrt{m\epsilon}}\sqrt{1 - \frac{m^{2}\epsilon^{4}\Delta^{2}}{G^{4}}}, \quad p_{2} = 0.$$
(4.52)

Comparando com as expressões (4.24) e (4.25) vemos que as duas representações estão em perfeito acordo.



Figura 4.7: Mapa de Poincaré para $\alpha=0.7$ e $\Delta/\epsilon=10.0.$



Figura 4.8: Mapa de Poincaré para $\alpha=1.2$ e $\Delta/\epsilon=10.0.$



Figura 4.9: Mapa de Poincaré para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 10.0.$



Figura 4.10: Figura esquemática da bifurcação considerando as coordenadas na superfície esférica de Bloch.
Capítulo 5

Função de Husimi do modelo de Jahn-Teller

Como discutido na seção 2.5, o interesse nas funções de quasi-probabilidade vai além da possibilidade de se ter uma ilustração do estado quântico de interesse; podemos fazer uma comparação entre os resultados quânticos com os do análogo clássico. Já tendo apresentado anteriormente as funções de quasi-probabilidade e, mais especificamente, a função de Husimi, discutiremos agora os resultados para o modelo de Jahn-Teller $E \otimes \beta$ em conexão com os resultados obtidos no capítulo anterior para o análogo clássico.

5.1 A função de Husimi no caso integrável

Como apresentado anteriormente, a função de Husimi Q do campo é obtida calculando-se o valor esperado da matriz densidade do campo $\hat{\rho}_s$ sobre um estado coerente $|\gamma\rangle$, na forma:

$$Q(q,p) = \frac{\langle \gamma | \hat{\rho}_s | \gamma \rangle}{2\pi} \,. \tag{5.1}$$

No caso integrável do modelo de JT, a função de onda do estado fundamental é dada por:

$$|\psi_0\rangle = c_1 |\psi_0^L\rangle + c_2 |\psi_0^R\rangle, \qquad (5.2)$$

onde $|\psi_0^L\rangle = |\chi_0\rangle \otimes |\uparrow\rangle$ e $|\psi_0^R\rangle = |\chi_0\rangle \otimes |\downarrow\rangle$. Como a matriz densidade é $\hat{\rho} = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$, logo a matriz densidade do campo é:

$$\hat{\rho}_{s} = \sum_{\nu} \langle s_{\nu} | \hat{\rho} | s_{\nu} \rangle = |c_{1}|^{2} | \chi_{0}^{L} \rangle \langle \chi_{0}^{L} | + |c_{2}|^{2} | \chi_{0}^{R} \rangle \langle \chi_{0}^{R} | .$$
(5.3)

Assim

$$Q(q,p) = \frac{\langle \gamma | \hat{\rho} | \gamma \rangle}{2\pi} = |c_1|^2 \langle \gamma | \chi_0^L \rangle \langle \chi_0^L | \gamma \rangle + |c_2|^2 \langle \gamma | \chi_0^R \rangle \langle \chi_0^R | \gamma \rangle .$$
(5.4)

Utilizando a definição de estado coerente de campo dada em (2.25) e a eq.(A.21) do apêndice A, temos que a função de Husimi do estado fundamental no caso integrável é dada por:

$$Q(q,p) = \frac{1}{2\pi} \left(\left| c_1 \right|^2 e^{-Gq} + \left| c_2 \right|^2 e^{Gq} \right) e^{-(G^2 + q^2 + p^2)/2} \,. \tag{5.5}$$

Para $c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2}$, a expressão se reduz a:

$$Q(q,p) = \frac{1}{2\pi} e^{-(G^2 + q^2 + p^2)/2} \cosh(Gq).$$
(5.6)

Neste caso temos o mesmo comportamento apresentado na fig. 3.3, onde para o G = 0 as funções do oscilador deslocadas para a esquerda $\chi_o^L(q)$ e para a direita $\chi_0^R(q)$ estão superpostas e centradas em (0,0) e com o aumento do valor do parâmetro de acoplamento G as funções de onda vão se separando e se distanciando no eixo das coordenadas, da origem do espaço de fase.

5.2 A função de Husimi no caso não integrável

Para o caso não integrável, o estado fundamental é escrito em termos da base do caso integrável na forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{m,\mu} c_m^{\mu} |\psi_m^{\mu}\rangle, \qquad (5.7)$$

onde $|\psi_m^{\mu}\rangle = |\chi_m^{\mu}\rangle \otimes |s_{\mu}\rangle$. Segue-se então que a matriz densidade reduzida do campo é dada por:

$$\hat{\rho}_c = \sum_{\nu} \langle s_{\nu} | \hat{\rho} | s_{\nu} \rangle = \sum_{\substack{m,n \\ \mu}} c_m^{\mu} c_n^{\mu} | \chi_m^{\mu} \rangle \langle \chi_m^{\mu} | , \qquad (5.8)$$

e por conseqüência, temos:

$$Q(q,p) = \frac{\langle \gamma | \hat{\rho} | \gamma \rangle}{2\pi} = \sum_{\substack{m,n \\ \mu}} c_m^{\mu} c_n^{\mu} \langle \gamma | \chi_m^{\mu} \rangle \langle \chi_n^{\mu} | \gamma \rangle .$$
(5.9)

De forma análoga ao feito no caso integrável, temos enfim que a função de Husimi é dada por:

$$Q(q,p) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m,n} \left[e^{-|z_L|^2} c_m^L c_n^L \frac{(z_L^*)^m}{\sqrt{m!}} \frac{(z_L)^n}{\sqrt{n!}} + e^{-|z_R|^2} c_m^R c_n^R \frac{(z_R^*)^m}{\sqrt{m!}} \frac{(z_R)^n}{\sqrt{n!}} \right],$$
(5.10)

onde $z_L = \gamma + \beta/2$ e $z_R = \gamma - \beta/2$.

Apresentamos nas figuras 5.1 a 5.6 as funções de Husimi correspondentes aos mapas 4.4 a 4.9 do capítulo anterior. Aqui apresentamos também as funções de Husimi para o caso $\Delta/\epsilon =$ 30.0. Como o exposto no capítulo anterior sobre a grande semelhança entre os mapas para diferentes valores de Δ/ϵ , as funções de Husimi para o caso $\Delta/\epsilon = 30.0$ podem ser analisadas em comparação com os mapas para $\Delta/\epsilon = 1.5$ ou $\Delta/\epsilon = 10.0$, respeitando-se o valor em questão de α . Podemos observar que para todos os valores de Δ/ϵ , em $\alpha = 0.7$ todos os gráficos estão centrados no zero, como era esperado pela análise das seções 4.4, 4.7 e pelo cálculo dos pontos fixos. Para valores de α depois da bifurcação ($\alpha > 1$), podemos notar que à medida que aumentamos Δ/ϵ , os pacotes têm sua largura diminuída, e para os casos $\Delta/\epsilon = 10.0$ e $\Delta/\epsilon = 30.0$, podemos ver com clareza que os picos das funções de Husimi se localizam na mesma região dos pontos fixos mostrados nas figuras 4.8 e 4.9. Para facilitar essa visualização, apresentamos as fig. 5.7, 5.10 e 5.12 que mostram uma vista de perfil das funções de Husimi para os casos $\Delta/\epsilon = 10.0$, $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 30.0$, $\alpha = 1.2$ e $\alpha = 1.4$. Considerandose que ao caminharmos para o limite clássico de um sistema, a largura do pacote de onda deve ser diminuída, o comportamento observado nos gráficos apresentados está em acordo com a discussão realizada no ítem 3.3, onde foi posto que o limite massivo, ou limite clássico, do oscilador obtido no limite quando $m \to \infty$ pode ser conseguido de forma equivalente se tomarmos o limite quando $\Delta/\epsilon \to \infty$. Na seção 3.3, observamos indícios de que a entropia de von Neumann apresenta um comportamento que tende a uma curva não-suave no limite quando $\Delta/\epsilon \to \infty$. Como previsto por Levine [12], no limite massivo (clássico) do sistema, a entropia de von Neumann seria de fato uma curva não-suave. Dessa forma, podemos ver que existe uma concordância nos resultados no que se refere ao limite clássico do sistema, já que as funções de Husimi apresentam um comportamento de diminuição da largura do pacote no limite quando $\Delta/\epsilon \to \infty$, os quais, por sua vez estão centrados sobre os pontos fixos apresentados nas seções de Poincaré do cap.4 e para esse mesmo limite de Δ/ϵ a entropia de von Neumann apresenta um comportamento que indica tendência à curva não suave prevista por Levine. Entendemos que todos esse resultados em acordo denotam que o limite $\Delta/\epsilon \to \infty$ é equivalente ao limite clássico do oscilador.



Figura 5.1: Função de Husimi para $\alpha=0.7$
e $\Delta/\epsilon=1.5.$



Figura 5.2: Função de Husimi para $\alpha = 1.2$
e $\Delta/\epsilon = 1.5.$



Figura 5.3: Função de Husimi para $\alpha=1.4$
e $\Delta/\epsilon=1.5.$



Figura 5.4: Função de Husimi para $\alpha=0.7$
e $\Delta/\epsilon=10.0.$



Figura 5.5: Função de Husimi para $\alpha=1.2$
e $\Delta/\epsilon=10.0.$



Figura 5.6: Função de Husimi para $\alpha = 1.4$
e $\Delta/\epsilon = 10.0.$



Figura 5.7: Função de Husimi vista de perfil
 para $\alpha=1.4$ e $\Delta/\epsilon=10.0.$



Figura 5.8: Função de Husimi para $\alpha=0.7$
e $\Delta/\epsilon=30.0.$



Figura 5.9: Função de Husimi para $\alpha=1.2$
e $\Delta/\epsilon=30.0.$



Figura 5.10: Função de Husimi vista de perfil para $\alpha=1.2$ e $\Delta/\epsilon=30.0.$



Figura 5.11: Função de Husimi para $\alpha = 1.4$ e $\Delta/\epsilon = 30.0.$



Figura 5.12: Função de Husimi vista de perfil para $\alpha=1.4$ e $\Delta/\epsilon=30.0.$

Capítulo 6

Conclusão

Estudamos neste trabalho os aspectos relativos ao emaranhamento, bifurcação e incidência de caos no modelo de Jahn-Teller $E \otimes \beta$. Buscamos também aspectos em comum da análise quântica e clássica, de forma que pudéssemos estabelecer paralelos entre os fenômenos quânticos e clássicos. Utilizamos como elemento-chave nessa conexão uma função de quasi-probabilidade, a função de Husimi.

No que tange ao emaranhamento, confirmamos as observações já registradas na literatura sobre uma mudança de comportamento no emaranhamento como função do parâmetro crítico do sistema α , particularmente no valor de $\alpha = 1$. Conforme previsto por Levine e Muthukumar [12], a entropia deve apresentar uma descontinuidade em $\alpha = 1$ no limite quando $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$.

Constatamos também ser válida a afirmativa feita por Hines [4] de que o limite clássico do oscilador obtido quando $m \to \infty$ pode ser obtido também se fizermos o limite quando $\Delta/\epsilon \to \infty$.

Com os dois pontos destacados acima, pudemos constatar que apesar de o sistema não apresentar um limite termodinâmico, ele apresenta um comportamento de descontinuidade da entropia no limite quando $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$ de forma análoga ao que é observado para o maser de Dicke [16] no limite termodinâmico do mesmo.

Em relação a análise clássica, confirmamos a existência de uma bifurcação tipo 'pitchfork' associada ao parâmetro crítico α , para $\alpha = 1$. Utilizamos para a análise clássica duas representações equivalentes: a representação na esfera de Bloch e a representação no espaço de fase plano. Os resultados obtidos em uma representação têm total convergência com os obtidos

CAPÍTULO 6. CONCLUSÃO

na outra, como já era esperado. Entretanto, com a utilização da representação no plano pudemos fazer um estudo do aparecimento de caos no modelo, estudo este que não encontramos registro na literatura para o modelo aqui estudado. Constatamos que existem dois regimes de aparecimento de caos com origens distintas. Em um caso, temos o caos associado a criticalidade do parâmetro α , ligando as duas regiões de estabilidade surgidas após a bifurcação. Essa região caótica desaparece à medida que saímos da vizinhança do valor crítico $\alpha = 1$. Outro caso está associado ao aparecimento de caos em torno das regiões regulares. Neste caso, a região caótica se localiza em torno dos pontos fixos estáveis e cresce à medida que aumentamos o valor de α .

As funções de Husimi também foram de grande utilidade na conexão entre os aspectos quântico e clássico. Observamos a concordância entre a localização dos pacotes de onda quântico do estado fundamental e a localização dos pontos fixos clássicos. Pudemos utilizala também para ratificar a afirmação feita sobre a equivalência dos dois limites para a obtenção do limite clássico. De fato, o comportamento observado por nós à medida que o valor de Δ/ϵ é aumentado está em acordo com o previsto pela literatura quando se toma o limite clássico de determinado sistema, confirmando que o limite $\Delta/\epsilon \rightarrow \infty$ também é válido para o estudo do limite do oscilador clássico.

Apêndice A

Relações úteis de de operadores, estados coerentes e base de Fock deslocada

A.1 Operadores criação e aniquilação

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\,\hat{p}) \qquad \hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} - i\,\hat{p})$$
(A.1)

$$\hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}) \qquad \hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^{\dagger} - \hat{a})$$
 (A.2)

$$\hat{a}^{\dagger} \hat{a} = \frac{1}{2} (\hat{q}^2 + \hat{p}^2 + i [\hat{q}, \hat{p}])$$
 (A.3)

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \mathbf{i} \tag{A.4}$$

$$\hat{a}^{\dagger} \hat{a} = \frac{1}{2} (\hat{q}^2 + \hat{p}^2 - 1)$$
 (A.5)

$$\hat{p} = \frac{1}{i} \frac{d}{dq} \tag{A.6}$$

$$\hat{a}^{\dagger} \,\hat{a} = -\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dq^2} - \hat{q}^2 + 1 \right) \tag{A.7}$$

$$[\hat{a}, \hat{a}] = 0 = [\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}^{\dagger}] \qquad [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1$$
 (A.8)

A.2 Matrizes de Pauli

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_{-} + \hat{\sigma}_{+}) \tag{A.9}$$

$$\hat{\sigma}_{-}|\downarrow\rangle = 0 \qquad \hat{\sigma}_{+}|\downarrow\rangle = 2|\uparrow\rangle$$
(A.10)

$$\hat{\sigma}_{-}|\uparrow\rangle = 2|\downarrow\rangle \qquad \hat{\sigma}_{+}|\downarrow\rangle = 0$$
(A.11)

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{x}}|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \qquad \hat{\sigma}_{\mathbf{x}}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$$
(A.12)

$$\langle \hat{s}_{\mu} | \hat{\sigma}_{\mathbf{x}} | \hat{s}_{\nu} \rangle = 1 - \delta_{\mu\nu} \tag{A.13}$$

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{z}}|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle \qquad \hat{\sigma}_{\mathbf{z}}|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$$
(A.14)

$$\langle \hat{s}_{\mu} | \hat{\sigma}_{\mathbf{z}} | \hat{s}_{\nu} \rangle = \lambda_{\mu} \delta_{\mu\nu} \tag{A.15}$$

 $\operatorname{com} \lambda_L = +1 \operatorname{e} \lambda_R = -1$

A.3 Operador deslocamento

$$\hat{D}(\beta) = e^{(\beta \hat{a}^{\dagger} - \beta^* \hat{a})} \tag{A.16}$$

$$\hat{D}^{\dagger}(\beta) = e^{(\beta^* \hat{a} - \beta \hat{a}^{\dagger})} = \hat{D}(-\beta)$$
(A.17)

$$\hat{D}^{-1}(\beta) = \hat{D}^{\dagger}(\beta)$$
(A.17)
$$\hat{D}^{-1}(\beta) = \hat{D}^{\dagger}(\beta)$$
(A.18)

$$\hat{D}^{-1}(\beta)\hat{a}\hat{D}(\beta) = \hat{a} + \beta$$
 $\hat{D}^{-1}(\beta)\hat{a}^{\dagger}\hat{D}(\beta) = \hat{a}^{\dagger} + \beta^{*}$ (A.19)

Utilizando as duas últimas propriedades, pode-se mostrar que:

$$\hat{D}^{-1}(\beta)\hat{a}^{\dagger}\,\hat{a}\hat{D}(\beta) = (\hat{a}^{\dagger} + \beta^{*})(\hat{a} + \beta)$$
(A.20)

$$\hat{D}(\alpha)\hat{D}(\beta) = e^{(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta)/2}\hat{D}(\alpha + \beta)$$
(A.21)

A.4 Estados coerentes de oscilador harmônico e de spin

Conforme [45]os valores médios nos ECOH e ECS dos operadores de campo EM e de spin são dados por:

$$\langle z|\hat{a}|z\rangle = z \tag{A.22}$$

$$\langle z|\hat{a}^{\dagger}|z\rangle = z^{*} \tag{A.23}$$

$$\langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{z}} | w \rangle = -J \frac{1 - ww^*}{1 + ww^*} \tag{A.24}$$

$$\langle w|\hat{\sigma}_+|w\rangle = \frac{2w^*}{1+ww^*} \tag{A.25}$$

$$\langle w|\hat{\sigma}_{-}|w\rangle = \frac{2w}{1+ww^*} \tag{A.26}$$

(A.27)

A.5 Base de Fock Deslocada

Abaixo demonstramos o cálculo dos produtos internos dos estados da base de Fock deslocada dados por:

$$\langle \chi_m^{\mu} | \chi_n^{\mu} \rangle = \delta_{m,n} \qquad \mu = L \text{ ou } R.$$
(A.28)

e

$$\langle \chi_m^L | \chi_n^R \rangle = \langle m | D(\beta) | n \rangle = \sqrt{\frac{n!}{m!}} \beta^{m-n} e^{-\beta^2/2} L_n^{m-n}(\beta^2) .$$
 (A.29)

Para $\mu = \nu = L$ ou $\mu = \nu = R$, temos:

$$\langle \chi_m^\mu | \chi_n^\mu \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq \, \chi_m^\mu(q) \chi_n^\mu(q) \,, \tag{A.30}$$

onde

$$\chi_n^{\mu}(q) = \chi_n(q \pm \eta) = a_n e^{-(q \pm \eta)^2/2} H_n(q \pm \eta), \qquad (A.31)$$

com o sinal positivo associado a L e o negativo a R e os coeficientes a_n dados por:

$$a_n = \frac{1}{\pi^{1/4} 2^{n/2} \sqrt{n!}} \,. \tag{A.32}$$

Substituindo estes termos e fazendo uma mudança de variável através da relação:

$$x = q \pm \eta \,, \tag{A.33}$$

APÊNDICE A. RELAÇÕES ÚTEIS DE DE OPERADORES, ESTADOS COERENTES E BASE DE FOCK DES temos que:

$$\langle \chi_m^{\mu} | \chi_n^{\mu} \rangle = a_m \, a_n \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) \,. \tag{A.34}$$

A integral acima é tabelada, de forma que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-x^2} H_m(x) H_n x = 2^n \, n! \, \sqrt{\pi} \, \delta_{m,n} \,. \tag{A.35}$$

Assim,

$$\langle \chi_m^{\mu} | \chi_n^{\mu} \rangle = \delta_{m,n} \qquad \mu = L \text{ ou } R.$$
(A.36)

Para $\mu = L e \nu = R$,

$$\langle \chi_{m}^{L} | \chi_{n}^{R} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq \, \chi_{m}^{L}(q) \chi_{n}^{R}(q)$$

= $a_{m} \, a_{n} \, e^{-\eta^{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dq \, e^{-q^{2}} H_{m}(q+\eta) H_{n}(q-\eta) \,.$ (A.37)

esta última integral também é tabelada,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-x^2} H_m(x+y) H_n(x+z) = 2^n \sqrt{\pi} \, m \, ! \, z^{n-m} L^{n-m}_m(-2y \, z)$$

$$(m \leqslant n) \,, \tag{A.38}$$

onde L_m^{n-m} são as funções de Laguerre generalizadas dadas por:

$$L_n^{\alpha} = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n+\alpha}{n-k} \frac{x^k}{k!} \,. \tag{A.39}$$

Utilizando o resultado desta integral e fazendo as alterações pertinentes temos:

$$\langle \chi_m^L | \chi_n^R \rangle = 2^{(n-m)/2} \sqrt{\frac{m!}{n!}} e^{-\eta^2} \left(-\eta \right)^{n-m} L^{n-m}_m(2\eta^2) \,. \tag{A.40}$$

Realizando a transformação de variáveis,

$$\beta^2 = 2\eta^2 \qquad \eta = \frac{\beta}{\sqrt{2}} \tag{A.41}$$

temos que

$$\langle \chi_m^L | \chi_n^R \rangle = (-1)^{n-m} \sqrt{\frac{m!}{n!}} \beta^{n-m} e^{-\beta^2/2} L_m^{n-m}(\beta^2) \qquad (m \leqslant n) \,.$$
 (A.42)

Apêndice B

Cálculo dos pontos fixos do análogo clássico

A Hamiltoniana do sistema é dada por:

$$\mathcal{H} = \Delta \langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{x}} | w \rangle + \frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}} \langle z | (\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}) | z \rangle \langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{z}} | w \rangle + \epsilon \langle z | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | z \rangle .$$
(B.1)

As seguintes relações são válidas:

$$\langle z|\hat{a}|z\rangle = z \qquad \langle z|\hat{a}^{\dagger}|z\rangle = z^{*},$$
 (B.2)

e

$$\langle w|\hat{\sigma}_{+}|w\rangle = \frac{2w^{*}}{1+ww^{*}} \qquad \langle w|\hat{\sigma}_{-}|w\rangle = \frac{2w}{1+ww^{*}} \qquad \langle w|\hat{\sigma}_{\mathbf{z}}|w\rangle = -\frac{1-ww^{*}}{1+ww^{*}}.$$
(B.3)

Com o uso de B.2, temos que

$$\langle z | (\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}) | z \rangle = z + z^* \tag{B.4}$$

e

$$\langle z|\hat{a}^{\dagger}\,\hat{a}|z\rangle = zz^*\,.\tag{B.5}$$

Escrevendo $\hat{\sigma}_x$ em termos de $\hat{\sigma}_-$ e $\hat{\sigma}_+$, podemos calcular

$$\langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{x}} | w \rangle = \frac{1}{2} (\langle w | \hat{\sigma}_{-} | w \rangle + \langle w | \hat{\sigma}_{+} | w \rangle).$$
(B.6)

Com o uso de B.3, temos que

$$\langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{x}} | w \rangle = \frac{1}{2} \frac{2}{1 + w w^*} (w + w^*) ,$$
 (B.7)

ou seja

$$\langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{x}} | w \rangle = \frac{w + w^*}{1 + w w^*} \,. \tag{B.8}$$

Considerando as seguintes relações:

$$z = \frac{q_2 + i p_2}{\sqrt{2}} \qquad w = \frac{q_1 + i p_1}{\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}},$$
 (B.9)

temos que

$$z^* + z = \sqrt{2} q_2$$
 $zz^* = \frac{1}{2} (q_2^2 + p_2^2),$ (B.10)

e

$$w^* + w = \frac{2q_1}{\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}} \qquad ww^* = \frac{q_1^2 + p_1^2}{4 - (q_1^2 + p_1^2)}.$$
 (B.11)

Com B.11, podemos calcular

$$1 + ww^* = \frac{4}{4 - (q_1^2 + p_1^2)} \qquad 1 - ww^* = \frac{4 - 2(q_1^2 + p_1^2)}{4 - (q_1^2 + p_1^2)}.$$
 (B.12)

Com B.10,B.11 e B.12, temos que

$$\langle z|(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a})|z\rangle = \sqrt{2}\,q_2 \tag{B.13}$$

$$\langle z|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|z\rangle = \frac{1}{2}(q_2{}^2 + p_2{}^2)$$
 (B.14)

$$\langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{x}} | w \rangle = \frac{q_1}{2} \sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}$$
 (B.15)

$$\langle w | \hat{\sigma}_{\mathbf{z}} | w \rangle = \frac{1}{2} [(q_1^2 + p_1^2) - 2].$$
 (B.16)

Logo a Hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = \frac{\Delta}{2} q_1 \sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)} + \frac{G}{\sqrt{2m\epsilon}} \sqrt{2} q_2 \frac{1}{2} [(q_1^2 + p_1^2) - 2] + \frac{\epsilon}{2} (q_2^2 + p_2^2), \quad (B.17)$$

ou seja,

$$\mathcal{H} = \frac{\Delta}{2} q_1 \sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)} + \frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}} q_2 \left[(q_1^2 + p_1^2) - 2 \right] + \frac{\epsilon}{2} (q_2^2 + p_2^2) \,. \tag{B.18}$$

Com as equações de Hamilton:

$$\dot{q}_1 = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_1} \qquad \dot{p}_1 = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_1}$$
 (B.19)

$$\dot{q}_2 = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_2} \qquad \dot{p}_2 = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_2},$$
(B.20)

podemos calcular as equações de movimento para o sistema.

$$\dot{q}_1 = -\frac{\Delta}{2} q_1 \frac{2p_1}{2\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}} + \frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}} q_2 (2p_1)$$
(B.21)

$$\dot{q}_1 = p_1 \left[\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_2 - \frac{\Delta}{2} \frac{q_1}{\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}} \right]$$
 (B.22)

$$\dot{p}_{1} = -\left[\frac{\Delta}{2}\sqrt{4 - (q_{1}^{2} + p_{1}^{2})} - \frac{\Delta}{2}q_{1}\frac{2q_{1}}{2\sqrt{4 - (q_{1}^{2} + p_{1}^{2})}} + \frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}}q_{2}(2q_{1})\right]$$
(B.23)

$$\dot{p}_1 = -\left\{q_1\left[\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}}q_2 - \frac{\Delta}{2}\frac{q_1}{\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}}\right] + \frac{\Delta}{2}\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}\right\}$$
(B.24)

$$\dot{q}_2 = \epsilon p_2 \tag{B.25}$$

$$\dot{p}_2 = -\left\{\frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}}[(q_1^2 + p_1^2) - 2] + \epsilon q_2\right\}.$$
(B.26)

Em resumo,

$$\dot{q}_1 = p_1 \left[\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_2 - \frac{\Delta}{2} \frac{q_1}{\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}} \right]$$
(B.27)

$$\dot{p}_1 = -\left\{q_1\left[\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}}q_2 - \frac{\Delta}{2}\frac{q_1}{\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}}\right] + \frac{\Delta}{2}\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}\right\}$$
(B.28)

$$\dot{q}_2 = \epsilon p_2 \tag{B.29}$$

$$\dot{p}_2 = -\left\{\frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}}[(q_1^2 + p_1^2) - 2] + \epsilon q_2\right\}.$$
(B.30)

Para obtermos os pontos fixos, fazemos

$$\dot{q}_1 = 0, \qquad \dot{p}_1 = 0, \qquad \dot{q}_2 = 0, \qquad \dot{p}_2 = 0.$$
 (B.31)

Temos o seguinte sistema de equações acopladas:

$$p_1 \left[\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_2 - \frac{\Delta}{2} \frac{q_1}{\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}} \right] = 0$$
(B.32)

$$q_1 \left[\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_2 - \frac{\Delta}{2} \frac{q_1}{\sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)}} \right] + \frac{\Delta}{2} \sqrt{4 - (q_1^2 + p_1^2)} = 0$$
(B.33)

$$p_2 = 0 \tag{B.34}$$

$$\frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}}[(q_1^2 + p_1^2) - 2] + \epsilon q_2 = 0.$$
(B.35)

Observe que $p_2 = 0$ para todos os casos.

caso 1: $p_1 = 0$

$$q_1 \left(\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}} q_2 - \frac{\Delta}{2} \frac{q_1}{\sqrt{4 - q_1^2}}\right) + \frac{\Delta}{2} \sqrt{4 - q_1^2} = 0$$
(B.36)

$$\frac{G}{2\sqrt{m\epsilon}}(q_1^2 - 2) + \epsilon q_2 = 0.$$
 (B.37)

Podemos reescrever estas equações como:

$$\sqrt{4 - q_1^2} - \frac{q_1^2}{\sqrt{4 - q_1^2}} = -\frac{2G}{\sqrt{m\epsilon}\Delta} q_1 q_2$$
(B.38)

$$2 - q_1^2 = \frac{2\epsilon\sqrt{m\epsilon}}{G} q_2, \qquad (B.39)$$

ou ainda:

$$\frac{2-q_1^2}{\sqrt{4-q_1^2}} = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon\Delta}} q_1 q_2$$
(B.40)

$$2 - q_1^2 = \frac{2\epsilon\sqrt{m\epsilon}}{G}q_2 \tag{B.41}$$

substituindo a segunda equação, temos:

$$\frac{2\epsilon\sqrt{m\epsilon}}{G}\frac{q_2}{\sqrt{4-q_1^2}} = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}\Delta}q_1q_2.$$
 (B.42)

82

Logo temos dois subcasos:

Subcaso 1.1 $q_2 = 0$

$$q_1^2 = 2.$$
 (B.43)

Solução do subcaso 1.1: primeiro ponto crítico.

$$q_1 = \bar{+}\sqrt{2}$$
 $p_1 = 0$ $q_2 = 0$ $p_2 = 0$. (B.44)

subcaso 1.2 $q_2 \neq 0$

$$\frac{2\epsilon\sqrt{m\epsilon}}{G}\frac{1}{\sqrt{4-q_1^2}} = -\frac{G}{\sqrt{m\epsilon}\Delta}q_1, \qquad (B.45)$$

que podemos reescrever como:

$$\frac{2}{\sqrt{4-q_1^2}} = -\frac{G^2}{m\epsilon^2 \Delta} q_1 \,, \tag{B.46}$$

onde $G^{\scriptscriptstyle 2}/(m\epsilon^{\scriptscriptstyle 2}\Delta)=\alpha$ e

$$\frac{2}{\sqrt{4-q_1^2}} = -\alpha \, q_1 \,. \tag{B.47}$$

(Note que $q_1 < 0$ para satisfazer esta igualdade.) Elevando ao quadrado ambos os lados desta equação,

$$\frac{4}{4-q_1^2} = \alpha^2 q_1^2, \qquad (B.48)$$

ou seja

$$q_1^4 - 4 q_1^2 + \left(\frac{2}{\alpha}\right)^2 = 0.$$
 (B.49)

Esta equação tem as seguintes soluções:

$$q_1^{\ 2} = \frac{4^+_- \sqrt{16^2 - \frac{16}{\alpha^2}}}{2} , \qquad (B.50)$$

que pode ser reescrita como:

$$q_1^2 = 2^+_- 2\sqrt{1 - \frac{1}{\alpha^2}}$$
 (B.51)

Solução do subcaso 1.2:

$$q_1 = -\sqrt{2 - 2\sqrt{1 - \frac{1}{\alpha^2}}} \qquad p_1 = 0 \qquad q_2 = \frac{2G}{\epsilon\sqrt{m\epsilon}}\sqrt{1 - \frac{1}{\alpha^2}} \qquad p_2 = 0, \quad (B.52)$$

$$q_1 = -\sqrt{2 + 2\sqrt{1 - \frac{1}{\alpha^2}}}$$
 $p_1 = 0$ $q_2 = -\frac{2G}{\epsilon\sqrt{m\epsilon}}\sqrt{1 - \frac{1}{\alpha^2}}$ $p_2 = 0.$ (B.53)

Bibliografia

- H.A.Jahn and E.Teller, *Stability of Polyatomic Molecules in Degenerate Eletronic States I-Orbital Degeneracy*, Proc. Roy. Soc. A 161, 220 (1937).
- [2] I.B. Bersuker The Jahn-Teller Effect, Reino Unido, Cambridge University Press, 2006.
- [3] R.Englman *The Jahn-Teller Effect in Molecules and Crystals*, Londres, Wiley Interscience, 1972.
- [4] A.P. Hines, C.M. Dawson, R.H. Mackenzie, and G.J. Milburn, *Entanglement and bifur*cations in Jahn-Teller models, Phys. Rev. A 70, 022303 (2004).
- [5] A.P.Hines, *Entanglement, Dynamical Bifurcations and Quantum Phase Transitions*, Tese de Doutorado, University of Queensland, 2005.
- [6] L.S. de la Torre, Aplicação das funções de Quase-Probabilidade no Estudo da Dinâmica de Emaranhamento, Tese de Doutorado, IFGW-UNICAMP, 2003.
- [7] R.M.Angelo, Aspectos Quânticos e Clássicos da Dinâmica de Emaranhamento em Sistemas Hamiltonianos, Tese de Doutorado, IFGW-UNICAMP, 2003.
- [8] E.K.Irish and K.Schwab, Quantum measurement of a coupled nanomechanical resonator-Cooper-pair box system, Phys. Rev. B 68, 155311 (2003).
- [9] A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin and R.J. Schoelkopf, *Cavity quan*tum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecutre for quantum computation, Phys. Rev. A 69, 062320 (2004).
- [10] S.Sachdev Quantum Phase Transitions, EUA, Cambridge University Press, 2006.

- [11] S.L.Sondhi, S.M. Girvin, J.P.Carini and D.Shahar Continuous quantum phase transitions, Rev. Mod. Phys.69, 315 (1997)
- [12] G. Levine, V.N. Muthukumar, *Entanglement of a qubit with a single oscillator mode*, Phys. Rev. B **69**, 113203 (2004).
- [13] M.S. Santhanam, V.B. Sheorey, A. Lakshminarayan, Effect of classical bifurcations on the quantum entanglement of two coupled quartic oscillators, Phys. Rev. E 77, 026213 (2008).
- [14] P.Glendinning Stability, Instability and chaos: an introduction to the theory of nonlinear differential equations, Cambridge, Cambridge University Press, 1994.
- [15] G. Liberti, R. L. Zaffino, F. Piperno, and F. Plastina, *Entanglement of a qubit coupled to a ressonator in the adiabatic regime*, Phys. Rev. A 73, 032346 (2006).
- [16] N.Lambert, C.Emary, T.BrandesEntanglement and the Phase Transition in Single-Mode Superradiance, Phys. Rev. Lett. 92, 073602 (2004).
- [17] A.P. Hines, R.H. Mackenzie, and G.J. Milburn, Quantum entanglement and fixed-point bifurcations, Phys. Rev. A 71, 042303 (2005).
- [18] M.C.Nemes, K.Furuya, G.Q.Pellegrino, A.C.Oliveira, Maurício Reis and L.Sanz, Quantum Entanglement and fixed point Hopf bifurcation, Phys. Lett. A 354, (1-2) 60-66 (2006).
- [19] M.A.Nielsen and I.C.Chuang, Computação Quântica e Informação Quântica;tradução Ivan S. Oliveira, Porto Alegre, Ed. Bookman, 2005.
- [20] M.O.Scully and M.Suhail Zubairy, *Quantum Optics*, Reino Unido, Cambridge University Press, 1999.
- [21] F.T. Arecchi, Eric Courtens, Robert Gilmore and Harry Thomas, Atomic Coherent States in Quantum Optics, Phys. Rev. A 6, 2211 (1972).
- [22] Wei-Min Zhang, Da Hsuan Feng and Robert Gilmore, Coherent States: Theory and some applications, Rev. Mod. Phys. 62, 867 (1990).

- [23] Michel Hénon, Numerical Exploration of Hamiltonian Systems, Les Houches Session XXXVI, 1981 - Chaotic Behaviour of Deterministic Systems.
- [24] A.M.Ozório de Almeida, Sistemas Hamiltonianos: caos e quantização, Campinas, Ed. da Unicamp, 1995.
- [25] A.J.Lichtenberg and M.A.Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics*, Nova York, Springer, 1992.
- [26] E.A.Chagas, Quebra de Simetria e Transição de Fase Quântica em Alguns Modelos de Acoplamento Spin-Bóson, Tese de Mestrado, IFGW-UNICAMP, 2008.
- [27] R.L.Stratonovich, On distribuitons in representation space, Sov. Phys. JETP 4, 891 (1957).
- [28] W.P.Schleich, Quantum Optics in Phase Space, Ed. Wiley-VCH Verlag, Berlim, 2001.
- [29] E.T.Jaynes and F.W.Cummings, Quantum and Semiclassical radiation theories, Proc. IEEE 51, 89 (1963).
- [30] J.M.Raimond, M.Brune and S.Haroche, *Manipulating quntum entanglement with atoms and photons in a cavity*, Rev. Mod. Phys.**73**, 565 (2001).
- [31] C.J.Hood, T.W.Lynn, A.C.Doherty, A.S.Parkins and H.J.Kimble, *The Atom-Cavity Microscope: Single Atoms Bound in Orbit by Single Photons*, Science 287, 1447 (2000).
- [32] R.H.Dicke, Coherence in Spontaneous Radiation Processes, Phys. Rev.93, 99 (1954).
- [33] D.Meschede, H.Walther and G.Müller, One-Atom Maser, Phys. Rev. Lett. 54, 551 (1985).
- [34] M.Brune, E.Hagley, J.Dreyer, X.Maître, A.Maali, C.Wunderlich, J.M.Raimond and S.Haroche, Observing the Progressive Decoherence of the "Meter" in a Quantum Measurement, Phys. Rev. Lett.77, 4887 (1996).
- [35] Yuriy Makhlin, Gerd Schön and Alexander Shnirman, *Josephson-junctins qubits with controlled couplings*, Nature **398**, 305 (1999).

- [36] Y.Nakamura, Yu.A.Pashkin and J.S.Tsai, Coherent control of macroscopic quantum states in a single-Cooper-pair box, Nature 398, 786 (1999).
- [37] K.W.Lehnert, K.Bladh, L.F.Spietz, D.Gunnarsson, D.I.Schuster, P.Delsing and R.J.Schoelkopf, *Measurement of the Excited-State Lifetime of a Microeletronic Circuit*, Phys. Rev. Lett. **90**, 027002 (2003).
- [38] K.C.Schwab and M.L.Roukes, *Putting Mechanics into Quantum Mechanics*, Phys. Today 58, 36 (2005).
- [39] A.D.Armour, M.P.Blencowe and K.C.Schwab, Entanglement and Decoherence of a Micromechanical Resonator via Coupling to a Cooper-Pair Box, Phys. Rev. Lett. 88, 148301 (2002).
- [40] Y.Makhlin, G.Schön and A.Shnirman, Quantum-state engineering with Josephsonjunction devices, Rev. Mod. Phys. 73, 357 (2001).
- [41] M.Tinkham, Introduction to Superconductivity, Ed. McGraw-Hill, Nova York, 1996.
- [42] A.Wallraff, D.I.Schuster, A.Blais, L.Frunzio, R.-S.Huang, J.Majer, S.Kumar, S.M.Girvin and R.J.Schoelkopf, Strong coupling of a single photon to a superconducting qubit using circuit quantum electrodynamics, Nature 431, 162 (2004).
- [43] A.Wallraff, D.I.Schuster, A.Blais, L.Frunzio, J.Majer, M.H.Devoret, S.M.Girvin and R.J.Schoelkopf, Approaching Unit Visibility for Control of a Superconducting Qubit with Dispersive Readout, Phys. Rev. Lett. 95, 060501 (2005).
- [44] C.Emary, T.BrandesChaos and the quantum phase transition in the Dicke model, Phys. Rev. E. 67, 066203 (2003).
- [45] M.A.M. de Aguiar, K.Furuya, C.H.Lewenkopf and M.C.Nemes Chaos in a spin-boson system: classical analysis, Annals of Phys..216, 291 (1992)