

Relação entre Dinâmica Clássica e Transição
de Fase Quântica em Modelos de Campo
Médio.

Autor: Maurício Reis e Silva Júnior
Orientadora: Professora Doutora Maria Carolina Nemes.

10 Março 2005

Abstract

This work investigates Quantum Models used for describing two interacting subsystems, with real constant coupling. Specifically, the Symmetric Pairing Model and Dicke's Model for Superradiance are studied. The concept of Quantum Phase Transition is understood as qualitative changes present by these models as a function of the coupling constant.

Associated Classical Dynamics are obtained by projection of the Quantum Hamiltonians on generalized Coherent States. By this way, its possible to observe the Quantum Phase Transition in a Classic Mechanics context.

Resumo

Este trabalho estuda Modelos Quânticos usados na descrição de dois subsistemas interagentes, sendo esta interação descrita por constante de acoplamento real. Em específico, são estudados o Modelo de Emparelhamento e o Modelo de Dicke para Superradiância. O conceito de transição de fase quântica é entendido como mudanças qualitativas apresentadas por estes modelos como função do parâmetro de acoplamento.

As Dinâmicas Clássicas são associadas aos modelos por projeção das Hamiltonianas Quânticas em Estados Coerentes generalizados. Procedendo de tal forma, é possível observar o análogo da transição de fase quântica no contexto clássico.

Agradecimentos

- à Professora Maria Carolina Nemes que sempre me estimulou e até mesmo amparou quando foi necessário;
- ao Marcelo e ao Adécio, companheiros de discussão e de orientação;
- à minha Avó, minha Mãe e D. Aparecida pelo apoio espiritual;
- à Marluce pela impressão colorida;
- à Patty por me apoiar e estar comigo sempre.

Para Patty, com amor.

Sumário

1	Introdução	3
2	Ferramentas	5
2.1	Estados Coerentes	5
2.1.1	Estados Coerentes do Oscilador Harmônico	5
2.1.2	Estados Coerentes de Spin	9
2.2	Distribuições de Quasi-Probabilidade	13
2.3	Sistemas Compostos e Emaranhamento	21
3	O Modelo de Emparelhamento	26
3.1	O modelo	26
3.2	Espectro e Transição de Fase Quântica	27
3.3	Dinâmica Clássica	29
3.4	Transição de Regime	38
4	O Modelo de Dicke para Super-radiância	41
4.1	O modelo	41
4.2	Análogo Clássico	47
5	Conclusão	53
A	Soluções das equações de movimento da Hamiltoniana Clássica do modelo de Emparelhamento	54

Capítulo 1

Introdução

Quando a Mecânica Quântica começou a surgir no início do século XX, a Mecânica Clássica estava muito bem estabelecida. Portanto foi natural tentar descrever quantidades quânticas, como por exemplo valores esperados de operadores e espectros de energia, em termos de quantidades Clássicas. Surgiu então o que é hoje conhecido como a “Velha Mecânica Quântica” cujos erros e acertos nos conduziram à Teoria Quântica de E. Schrödinger e W. Heisenberg. As fórmulas de quantização baseadas na Mecânica Clássica mostraram-se como aproximações da Teoria Quântica, válidas quando as ações dos sistemas estudados eram bem maiores que a escala quântica típica \hbar . Esta maneira de obter o limite clássico ficou conhecido como o “Princípio de Correspondência”.

Um trabalho pioneiro no assunto é o método semiclássico proposto por Briloin-Einstein e Keller que nos leva a regras de quantização para sistemas integráveis. Outra contribuição fundamental foi a função de Wigner [1] que nos fornece uma representação no espaço de fase de uma função de onda. Com o aumento do interesse da comunidade científica na área de sistemas dinâmicos, os estudos sobre relações entre descrições clássicas e quânticas foram intensificadas. Para sistemas não-integráveis uma contribuição importante é a aproximação baseada na construção de Feynman [2] da Mecânica Quântica utilizada por Gutzwiller [3] para deduzir a fórmula do traço. Esta fórmula relaciona propagadores quânticos com órbitas clássicas periódicas. Muitos outros métodos e resultados relacionados ao assunto podem ser encontrados na referência [4].

A grande dificuldade com o limite clássico-quântico é de natureza essencialmente cinemática. Enquanto um estado clássico, digamos de uma partícula, é caracterizado por um ponto no espaço de fase, o correspondente estado quântico é um vetor do espaço de Hilbert e em geral tem caráter não local.

No presente trabalho vamos mostrar que para uma classe de modelos chamados “modelos do tipo campo médio” ou modelo do tipo “Curie-Weiss” existem analogias bastante robustas no sentido de serem comuns a todos os modelos investigados [5, 6]. Dois dos modelos pertencentes a essa classe são de grande utilidade na Física Nuclear: o modelo de Lipkin [7] e o modelo de Emparelhamento [8, 9]. Esses modelos são exatamente solúveis para A partículas, embora não sejam realísticos devido a possuírem apenas dois níveis altamente degenerados. Devido à impossibilidade de encontrar uma solução exata para um potencial forte de curto alcance, que age entre dois corpos, desenvolveram-se vários métodos de aproximação que são testados principalmente nos modelos citados.

Na primeira parte do presente trabalho, vamos nos concentrar no modelo de Emparelhamento. Sabemos que esse modelo apresenta uma transição de comportamento: passa de um regime onde os núcleos são esféricos para um regime no qual são deformados como função do parâmetro de interação. A esta mudança qualitativa de comportamento chamaremos de transição de fase. Vamos mostrar em detalhe que existe uma estreita analogia entre a transição de fase quântica e seu análogo clássico. Em particular mostramos o importante papel desempenhado pela órbita clássica homoclínica característica do ponto de transição. Tanto este estudo como o seguinte são feitos a temperatura nula, o que põe em destaque alterações no espectro, em particular no Estado Fundamental.

A segunda parte do trabalho trata do modelo de Dicke [11, 12]. Embora a transição desse modelo tenha sido largamente estudada e recentemente no regime caótico [13], um estudo das semelhanças e diferenças que ocorrem na transição de fase para a versão integrável e não-integrável do modelo nunca foi feita e as diferenças são notáveis. As analogias clássico-quânticas também se mantêm, nas duas situações.

Uma ferramenta que tem sido bastante utilizada para caracterizar a transição de fase quântica para sistemas hamiltonianos com dois graus de liberdade é a entropia linear [14]-[18], definida como $S = 1 - \text{Tr}\{\rho_j^2\}$ onde ρ_j denota o subsistema em questão i.e., denota a matriz densidade reduzida de um deles. Essa quantidade, sem análogo clássico bem definido, é uma medida de correlações. No ponto de transição de fase sabemos que as correlações passam a ter um papel muito importante. Com isso a variação da entropia linear com o parâmetro de acoplamento do modelo, como mostraremos, sinaliza claramente a transição de fase. Novamente, as transições de fase nas versões integrável e não-integrável do modelo são marcantes - no caso integrável a transição de fase é de 1ª ordem, enquanto que no não-integrável é de 2ª ordem. Interessante também é que o análogo clássico do modelo acompanha esses comportamentos.

Capítulo 2

Ferramentas

2.1 Estados Coerentes

O Hamiltoniano de um sistema, clássico ou quântico, é o gerador de evolução temporal do mesmo. A Mecânica Clássica porém dá valores definidos para a posição e o momento da partícula, ao passo que em mecânica quântica essas mesmas variáveis são descritas em termos de distribuições de probabilidade. O teorema de Ehrenfest [19] diz que a evolução temporal de valores médios de observáveis segue as trajetórias clássicas do sistema clássico correspondente no caso em que a dispersão nas distribuições são desprezíveis, o que em geral ocorre para o caso de grandes número quânticos. As descrições clássica e quântica devem concordar quando esse limite é atingido. É de se esperar portanto que um estado quântico que apresente essa dispersão mínima tenha um comportamento bem próximo do clássico. Nesta seção serão introduzidos estados quânticos que, nesse sentido, podem ser considerados quasi-clássicos: os estados coerentes.

2.1.1 Estados Coerentes do Oscilador Harmônico

No caso do oscilador harmônico existe um estado quântico com as seguintes características:

1. Evolução temporal dos valores médios $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$ iguais aos do oscilador harmônico clássico.
2. Produto de incertezas mínimo ($\Delta x \Delta p = \hbar/2$);

Um estado quântico com estas características foi introduzido por Glauber em 1963 [20]. Passou então a ser conhecido como Estado Coerente e pode ser obtido a partir de *uma* das seguintes definições:

1. Os estados coerentes $|\alpha\rangle$ são autovetores do operador não-hermitiano de aniquilação do oscilador harmônico:

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (2.1)$$

2. Os estados coerentes $|\alpha\rangle$ podem ser obtidos aplicando-se o operador unitário *deslocamento*: $D(\alpha) = \exp\{\alpha a^\dagger - \alpha^* a\}$ ao estado fundamental do oscilador harmônico:

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle \quad (2.2)$$

3. Estados Coerentes apresentam produto de incertezas mínimo igualmente distribuído:

$$\Delta x \Delta p = \hbar/2$$

Essas três definições são equivalentes, isto é, qualquer estado obtido por uma delas, satisfará as outras duas. No entanto, do ponto de vista prático, a definição dada pelo operador deslocamento é mais útil¹. Pode-se utilizá-lo para obter a expansão em estados de Fock (autoestados de $n = a^\dagger a$) para um estado coerente $|\alpha\rangle$. Através da relação [21]

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} \quad (2.3)$$

válida se $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$, é possível escrever o operador deslocamento como sendo:

$$D(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a}. \quad (2.4)$$

Ao ser aplicado no estado fundamental do oscilador harmônico, o termo $e^{-\alpha^* a}$ o deixa intacto, já que apenas o primeiro termo da expansão exponencial, 1, dá resultado diferente de zero. Com isso, os estados coerentes podem ser obtidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle. \end{aligned}$$

Para referência futura, o fator $e^{-|\alpha|^2/2}$ será definido como raiz quadrada da normalização $N(\alpha, \alpha^*)$, isto é, $N(\alpha, \alpha^*) = e^{|\alpha|^2}$ para os estados coerentes do oscilador harmônico.

Levando em conta a relação:

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{(n+1)} |n+1\rangle \Rightarrow (a^\dagger)^n |0\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle,$$

¹A generalização dos estados coerentes para álgebra de Spin será feita através dele.

os estados coerentes podem então ser escritos na base de Fock como sendo:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (2.5)$$

Através desta expansão, é possível verificar que os estados coerentes dados pelo operador deslocamento são autoestados do operador de aniquilação. Como: $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$,

$$\begin{aligned} a|\alpha\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n}|n-1\rangle \\ &= \alpha e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |n-1\rangle \\ &= \alpha|\alpha\rangle. \end{aligned}$$

Essa equação de autovalores estabelece uma relação direta entre os estados coerentes e os números complexos. No caso particular em que a Hamiltoniana é linear nos operadores a, a^\dagger , n , a Hamiltoniana Clássica

$$\mathcal{H}(\alpha, \alpha^*) = \langle \alpha | H | \alpha \rangle \quad (2.6)$$

gera equações de movimento para α, α^*

$$\begin{aligned} ig \frac{d\alpha}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha^*} \\ -ig \frac{d\alpha^*}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde

$$g \equiv \frac{\partial^2 \ln N}{\partial \alpha \partial \alpha^*}, \quad (2.8)$$

idênticas às equações de movimento de Heisenberg para os operadores a, a^\dagger [5].

Para verificar a relação de incerteza, os operadores \hat{x} e \hat{p} são escritos em função dos operadores de criação e aniquilação como sendo:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \quad (2.9)$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a - a^\dagger). \quad (2.10)$$

Como os estados coerentes são autoestados do operador aniquilação,

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha + \alpha^*) \quad (2.11)$$

$$\langle p \rangle = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\alpha - \alpha^*) \quad (2.12)$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} [1 + (\alpha + \alpha^*)^2] \quad (2.13)$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{m\omega\hbar}{2} [1 - (\alpha - \alpha^*)^2] \quad (2.14)$$

Fazendo agora $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ obtém-se $\Delta x = \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}$, ou seja, os estados coerentes apresentam produto de incertezas mínimo e igualmente distribuído.

Os estados coerentes não são ortogonais. Fazendo $\langle \beta | \alpha \rangle$ a partir da equação (2.5), obtém-se:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \exp\left\{ \beta^* \alpha - \frac{1}{2} [|\beta|^2 + |\alpha|^2] \right\} \neq 0. \quad (2.15)$$

Qualquer estado do espaço vetorial gerado pelos autovetores de $n = a^\dagger a$ pode ser escrito em termos dos estados coerentes. Isso pode ser verificado calculando-se $\int \int d^2\alpha | \alpha \rangle \langle \alpha |$, onde $d^2\alpha = d(\Re\alpha)d(\Im\alpha) = r dr d\theta$. Reescrevendo a equação (2.5) com a mudança de variáveis $\alpha = r e^{i\theta}$,

$$\int \int d\alpha d\alpha^* | \alpha \rangle \langle \alpha | = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty r dr d\theta e^{-r^2} \sum_{n,n'} \frac{r^{n+n'} e^{i(n'-n)\theta}}{\sqrt{n! n'!}} | n' \rangle \langle n |.$$

Utilizando agora os resultados:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} e^{i(n-n')\theta} d\theta &= 2\pi \delta_{n,n'} \\ \int_0^\infty r^{2n+1} e^{-r^2} dr &= \frac{1}{2} \Gamma(n+1) \end{aligned}$$

obtém-se a relação:

$$\frac{1}{\pi} \int \int d^2\alpha | \alpha \rangle \langle \alpha | = 1. \quad (2.16)$$

No caso do oscilador harmônico, a evolução temporal do operador a está em correspondência direta com a evolução temporal dada pela Hamiltoniana Clássica para a variável α . É possível neste caso verificar mudanças qualitativas na Hamiltoniana Quântica (quando esta é dada em termos de um

parâmetro) analisando-se a dinâmica obtida pela projeção desta Hamiltoniana em estados coerentes. Pode-se aplicar este método não apenas ao oscilador harmônico, mas também a Hamiltonianas envolvendo operadores de spin J_z, J_+, J_- com relações de comutação $[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm$, $[J_+, J_-] = 2J_z$. Para este fim, devem ser definidos estados coerentes de spin, o que será feito através de uma generalização do operador deslocamento.

2.1.2 Estados Coerentes de Spin

Os estados coerentes de Spin são obtidos pela atuação de um operador de deslocamento [5], análogo àquele dado pela definição 2,

$$\Omega(\zeta) \equiv \exp\{\zeta J_+ - \zeta^* J_-\} \quad (2.17)$$

atuando no estado $|j, -j\rangle$

$$|\zeta\rangle \equiv \Omega(\zeta)|j, -j\rangle, \quad (2.18)$$

sendo o estado $|j, m\rangle$ autoestado dos operadores $J_z, \mathbf{J}^2 = J_+J_- + L_z^2 - L_z$:

$$\mathbf{J}^2|j, -j\rangle = j(j+1)|j, -j\rangle \quad J_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle. \quad (2.19)$$

Os estados coerentes do oscilador harmônico, $|\alpha\rangle$, são autoestados do operador de aniquilação a com autovalor α . Essa relação faz uma correspondência 1 a 1 entre o operador a e o plano complexo. O operador de spin J_- também possui correspondência direta com o parâmetro ζ ; esse é o propósito do estado coerente. É possível obter equações de movimento para ζ, ζ^* a partir da Hamiltoniana Clássica análoga, $\mathcal{H} = \langle \zeta | H | \zeta \rangle$, idênticas as equações de movimento para os operadores J_-, J_+ .

Deve se notar no entanto que o espaço de Hilbert para estados de Spin é finito. Esse fato traz duas conseqüências. A primeira delas é que o operador J_- não terá autovetores nesse espaço. No entanto é possível identificar ζ, ζ^* com os valores médios de J_-, J_+ no estado $|\zeta\rangle$. A segunda é que o parâmetro ζ não estará em um plano complexo ilimitado, como acontece com o parâmetro α , e sim na superfície de uma esfera de raio unitário. Para o espaço de spin $\frac{1}{2}$, isso pode ser mostrado através da representação matricial do operador deslocamento Ω . Os operadores J_\pm, J_z podem ser representados em termos das matrizes:

$$J_+ \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, J_- \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, J_z \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

já que as mesmas relações de comutação serão obedecidas. Nessa representação, pode-se obter a forma do operador deslocamento Ω :

$$\Omega(\zeta) \rightarrow \exp \begin{pmatrix} 0 & \zeta \\ -\zeta^* & 0 \end{pmatrix} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \begin{pmatrix} 0 & \zeta \\ -\zeta^* & 0 \end{pmatrix}^k \quad (2.21)$$

Elevar a matriz à k -ésima potência resulta nas séries:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \left(1 - \frac{|\zeta|^2}{2!} + \frac{|\zeta|^4}{4!} - \dots\right) + \\ & + \begin{pmatrix} 0 & \frac{\zeta}{|\zeta|} \\ \frac{-\zeta^*}{|\zeta|} & 0 \end{pmatrix} \left(|\zeta| - \frac{|\zeta|^3}{3!} + \dots\right) = \\ & \qquad \qquad \qquad \begin{pmatrix} \cos|\zeta| & \frac{\zeta}{|\zeta|} \operatorname{sen}|\zeta| \\ \frac{-\zeta^*}{|\zeta|} \operatorname{sen}|\zeta| & \cos|\zeta| \end{pmatrix} \quad (2.22) \end{aligned}$$

Em outras palavras, o operador deslocamento apresenta uma periodicidade em ζ . Apesar de ter sido mostrado somente para spin 1/2, essa periodicidade ocorre para todo j . A equação (2.22) sugere que o parâmetro ζ está relacionado aos ângulos polar θ e azimutal ϕ pela equação:

$$\zeta = \frac{\theta}{2} e^{i\phi}, \quad (2.23)$$

com $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$, já que

$$\begin{aligned} \Omega(\zeta(\theta, \phi)) &= \Omega(\zeta(\theta + \pi, \phi)); \\ \Omega(\zeta(\theta, \phi)) &= \Omega(\zeta(\theta, \phi + 2\pi)). \end{aligned}$$

Os operadores J_{\pm} não satisfazem a condição $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ necessária para que Ω tenha uma forma operacional semelhante à apresentada para o operador deslocamento do oscilador harmônico. No entanto, uma fórmula BCH [22, 23] permite a obtenção da expressão desejada:

$$\exp\{\zeta J_+ - \zeta^* J_-\} = \exp\{\tau J_+\} \exp\{\ln(1 + |\tau|^2) J_z\} \exp\{\tau J_-\}, \quad (2.24)$$

$$\tau = \frac{\zeta}{|\zeta|} \tan|\zeta| = e^{i\phi} \tan \frac{\theta}{2}. \quad (2.25)$$

Procedendo de forma análoga ao que foi feito para o estado coerente do oscilador harmônico, o operador $\exp\{\tau J_-\}$ deixa o estado $|j, -j\rangle$ intacto. Portanto,

$$|\zeta\rangle = \frac{1}{(1 + |\tau|^2)^j} \exp\{\tau J_+\} |j, -j\rangle. \quad (2.26)$$

Além disso, $J_+|j, j\rangle = 0 \Rightarrow \exp\{\tau J_+\}|j, j\rangle = |j, j\rangle$, ou seja,

$$|\zeta\rangle = \frac{1}{(1+|\tau|^2)^j} \sum_{k=0}^{2j} \frac{(\tau J_+)^k}{k!} |j, -j\rangle. \quad (2.27)$$

Com a relação: $J_+|j, m\rangle = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}|j, m+1\rangle$,

$$|\zeta\rangle = \frac{1}{(1+|\tau|^2)^j} \sum_{k=0}^{2j} \tau^k \sqrt{\binom{2j}{k}} |j, -j+k\rangle \quad (2.28)$$

A equação (2.25) é uma transformação do tipo projeção estereográfica, onde cada ponto na esfera de Bloch é mapeado no plano complexo infinito da variável τ . A equação (2.24) é a forma mais prática de se obter os estados coerentes de spin. Normalmente na literatura os estados coerentes de spin são definidos diretamente em função do parâmetro τ , i.e., como $|\tau\rangle = (1+|\tau|^2)^{-j} \exp\{\tau J_+\}|j, -j\rangle$. Para estabelecer um elo entre os valores esperados de J_{\pm} e os parâmetros θ, ϕ que aparecem na definição de ζ , pode-se usar a equação (2.26) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} J_+|\tau\rangle &= (1+|\tau|^2)^{-j} J_+ e^{\tau J_+} |j, -j\rangle; \\ J_+ &= (1+|\tau|^2)^{-j} \frac{\partial}{\partial \tau} e^{\tau J_+} |j, -j\rangle \end{aligned} \quad (2.29)$$

Usando a ortogonalidade da base $\{|j, m\rangle\}$ e a expansão binomial

$$(1+x)^N = \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} x^n$$

O valor esperado de J_+ pode ser escrito como

$$\langle J_+ \rangle = \frac{2j\tau^*}{1+|\tau|^2}. \quad (2.30)$$

Retomando a equação (2.24) e usando relações trigonométricas elementares,

$$\langle J_+ \rangle = j \operatorname{sen}\theta e^{i\phi}. \quad (2.31)$$

Portanto, os valores esperados de J_x e J_y num estado coerente serão dados por $j \cos\phi$, $j \operatorname{sen}\phi$ respectivamente. Pela equação (2.26) a normalização $N(\tau, \tau^*)$ será dada por

$$N(\tau, \tau^*) = (1+|\tau|^2)^{2j} \quad (2.32)$$

para os estados coerentes de spin.

As equações de movimento para o parâmetro τ serão dadas por:

$$i g \frac{d\tau}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau^*}$$

$$-i g \frac{d\tau^*}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \tau}. \quad (2.33)$$

$$\mathcal{H} = \langle \tau | H | \tau \rangle. \quad (2.34)$$

O fator g será dado por²

$$g = \frac{\partial^2 N(\tau, \tau^*)}{\partial \tau^* \partial \tau} = \frac{2j}{(1 + |\tau|^2)^2} \quad (2.35)$$

Assim como no caso do oscilador harmônico, os estados coerentes de spin são em geral não ortogonais,

$$\langle \tau | \sigma \rangle = \frac{1}{(1 + |\tau|^2)^j} \frac{1}{(1 + |\sigma|^2)^j} \sum_{k=0}^{2j} \binom{2j}{k} \tau^{*k} \sigma^k =$$

$$\frac{1}{(1 + |\tau|^2)^j} \frac{1}{(1 + |\sigma|^2)^j} (1 + \omega^* \sigma)^{2j}, \quad (2.36)$$

e têm uma relação de “super-completeza”, como no caso do oscilador harmônico. É possível obtê-la, usando a equação (2.28) e escrevendo τ como função de θ e ϕ de acordo com a equação (2.25):

$$|\tau\rangle\langle\tau| = \frac{1}{(1 + |\tau|^2)^{2j}} \sum_{k, k'=0}^{2j} \tau^k (\tau^*)^{k'} \times$$

$$\times \sqrt{\binom{2j}{k} \binom{2j}{k'}} |j, -j + k\rangle\langle j, -j + k'|. \quad (2.37)$$

Com $|\tau|^2 = \tan^2 \theta/2$, $(1 + |\tau|^2)^{-1} = \cos^2 \theta/2$, teremos:

$$|\tau\rangle\langle\tau| = \sum_{k, k'=0}^{2j} (\sin \theta/2)^{k+k'} (\cos \theta/2)^{4j-k-k'} \times$$

$$\times e^{i(k-k')\phi} \sqrt{\binom{2j}{k} \binom{2j}{k'}} |j, -j + k\rangle\langle j, -j + k'| \quad (2.38)$$

²Para estados coerentes do Oscilador Harmônico, $g = 1$, o que não ocorre para estados coerentes de spin.

Integrando em todo o espaço, i.e., fazendo:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin\theta d\theta d\phi |\tau\rangle \langle \tau|$$

e usando os resultados

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} e^{i(n-n')\theta} d\theta &= 2\pi \delta_{n,n'} \\ \int_0^\pi (\sin\theta/2)^{2k+1} (\cos\theta/2)^{2j-2k+1} d\theta &= \frac{\Gamma(k+1)\Gamma(j-k+1)}{\Gamma(j+2)} \end{aligned}$$

chega-se à relação:

$$\frac{2j+1}{4\pi} \int d^2\tau |\tau\rangle \langle \tau| = 1 \quad (2.39)$$

Para finalizar, um pequeno comentário sobre o princípio da incerteza. Ao contrário dos estados coerentes do oscilador harmônico, os estados coerentes de spin não são estados de incerteza mínima. Generalizando o conceito para um sistema de spin, o princípio de incerteza deve ser escrito como $\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{1}{2} \Delta J_z$. No entanto, mesmo para o estado $|j, -j\rangle$ a igualdade não é observada.

2.2 Distribuições de Quasi-Probabilidade

A Mecânica Clássica descreve completamente um sistema dinâmico através dos valores de variáveis canônicas, como por exemplo momento e coordenada. Portanto é possível responder às perguntas “onde está?” e “com qual velocidade?” e obter todas as informações possíveis a respeito de um sistema físico. Estendendo esta idéia para a Mecânica Estatística, estas perguntas se tornam “qual a probabilidade de estar aqui com essa velocidade?”. Associar uma probabilidade para cada lugar possível define uma distribuição de probabilidade. Em Mecânica Estatística as distribuições de probabilidade são usadas para descrever um sistema físico e resumem toda a informação que se pode obter dele. Já em Mecânica Quântica, o cenário é bem distinto. Basicamente, a descrição de um sistema quântico se baseia no conceito abstrato de estado quântico. O princípio da incerteza limita as possibilidades de descrição do sistema através de variáveis canônicas, já que não é possível conhecer simultaneamente e com precisão arbitrária o valor de duas variáveis que não comutam.

Ainda assim é possível em Mecânica Quântica definir distribuições de *quasi*-probabilidade [1] que servem como representações de um sistema, em analogia com o que é feito em Mecânica Estatística. É natural que essas distribuições quânticas apresentem diferenças fundamentais em relação às

distribuições clássicas. Em termos de posição e momento por exemplo, a distribuição de probabilidade de uma está relacionada com a outra por uma transformada de Fourier, o que não ocorre nas distribuições clássicas.

Uma propriedade desejável em funções de distribuição é a de se obter a distribuição marginal de uma das variáveis somando-se sobre todos os valores das outras, isto é, se $R(x, y)$ é uma distribuição de probabilidade, deseja-se obter uma distribuição para x fazendo-se $P(x) = \int_{-\infty}^{\infty} R(x, y) dy$, por exemplo. No caso da mecânica quântica, se a distribuição de quasi-probabilidade $W(q, p)$ para um dado estado ρ atende a essa propriedade das distribuições marginais, é possível relacioná-la com a descrição quântica usual pelas equações:

$$\langle q | \rho | q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} W_{\rho}(q, p) dp ; \quad (2.40)$$

$$\langle p | \rho | p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} W_{\rho}(q, p) dq . \quad (2.41)$$

Na verdade, é possível obter uma generalização das distribuições marginais para uma determinada direção θ . Isso pode ser feito através de um operador unitário $\hat{U}(\theta)$, definido em função dos operadores $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\hat{p})$, $a^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} - i\hat{p})$ como sendo $\hat{U}(\theta) = \exp\{-ia^{\dagger}a\theta\}$. O operador $\hat{U}(\theta)$ transforma os operadores \hat{q} e \hat{p} da seguinte forma³:

$$\begin{aligned} \hat{U}^{\dagger}(\theta) \hat{q} \hat{U}(\theta) &= \hat{q} \cos \theta + \hat{p} \sin \theta; \\ \hat{U}^{\dagger}(\theta) \hat{p} \hat{U}(\theta) &= -\hat{q} \sin \theta + \hat{p} \cos \theta. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Como $\hat{U}(\theta)$ é unitário, $\hat{U}^{\dagger} | q \rangle$ é autovetor do operador $\hat{q}' = \hat{U}^{\dagger}(\theta) \hat{q} \hat{U}(\theta)$. A generalização das equações (2.40) e (2.41) pode ser feita escrevendo-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(q \cos \theta - p \sin \theta, q \sin \theta + p \cos \theta) dp = \langle q | \hat{U}(\theta) \rho \hat{U}^{\dagger}(\theta) | q \rangle \quad (2.43)$$

Nos casos $\theta = 0$, $\theta = \pi/2$ obtêm-se as distribuições de probabilidade $\langle q | \rho | q \rangle$, $\langle p | \rho | p \rangle$ respectivamente. É possível mostrar⁴ que a função distribuição definida pela equação (2.43) deve ser obtida como transformada de Fourier da função característica

$$\tilde{W}(u, v) = \text{Tr}\{\rho \exp\{-iu\hat{q} - iv\hat{p}\}\} \quad (2.44)$$

³Pode ser verificado pela relação $e^{xA}Be^{-xA} = B + [A, B]x + [A, [A, B]]x^2/2! + [A, [A, [A, B]]]x^3/3! \dots$

⁴O leitor interessado pode consultar [24]

A função de distribuição $W(q, p)$ assim definida é chamada *função de Wigner* e possui a forma ($\hbar = 1$):

$$W_{\hat{\rho}}(q, p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{ipx\} \langle q - \frac{x}{2} | \hat{\rho} | q + \frac{x}{2} \rangle dx \quad (2.45)$$

A função de Wigner possui uma série de propriedades. A seguir são citadas as mais importantes:

1. Verifica-se sem maiores problemas que a função de Wigner é real e normalizada:

$$W_{\hat{\rho}}(q, p) = W_{\hat{\rho}}^*(q, p), \quad (2.46)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W_{\hat{\rho}}(q, p) dq dp = 1; \quad (2.47)$$

2. O traço do produto de dois operadores pode ser calculado através da função de Wigner:

$$\text{Tr}\{\hat{A}\hat{B}\} = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W_{\hat{A}}(q, p) W_{\hat{B}}(q, p) dq dp; \quad (2.48)$$

3. Diferentemente das distribuições de probabilidade clássicas, a função de Wigner pode apresentar valores negativos;
4. O valor que a função de Wigner pode assumir é limitado, conseqüência da desigualdade de Schwarz:

$$|W_{\hat{\rho}}(q, p)| \leq \frac{1}{\pi}. \quad (2.49)$$

Além de dar a fórmula para o cálculo de valores médios, a propriedade 2 mostra que a função de Wigner é de fato uma *representação* em Mecânica Quântica. O elemento de matriz $\langle u | \hat{\rho} | v \rangle$ de um operador pode ser obtido como

$$\langle u | \hat{\rho} | v \rangle = \text{Tr}\{\hat{\rho} | v \rangle \langle u | \} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W_{\hat{\rho}}(q, p) W_{uv}(q, p) dq dp$$

onde W_{uv} é a representação de Wigner do projetor $| v \rangle \langle u |$.

A seguir são mostrados os gráficos das funções de Wigner para alguns casos típicos. Para fazer a função de Wigner de um autoestado do oscilador harmônico por exemplo, basta obter esses autoestados na representação de posição e tomar a transformada de Fourier da função $\Psi_n^*(q - x/2)\Psi_n(q + x/2)$ em x , ou seja, $(2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} \Psi_n^*(q - x/2)\Psi_n(q + x/2) dx$.

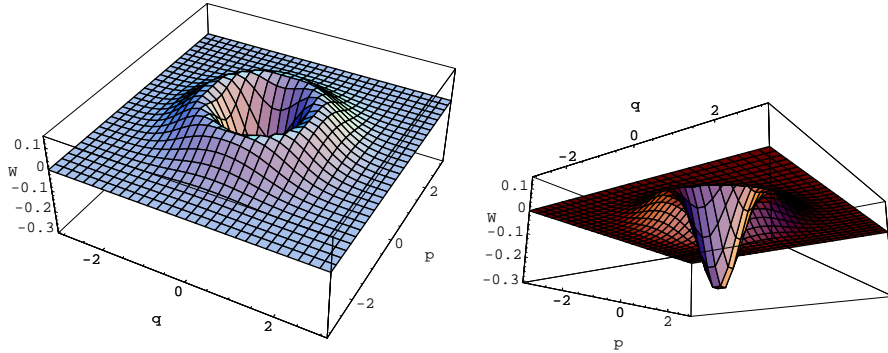


Figura 2.1: Função de Wigner para o autoestado $n = 1$ do oscilador harmônico. À direita, vista inferior com detalhe para a parte negativa.

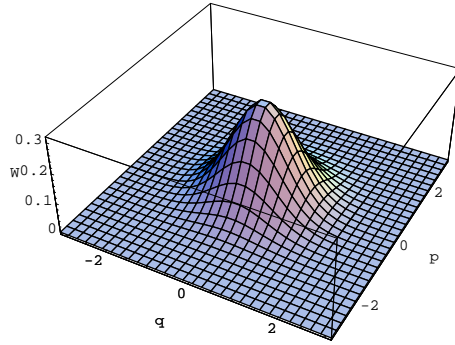


Figura 2.2: Função de Wigner para o estado fundamental do oscilador harmônico.

Já para o primeiro estado excitado do oscilador harmônico, existe uma região negativa na função de Wigner, conforme figura 2.1.

Na verdade, exceto pelo estado fundamental, todos os estados de Fock são estados não-clássicos. No entanto, a função de Wigner do estado fundamental é uma Gaussiana (figura 2.2) em q e p centrada na origem,

$$W_{|0\rangle\langle 0|}(q, p) = \frac{1}{\pi} e^{-q^2 - p^2} \quad (2.50)$$

Com a função de Wigner é possível ilustrar melhor o processo de obtenção de estados coerentes. Reescrevendo o operador deslocamento em termos dos operadores \hat{q} e \hat{p} e definindo $\alpha = u + iv$,

$$D(\alpha) = \exp\{i(v\hat{q} - u\hat{p})\} = e^{-\frac{1}{2}iuv} e^{iv\hat{q}} e^{-iu\hat{p}}. \quad (2.51)$$

Segundo o tratamento usado por Ballentine [19], o operador \hat{p} é um gerador hermitiano de translação no grupo de Galileu. Portanto, $T(\lambda) = e^{-i\lambda\hat{p}}$ é um operador unitário de translação que, atuando nos autovetores de \hat{q} faz $e^{-i\lambda\hat{p}}|q\rangle = |q + \lambda\rangle$. A função de Wigner de um estado coerente será obtida como:

$$\begin{aligned}
W_{|\alpha\rangle\langle\alpha|}(q, p) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx} \langle q - x/2 | \alpha \rangle \langle \alpha | q + x/2 \rangle dx = \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} \langle q - x/2 | D(\alpha) | 0 \rangle \langle 0 | D^\dagger(\alpha) | q + x/2 \rangle dx = \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} e^{iv(q-x/2)} \langle q - x/2 | T(\lambda) | 0 \rangle \times \\
&\quad \times \langle 0 | T^\dagger(\lambda) | q + x/2 \rangle e^{iv(q-x/2)} dx = \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-v)x} \langle (q-u) - x/2 | 0 \rangle \langle 0 | (q-u) + x/2 \rangle dx \quad (2.52)
\end{aligned}$$

A equação (2.52) representa uma Gaussiana deslocada nas direções q, p pelas partes real e imaginária de α .

Outra assinatura quântica notável surge na função de Wigner para a superposição de dois estados coerentes. Escolhendo o parâmetro α de um estado coerente como sendo $\alpha = q_0$, um número real, o estado de superposição $|\psi\rangle = 2^{-1/2}(|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle)$ terá como operador densidade o projetor:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}(|\alpha\rangle\langle\alpha| + |-\alpha\rangle\langle-\alpha| + |\alpha\rangle\langle-\alpha| + |-\alpha\rangle\langle\alpha|).$$

A função de Wigner para $|\alpha\rangle\langle\alpha| + |-\alpha\rangle\langle-\alpha|$ é apenas a soma de duas Gaussianas, uma em centrada em $(q_0, 0)$ e a outra em $(-q_0, 0)$. A parte de interesse está no termo de interferência $|\alpha\rangle\langle-\alpha| + |-\alpha\rangle\langle\alpha|$:

$$\begin{aligned}
W_{|\alpha\rangle\langle-\alpha|} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} \exp\{-(q^2 + (x + q_0)^2)\} dx = \\
&= \frac{1}{2\pi} e^{-q^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(u-2q_0)} \exp\{-\frac{u^2}{4}\} du, \quad u = x + 2q_0 \quad (2.53)
\end{aligned}$$

usando $\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-ipx - x^2/4\} = \pi^{-1/2} 2e^{-p^2}$ e reescrevendo o resultado para o outro termo de interferência obtido trocando $q_0 \rightarrow -q_0$, a função de Wigner para o estado de superposição será dada por:

$$\begin{aligned}
W_{|\psi\rangle\langle\psi|}(q, p) &= \\
&= (2\pi)^{-1} \left(e^{-p^2 - (q-q_0)^2} + e^{-p^2 - (q+q_0)^2} + 2\sqrt{\pi} e^{-p^2 - q^2} \cos(2pq_0) \right) \quad (2.54)
\end{aligned}$$

O último termo da equação acima representa uma oscilação na direção p envolvida por uma Gaussiana na origem. Quanto maior a separação q_0 ,

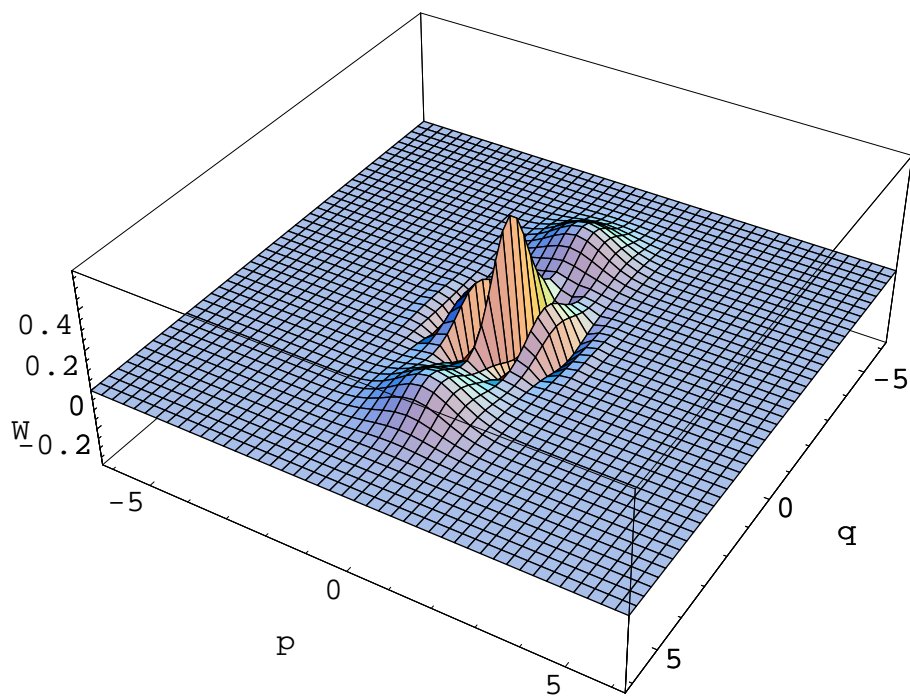


Figura 2.3: Função de Wigner para um estado de superposição de dois estados coerentes.

maior o número de oscilações observado. A figura 2.3 mostra o gráfico do efeito de interferência.

De fato a negatividade da função de Wigner em alguns pontos do espaço traz informações relevantes sobre um estado quântico. Seria interessante no entanto obter uma função de distribuição positiva em todos os pontos do plano qp . A propriedade 2 fornece uma possibilidade de se obter tal distribuição, bastando para isso considerar a projeção do estado ρ em estados coerentes, $\langle \alpha | \rho | \alpha \rangle$. É claro que o quadrado do módulo de tal projeção, é um valor real positivo:

$$\langle \alpha | \rho | \alpha \rangle = \text{Tr}\{\rho | \alpha \rangle \langle \alpha | \} \geq 0. \quad (2.55)$$

Escrevendo $\alpha = 2^{-1}(q + ip)$ e usando a fórmula do traço (2.48), obtém-se uma função de distribuição positiva:

$$Q_\rho(q, p) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W_\rho(q', p') e^{-(q-q')^2 - (p-p')^2} dq' dp' = \frac{1}{2\pi} \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle \quad (2.56)$$

Para um dado estado, a função Q , também chamada de função de Husimi [27], em um ponto é a média ponderada por uma gaussiana em torno do ponto, da função de Wigner correspondente. O fato de ela ser positiva sempre, dá um limite para a área que uma região negativa da função de Wigner pode ocupar. É claro que isso tudo não vem de graça. O preço que se paga pela positividade da função de Husimi é o fato de ela não recuperar as distribuições marginais.

A figura 2.4 mostra as funções de Husimi para o primeiro estado excitado do Oscilador Harmônico e para o estado de superposição de dois estados coerentes $|\psi\rangle = 2^{-1/2}(|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle)$. Devem ser comparadas com as figuras 2.1 e 2.3. A função de Wigner para um estado coerente é uma Gaussiana de variância $1/2$, a função de Husimi para um estado coerente é também Gaussiana, mas de variância 1 . Para o estado de superposição, o termo de interferência tem uma representação dada por

$$(2\pi)^{-1/2} \exp\{-(q^2 + p^2 + q_0^2)\} \cos(q_0 p),$$

que o torna graficamente imperceptível.

As funções de Wigner e Husimi foram obtidas para as representações de posição e momento. É possível no entanto estender os conceitos até agora utilizados para defini-las em uma representação de momento angular, o que foi feito por Agarwal [25] [26]. A generalização da função de Husimi pode ser feita diretamente através da projeção em estados coerentes de spin $|\tau\rangle$:

$$Q_\rho(\theta, \phi) \equiv \frac{2j+1}{4\pi} \langle \tau | \rho | \tau \rangle \quad (2.57)$$

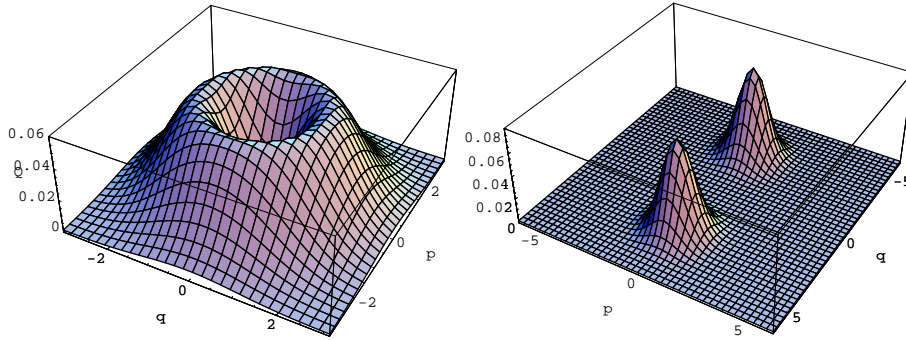


Figura 2.4: À esquerda, Função de Husimi para o autoestado $n = 1$ do oscilador harmônico. À direita, função de Husimi para $|\psi\rangle = 2^{-1/2}(|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle)$.

Para a função de Wigner, Agarwal objetivou preservar a propriedade 2, isto é,

$$\text{Tr}\{\hat{A}\hat{B}\} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi W_{\hat{A}} W_{\hat{B}} \sin\theta d\theta d\phi \quad (2.58)$$

Nesta dissertação não serão apresentados os procedimentos utilizados por ele para obter a generalização. Resumidamente pode-se dizer que, para a álgebra de momento angular, o operador deslocamento que aparece na função característica

$$\exp\{-iu\hat{q} - iv\hat{p}\},$$

é trocado pelo tensor esférico

$$\hat{T}_{KQ} = \sum_{m=-j}^j (-1)^{j-m} \sqrt{2K+1} \begin{pmatrix} j & K & j \\ -m & Q & m-Q \end{pmatrix} |j, m\rangle \langle j, m-Q|. \quad (2.59)$$

O símbolo

$$\begin{pmatrix} j & K & j \\ -m & Q & m-Q \end{pmatrix}$$

é conhecido como símbolo $3-j$ de Wigner [19] e está relacionado aos coeficientes de Clebsch-Gordan. A *matriz característica*, correspondente da função característica, é definida como:

$$\varrho_{KQ} \equiv \text{Tr}\{\rho \hat{T}_{KQ}\} \quad (2.60)$$

Os elementos ϱ_{KQ} da matriz característica nada mais são que os coeficientes da expansão do operador densidade na base de tensores esféricos. A função

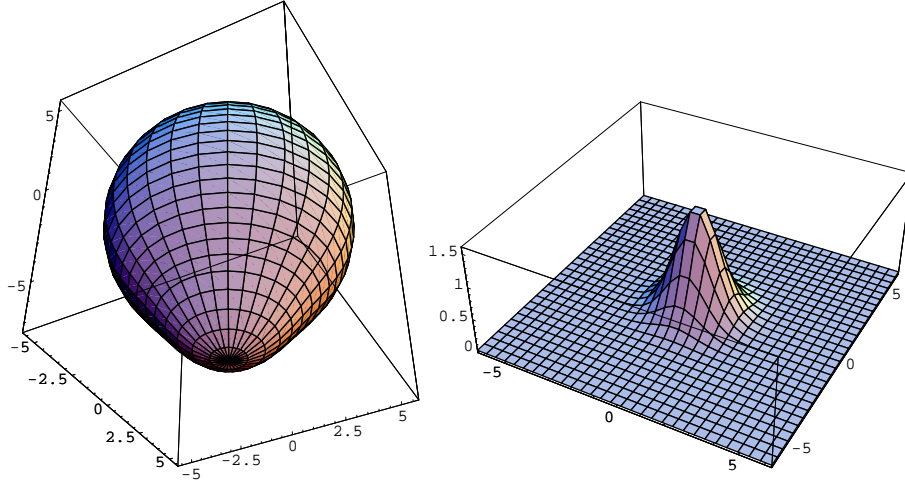


Figura 2.5: Função de Wigner para o estado de Dicke $|5, -5\rangle$. À direita, vista projetiva no plano complexo dada pela equação $\tau = e^{i\phi} \tan \theta/2$.

de Wigner para momento angular pode ser então escrita de forma única em termos de Harmônicos esféricos $Y_{KQ}(\theta, \phi)$:

$$W_\rho(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \sum_{K=0}^{2j} \sum_{Q=-K}^K \varrho_{KQ} Y_{KQ}(\theta, \phi). \quad (2.61)$$

Para visualizar as funções de Wigner esféricas, pode-se usar um esquema de relevo em uma esfera de raio $\sqrt{j(j+1)}$. A representação gráfica se faz então simplesmente parametrizando a esfera com variações no raio de acordo com os valores da função de Wigner. As figuras 2.5 2.6 mostram as funções de Wigner para estados de Dicke $|5, -5\rangle$ e $|5, -3\rangle$. Para visualizar estados na região do pólo sul, é interessante usar uma representação projetiva, com uma transformação de variáveis: $\tau = e^{i\phi} \tan \theta/2$.

2.3 Sistemas Compostos e Emaranhamento

A descrição de um sistema físico através da Mecânica Quântica é feita através do conceito de estado. O estado quântico de um sistema, representado através de um operador de estado ou operador densidade atuando em um espaço vetorial (espaço de Hilbert), pode ser definido a partir da seqüência de procedimentos experimentais e preparações pelos quais esse sistema físico passou [19, 28]. Com isso, ficam determinadas as probabilidades de se obter um determinado resultado ao se medir uma grandeza física qualquer. Por

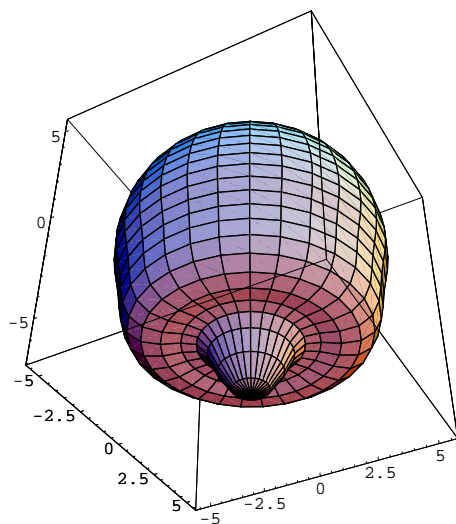


Figura 2.6: Função de Wigner para o estado de Dicke $|5, -3\rangle$.

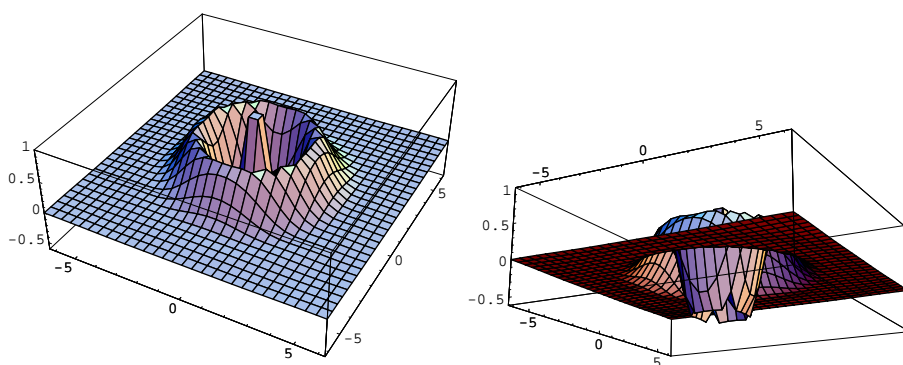


Figura 2.7: Função de Wigner para o estado de Dicke $|5, -3\rangle$. Vista projetiva no plano complexo dada pela equação $\tau = e^{i\phi} \tan \theta/2$. A direita, detalhe da parte negativa.

esse ponto de vista, é possível pensar num estado quântico como o conjunto de informações que se pode obter de um sistema físico através de processos de medição. Se o sistema físico em questão for uma partícula, por exemplo, pode-se perguntar a respeito de diversas propriedades físicas da partícula, como sua posição, sua velocidade, seu momento angular, sua polarização, etc. As propriedades físicas de um sistema podem ser agrupadas de acordo com os graus de liberdade do mesmo. Assim, a posição de uma partícula e seu spin são dois graus de liberdade distintos da partícula ou, no caso de duas partículas, as posições de cada uma delas são graus de liberdade distintos do sistema composto. Associa-se então um espaço vetorial para cada grau de liberdade do sistema que está sendo descrito e pode-se falar do estado do sistema em relação a um desses graus de liberdade. Por exemplo, pode-se falar do estado de *spin* ou do estado espacial da partícula, etc.

O estado quântico da partícula deve fornecer distribuições de probabilidade para possíveis medições de grandezas físicas associadas a estes graus de liberdade. Quando, para um dado estado quântico, existe um teste cujo resultado é predizível com probabilidade 1, diz-se que este estado é puro e pode-se atribuir a ele um vetor de estado $|\Psi\rangle$ no espaço de Hilbert associado àquele teste. O operador de estado torna-se neste caso um *projetor* $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ e possui a propriedade $\text{Tr}\{\rho^2\} = 1$, já que neste caso $|\Psi\rangle\langle\Psi||\Psi\rangle\langle\Psi| = |\Psi\rangle\langle\Psi|$. Esse tipo de estado representa a descrição quântica mais completa possível de um sistema.

Fato notável em mecânica quântica: o conhecimento separado das partes, isto é, do estado do sistema em cada grau de liberdade separado, nem sempre determina o estado do todo. Para o caso de um estado puro, por exemplo, o estado do sistema está em um espaço vetorial que é produto tensorial dos espaços associados aos vários graus de liberdade do sistema, isto é,

$$|\Psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \cdots \otimes \mathcal{H}_n. \quad (2.62)$$

Para os propósitos deste trabalho, será suficiente considerar apenas sistemas com dois graus de liberdade:

$$|\Psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2. \quad (2.63)$$

Uma base ortonormal em \mathcal{H} é obtida a partir de bases ortonormais $\{|u_i\rangle\}$ e $\{|v_\alpha\rangle\}$ em \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 de dimensões N_1 e N_2 como sendo $\{|u_i\rangle \otimes |v_\alpha\rangle\}$. O vetor de estado $|\Psi\rangle$ pode então ser escrito em termos desta base:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,\alpha} c_{i\alpha} |u_i\rangle \otimes |v_\alpha\rangle. \quad (2.64)$$

Em geral, os $N_1 N_2$ números dessa decomposição não podem ser escritos como produtos $a_i b_\alpha$ de N_1 números a_i e N_2 números b_α . Isso significa que não é

possível associar todo estado $|\Psi\rangle$ a estados puros nos subespaços \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 separadamente; trata-se de um estado cujas partes estão emaranhadas.

A matriz que representa um operador de estado em \mathcal{H} possui $N_1^2 N_2^2$ números complexos, ao passo que as matrizes que representam operadores nos espaços \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 possuem no total $N_1^2 + N_2^2$ números. Ou seja, há casos em que⁵ existe informação presente nas *correlações* entre as partes. Isso significa que em muitos casos as grandezas físicas de um grau de liberdade estão em correspondência com grandezas físicas de outro. Medir grandezas físicas relacionadas a um grau de liberdade apenas, significa obter a grandeza especificada independente dos outros graus de liberdade. Portanto, se um operador \hat{A} atua em \mathcal{H}_1 , sua extensão em $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ será dada por:

$$\hat{A}_1 = \hat{A} \otimes \mathbf{1}, \quad (2.65)$$

com forma análoga para operadores que atuam em \mathcal{H}_2 . Com esta definição, é fácil perceber que nem sempre o produto $\langle \hat{A}_1 \rangle \langle \hat{B}_2 \rangle$ é igual ao valor médio do produto $\hat{A}_1 \hat{B}_2$, i.e., há casos em que $\langle \hat{A}_1 \rangle \langle \hat{B}_2 \rangle \neq \langle \hat{A}_1 \hat{B}_2 \rangle$.

O valor médio do operador \hat{A}_1 em um estado representado por ρ é obtido pelo traço:

$$\langle \hat{A}_1 \rangle = \text{Tr}\{\rho \hat{A}_1\}. \quad (2.66)$$

Pode-se obter uma fórmula para este traço escrevendo-se a matriz do operador \hat{A}_1 em termos de uma base ortonormal, i.e., se:

$$\hat{A} = \sum_{ij} a_{ij} |u_i\rangle \langle u_j|, \quad (2.67)$$

a extensão de \hat{A} em \mathcal{H} será dada por:

$$\hat{A}_1 = \sum_{ij\alpha\beta} a_{ij} \delta_{\alpha\beta} |u_i\rangle \otimes |v_\alpha\rangle \langle u_j| \otimes \langle v_\beta| \quad (2.68)$$

Se um estado é representado pela matriz do operador de estado,

$$\rho = \sum_{ij\alpha\beta} \lambda_{ij\alpha\beta} |u_i\rangle \otimes |v_\alpha\rangle \langle u_j| \otimes \langle v_\beta|, \quad (2.69)$$

o valor médio de \hat{A} pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\rho \hat{A}_1\} &= \sum_{ij\alpha\beta} a_{ij} \delta_{\alpha\beta} \lambda_{ji\beta\alpha} = \\ &= \sum_{ij\alpha} a_{ij} \lambda_{ji\alpha\alpha} = \text{Tr}\{\rho_1 \hat{A}\}, \end{aligned} \quad (2.70)$$

⁵É claro que em alguns casos pode-se reduzir essa diferença.

onde ρ_1 é chamado operador de estado reduzido e é dado pelo traço parcial:

$$\rho_1 = \text{Tr}_2\{\rho\} = \sum_{\alpha} \lambda_{ij\alpha\alpha} |u_i\rangle\langle u_j|. \quad (2.71)$$

Ao se fazer o traço parcial dado pela equação (2.71), há perda de informação. O resultado disso é que o operador densidade reduzido dado por (2.71) nem sempre é puro e portanto $\text{Tr}\{\rho_1^2\} \leq 1$. No entanto quando ρ possui a forma $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$, i.e., quando é possível estabelecer estados definidos em cada subsistema, os operadores densidade reduzidos são puros e $\text{Tr}\{\rho_1^2\} = 1$. Neste caso, diz-se que o estado é fatorável.

Uma medida das correlações entre dois sistemas pode portanto ser obtida através da *Entropia Linear* definida como:

$$S = 1 - \text{Tr}\{\rho_1^2\}. \quad (2.72)$$

É importante notar que no caso de existirem dois subsistemas apenas, não importa qual dos operadores densidade reduzidos é utilizado para definir a entropia linear. Para mostrar isso utiliza-se da *decomposição de Schmidt* [28]. Essa decomposição pode ser vista como uma forma simplificada de se escrever (2.64). Dado um vetor de estado $|\Psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, é sempre possível encontrar bases ortogonais $\{|u_{\alpha}\rangle\}$ de \mathcal{H}_1 e $\{|v_{\alpha}\rangle\}$ de \mathcal{H}_2 de forma que:

$$|\Psi\rangle = \sum_k^{N_1} \alpha_k |u_{\alpha}\rangle \otimes |v_{\alpha}\rangle \quad (2.73)$$

com $\alpha_k > 0$, $\sum_k^{N_1} \alpha_k^2 = 1$, sendo N_1 a dimensão do menor dos subsistemas. Segundo esta decomposição, o operador de estado ρ poderá ser escrito como:

$$\rho = \sum_{ij} \alpha_i \alpha_j^* |u_i\rangle \otimes |v_i\rangle \langle u_j| \otimes \langle v_j| \quad (2.74)$$

e os operadores de estado reduzidos serão dados por:

$$\rho_1 = \sum_i \alpha_i \alpha_i^* |u_i\rangle \langle u_i|, \quad \rho_2 = \sum_i \alpha_i \alpha_i^* |v_i\rangle \langle v_i|, \quad (2.75)$$

possuindo portanto o mesmo espectro.

Capítulo 3

O Modelo de Emparelhamento

Neste capítulo, será estudada a Hamiltoniana do modelo de Emparelhamento, um modelo da Física nuclear que apresenta uma transição de fase quântica como função de um parâmetro de acoplamento χ . A abordagem a ser feita tem como objetivo mostrar que existe um análogo clássico para essa transição. O modelo de emparelhamento é do tipo “campo médio”, e a projeção de sua Hamiltoniana em estados coerentes determina uma dinâmica clássica para uma variável complexa, conforme descrito anteriormente. Deve-se ressaltar que o objetivo deste capítulo é o de introduzir os métodos de caracterização de uma transição de fase quântica e seu análogo clássico no contexto deste particular modelo. Os resultados porém são gerais para modelos de tipo campo médio tais como o modelo de Lipkin e Jaynes-Cummings entre outros. O leitor interessado em estudar o modelo com maiores detalhes pode consultar [8].

3.1 O modelo

O modelo de Emparelhamento foi estudado sob o ponto de vista de sistemas dinâmicos em [9] e é descrito por uma Hamiltoniana dada por operadores de criação e aniquilação de pares de férmions em um sistema de dois níveis com energias $-\frac{1}{2}\epsilon$ e $+\frac{1}{2}\epsilon$ de mesma degenerescência. Esta degenerescência limita o número máximo de partículas, N , que cada nível comporta.

Devido à relação de comutação entre os operadores fermiônicos que compõem a Hamiltoniana do modelo, pode-se escrevê-la em termos de operadores de spin L_z , S_z , L_{\pm} , S_{\pm} que satisfazem as relações de comutação $[J_z, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}$, $[J_+, J_-] = 2J_z$ ($\hbar = 1$). Um estado $|\psi\rangle = |k\rangle \otimes |m\rangle$ onde o sistema tem k (m) partículas no nível inferior (superior) é autoestado do operador L_z (S_z) com autovalor $\frac{1}{2}(k - N/2)$ ($\frac{1}{2}(m - N/2)$). Como as partículas são

criadas e aniquiladas aos pares, i.e., $k = 0, 2, 4 \dots, N$, os autovalores de L_z e S_z vão de $-N/4$ a $N/4$ em intervalos inteiros e podemos definir $j = N/4$ como sendo o spin total. Feita essa correspondência, obtém-se:

$$H = \epsilon(L_z - S_z) - G(L_+ + S_+)(L_- + S_-), \quad (3.1)$$

onde G é um parâmetro que descreve a interação entre partículas, L_{\pm} e S_{\pm} criam e aniquilam pares de partículas nos respectivos níveis. A Hamiltoniana (3.1) comuta com os operadores L^2 , S^2 e $L_z + S_z$. Considerando os pares de partículas criadas a partir do vácuo, $L_z = -S_z$. Usando esta relação e $L^2 = L_+L_- + L_z^2 - L_z$ pode-se escrever a Hamiltoniana do modelo como sendo:

$$H = 2\epsilon L_z - 2G[j(j+1) - L_z^2] - G[L_+S_- + L_-S_+], \quad (3.2)$$

lembrando apenas que j é um número (spin total). Para manter proporcionalidade na dependência em N dos termos da Hamiltoniana, define-se um novo parâmetro de acoplamento como sendo $\chi = NG/\epsilon = 4jG/\epsilon$. Pode-se então reescrever a Hamiltoniana (3.2) em unidades de ϵ como sendo:

$$\frac{H}{\epsilon} = 2L_z - \frac{\chi}{2}[(j+1) - \frac{L_z^2}{j}] - \frac{\chi}{4j}[L_+S_- + L_-S_+]. \quad (3.3)$$

Para obtenção do espectro monta-se a matriz Hamiltoniana na base:

$$|j \ m\rangle = |j \ L_z\rangle \otimes |j \ -L_z\rangle.$$

Nessa base, a matriz Hamiltoniana será então escrita:

$$\begin{aligned} \frac{H}{\epsilon} = & \left(2m - \frac{\chi}{2} \left(j + 1 - \frac{m^2}{j}\right)\right) \delta_{n,m} - \\ & - \frac{\chi}{4} \left(j + 1 - \frac{m}{j}(m+1)\right) \delta_{n,m+1} - \\ & - \frac{\chi}{4} \left(j + 1 - \frac{m}{j}(m-1)\right) \delta_{n,m-1}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

3.2 Espectro e Transição de Fase Quântica

O espectro dos autovalores de (3.4) para diferentes valores de j tende a uma curva universal no limite $j \rightarrow \infty$, como é sugerido pela figura 3.1. A transição de fase quântica é observada mediante variação do parâmetro de acoplamento χ . Na figura 3.2 observa-se a mudança na distribuição dos níveis de energia do espectro à medida que variamos o parâmetro χ .

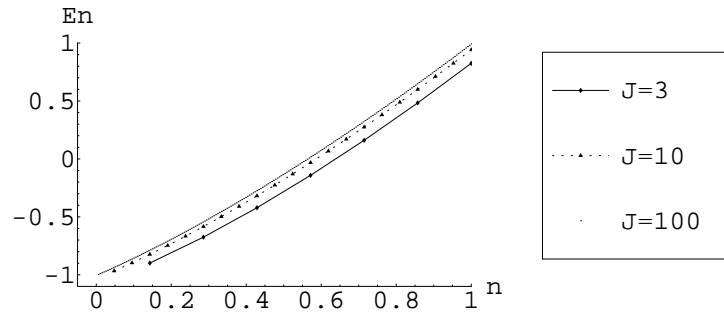


Figura 3.1: $E_n/n_{max} \times n/n_{max}$ para diferentes valores de j

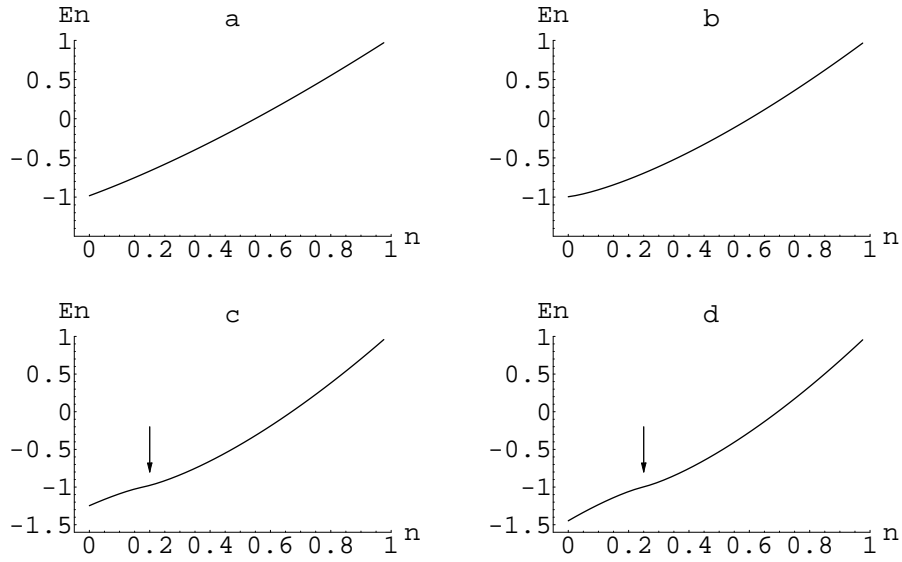


Figura 3.2: $E_n/n_{max} \times n/n_{max}$ para (a) $\chi = 0,5$ (b) $\chi = 1,0$ (c) $\chi = 2,0$ e (d) $\chi = 2,5$; $j = 100$

Verifica-se na figura, na indicação da seta, uma região de inflexão no espectro. Trata-se de uma acumulação de níveis que existe apenas quando χ é maior que 1 (no gráfico referente a $\chi = 1$ ela começa a surgir nos níveis bem próximos do fundamental $n/n_{max} \approx 0$). Esta mudança qualitativa no espectro está relacionada com a dinâmica da variável complexa associada aos estados coerentes de spin, dada pelo limite clássico da Hamiltoniana Quântica através de uma projeção em estados coerentes [10]. Nos modelos do tipo campo médio pode-se mostrar que este limite clássico é único no sentido em que as equações de Heisenberg para operadores tendem a uma equação para números, i.e., as relações de comutação e portanto as correções quânticas vão a zero no limite $N \rightarrow \infty$.

3.3 Dinâmica Clássica

Conforme dito anteriormante, para obter uma dinâmica para a variável complexa, deve ser feita a projeção da Hamiltonina Quântica em estados coerentes de spin, isto é, a Hamiltoniana Clássica:

$$\mathcal{H}(\zeta) = \langle \zeta | H | \zeta \rangle \quad (3.5)$$

gera uma evolução temporal para a variável complexa ζ de tal forma que é possível identificar o análogo clássico da transição de fase quântica. Conforme explicado no capítulo 2, a maneira usual de se obter o estado coerente de spin é escrevê-lo diretamente em função de um parâmetro complexo ω como sendo: $|\omega\rangle = (1 + |\omega|^2)^{-j} e^{\omega J_+} |j, -j\rangle$. Com isso, obtém-se uma Hamiltoniana Clássica $\mathcal{H}(\omega)$. No caso do modelo de emparelhamento, faz-se

$$\begin{aligned} |\omega\rangle &= |\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle, \\ |\omega_i\rangle &= \frac{1}{(1 + |\omega_i|^2)^j} e^{\omega_i J_+} |j, -j\rangle. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Para obter \mathcal{H} , basta calcular os valores esperados de L_z , L_z^2 e L_+ , S_- . Para o cálculo do valor esperado de L_z :

$$\begin{aligned} \langle \omega_1 | L_z | \omega_1 \rangle &= \frac{1}{(1 + |\omega_1|^2)^{2j}} \sum_{k=0}^{2j} |\omega_1|^{2k} \binom{2j}{k} (-j + k) \\ \sum_{k=1}^{2j} k |\omega_1|^{2k} \binom{2j}{k} &= |\omega_1|^2 \frac{\partial}{\partial |\omega_1|^2} \sum_{k=0}^{2j} |\omega_1|^{2k} \binom{2j}{k} = \\ &= |\omega_1|^2 \frac{\partial}{\partial |\omega_1|^2} (1 + |\omega_1|^2)^{2j} = 2j |\omega_1|^2 (1 + |\omega_1|^2)^{2j-1}, \end{aligned}$$

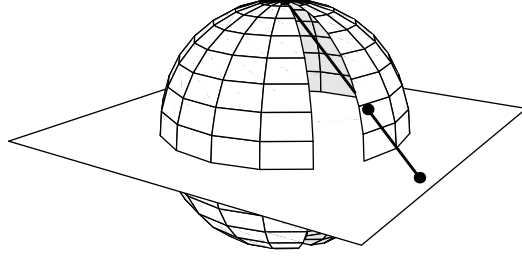


Figura 3.3: Projeção estereográfica dada pela equação (3.11)

$$\begin{aligned} \langle \omega_1 | L_z | \omega_1 \rangle &= \frac{-j(1 + |\omega_1|^2)^{2j} + 2j|\omega_1|^2(1 + |\omega_1|^2)^{2j-1}}{(1 + |\omega_1|^2)^{2j}} \\ &= -j \frac{(1 - |\omega_1|^2)}{(1 + |\omega_1|^2)}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Cálculos análogos levam aos seguintes resultados:

$$\frac{\langle \omega | L_z^2 | \omega \rangle}{\langle \omega | \omega \rangle} = j^2 \frac{(1 - |\omega_1|^2)^2}{(1 + |\omega_1|^2)^2} + 2j \frac{|\omega_1|^2}{1 + |\omega_1|^2}, \quad (3.8)$$

$$\frac{\langle \omega | L_+ S_- | \omega \rangle}{\langle \omega | \omega \rangle} = 4j^2 \frac{\omega_1^* \omega_2}{(1 + |\omega_1|^2)(1 + |\omega_2|^2)}. \quad (3.9)$$

A Hamiltoniana Clássica pode então ser escrita como:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -2\epsilon j \frac{(1 - |\omega_1|^2)}{(1 + |\omega_1|^2)} \\ &\quad - 2G \left[j(j+1) - j^2 \frac{(1 - |\omega_1|^2)^2}{(1 + |\omega_1|^2)^2} - 2j \frac{|\omega_1|^2}{1 + |\omega_1|^2} \right] \\ &\quad - \frac{8Gj^2 \operatorname{Re}\{\omega_1^* \omega_2\}}{(1 + |\omega_1|^2)(1 + |\omega_2|^2)}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

A expressão (3.10) é simplificada ao se fazer a projeção estereográfica ilustrada pela figura 3.3. Cada ponto do plano complexo é projetado na esfera de raio 1. Esta transformação é dada por:

$$\omega_1 = \frac{\sqrt{1 - \eta_1^2}}{1 - \eta_1} e^{i\theta_1}; \quad \omega_2 = \frac{\sqrt{1 - \eta_2^2}}{1 - \eta_2} e^{i\theta_2} \quad (3.11)$$

Para encontrar as equações de movimento para as variáveis η, θ deve-se fazer o cálculo:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \eta} = ig \left\{ \frac{\partial \omega^*}{\partial \theta} \frac{\partial \omega}{\partial \eta} - \frac{\partial \omega}{\partial \theta} \frac{\partial \omega^*}{\partial \eta} \right\} \dot{\theta} \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta} = -ig \left\{ \frac{\partial \omega^*}{\partial \theta} \frac{\partial \omega}{\partial \eta} - \frac{\partial \omega}{\partial \theta} \frac{\partial \omega^*}{\partial \eta} \right\} \dot{\eta} \quad (3.13)$$

Ao se fazer este cálculo, o fator g acaba simplificando a expressão entre $\{\}$. O par (η, θ) pode ser considerado canonicamente conjugado a menos de um fator de escala j :

$$\dot{\eta} = -j \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta}; \quad (3.14)$$

$$\dot{\theta} = j \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \eta}. \quad (3.15)$$

Reescrevendo a Hamiltoniana em função das novas variáveis, $\eta_1, \eta_2, \theta_1, \theta_2$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -2\epsilon j \eta_1 - 2Gj(j+1) + 2Gj^2 \eta_1^2 + \frac{2Gj}{4}(1 - \eta_1^2) \\ & - 2Gj^2 \sqrt{(1 - \eta_1^2)(1 - \eta_2^2)} \cos(\theta_2 - \theta_1). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Deve-se usar a constante de movimento $L_z + S_z = 0$ para simplificar a equação acima. Quando projetada em estados coerentes, essa relação pode ser escrita como sendo $\eta_1 + \eta_2 = 0$. Re-escrevendo a Hamiltoniana em termos de $\eta = -\eta_1 = \eta_2$:

$$\mathcal{H} = 2\epsilon j \eta - 2Gj - 2Gj^2(1 - \eta^2) \left[-\frac{1}{4j} + 1 + \cos(\theta_2 - \theta_1) \right]. \quad (3.17)$$

Finalmente, a equação desejada é obtida escalando (3.17) com $2\epsilon j$ e tomando o limite clássico $1/N \rightarrow 0$. Fazendo isso e desprezando termos constantes que não interferem nas equações canônicas, a equação se torna então:

$$E = \eta - \frac{\chi}{2}(1 - \eta^2) \cos^2 \alpha, \quad (3.18)$$

sendo $\chi = NG/\epsilon$ e $\alpha = (\theta_2 - \theta_1)/2$. A evolução temporal das variáveis η, α será dada por:

$$\dot{\eta} = -\frac{\partial E}{\partial \alpha} = -\frac{\chi}{2}(1 - \eta^2) \sin 2\alpha; \quad (3.19)$$

$$\dot{\alpha} = \frac{\partial E}{\partial \eta} = 1 + \chi \eta \cos^2 \alpha. \quad (3.20)$$

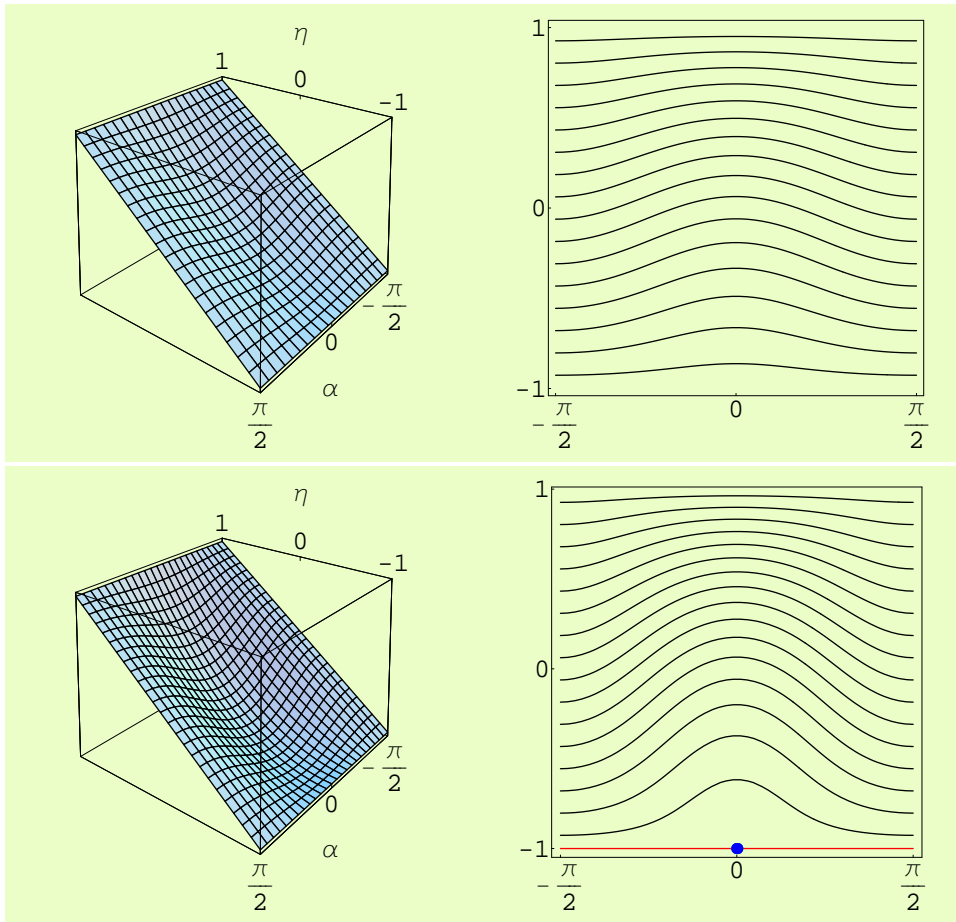


Figura 3.4: Gráficos $E(\eta, \alpha)$ e curvas de energia constante. Acima $\chi = 0,5$;
 Abaixo $\chi = 1,0$.

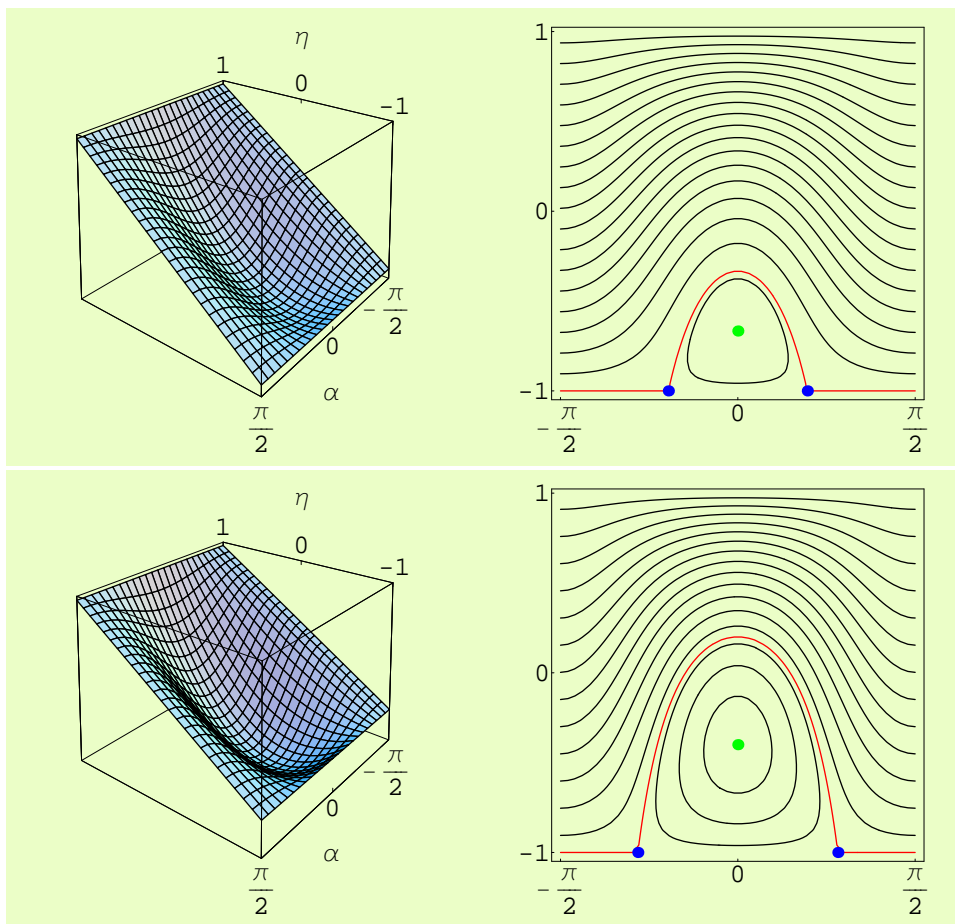


Figura 3.5: Gráficos $E(\eta, \alpha)$ e curvas de energia constante Acima $\chi = 1,5$;
 Abaixo $\chi = 2,5$.

A região de inflexão no espectro quântico possui uma contrapartida na dinâmica clássica. As figuras 3.4 e 3.5 mostram os gráficos de energia em função de η, α para diversos valores de χ . Ao lado de cada gráfico de energia é mostrado o retrato de fases correspondente.

Observa-se que em $\chi > 1$ há uma mudança qualitativa no aspecto das soluções: o potencial passa a exibir uma região “confinante”. A dinâmica passa a se parecer com a de um pêndulo. Devido a esse confinamento, as órbitas de energia confinada formam curvas fechadas. Como no pêndulo, isso corresponde a um movimento vibracional. Para os outros valores de energia o movimento é rotacional, periódico em π .

Existe uma órbita que separa os dois tipos de movimento. Ela é chamada de *órbita homoclínica* tem período infinito e associada a ela temos dois pontos de equilíbrio instável. No pêndulo estes pontos correspondem a $\theta = \pm\pi/2$. Já para o presente sistema esses pontos dependem do parâmetro χ , e podem ser determinados juntamente com os outros pontos de equilíbrio da maneira usual, fazendo-se $\dot{\eta} = \dot{\alpha} = 0$, o que mostra a existência de dois pontos instáveis:

$$P_{\pm} = (\eta, \alpha) = \left(-1, \arccos \frac{\pm 1}{\sqrt{\chi}} \right) \quad (3.21)$$

e um estável:

$$P_0 = \left(-\frac{1}{\chi}, 0 \right). \quad (3.22)$$

Terminam aqui as semelhanças entre essa dinâmica e a do pêndulo. Há um salto na periodicidade das soluções, o que não ocorre no pêndulo: a órbita homoclínica é periódica em $\arccos \frac{1}{\sqrt{\chi}}$, e as soluções do regime rotacional são periódicas em π .

Para compreensão desse salto na periodicidade, é necessário retomar a projeção estereográfica. Essa projeção colocou a dinâmica numa esfera¹. Em $\eta = \pm 1$ existem dois pontos que correspondem aos pólos norte e sul da esfera. Isso significa que tanto os pontos dados por P_{\pm} como todos os pontos na reta $\eta = -1$ das figuras 3.4 e 3.5 são o mesmo ponto. As figuras 3.6 e 3.7 mostram o espaço de fases na esfera. Através delas é fácil entender o que ocorre realmente. Os ângulos $\pm \arccos \frac{1}{\sqrt{\chi}}$ na verdade são as inclinações das retas tangentes à órbita homoclínica no ponto crítico do pólo sul ($\eta = -1$).

Os retratos de fase da dinâmica clássica obtidos devem ser comparados com a função de Husimi para os diversos autoestados da Hamiltoniana do modelo. A função de Husimi é definida em função dos estados coerentes

¹O pêndulo deve ser mapeado no cilindro infinito.

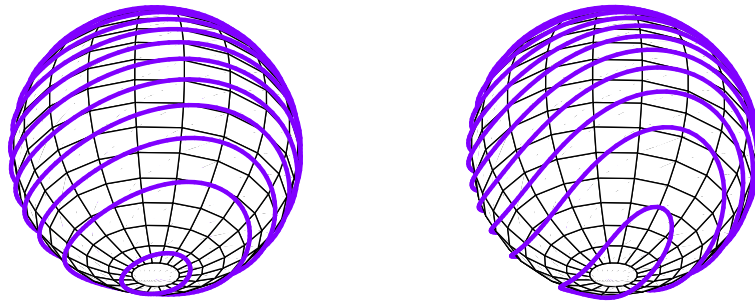


Figura 3.6: Projeção do espaço de fases na esfera: Esquerda $\chi = 0,5$; Direita $\chi = 1,0$.

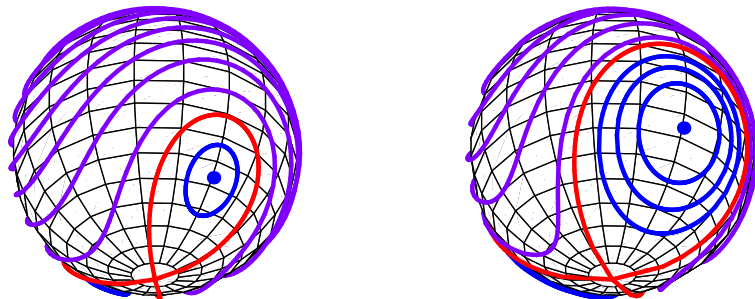


Figura 3.7: Projeção do espaço de fases na esfera: Esquerda $\chi = 1,5$; Direita $\chi = 2,5$.

atômicos como sendo:

$$h_{\Psi} = \frac{2j+1}{4\pi} |\langle \omega | \Psi \rangle|^2 \quad (3.23)$$

A expansão dos estados coerentes atômicos em estados de Dicke $|j S_z\rangle \otimes |j L_z\rangle = |m_1 m_2\rangle$ é dada por

$$|\omega\rangle = \sum_{k,l} \frac{1}{(1+|\omega_1|^2)^j} \frac{1}{(1+|\omega_2|^2)^j} \sqrt{\frac{(2j)!}{(2j-k)!(2j-l)!}} \times \frac{(\omega_1)^k (\omega_2)^l}{\sqrt{k!} \sqrt{l!}} | -j+k \ -j+l \rangle. \quad (3.24)$$

Simplificando a expressão através do vínculo $L_z = -S_z$ e aplicando a projeção estereográfica, chega-se à expressão para a função de Husimi:

$$h_{\Psi}(\eta, \alpha) = \frac{2j+1}{4\pi} \left| \frac{1}{4^j} \sum_{m=-j}^j c_m (1-\eta)^{j-m} (1+\eta)^{j+m} \frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!} \exp\{-2im\alpha\} \right|^2 \quad (3.25)$$

onde c_m é obtido da expansão $|\Psi\rangle = \sum c_m |m \ -m\rangle$.

A figura 3.8 mostra a função de Husimi para um autoestado da Hamiltoniana obtido com $j = 100$, correspondente à energia $E = -1.00223$. Esse valor está bem próximo do valor de $E = -1$ para a energia da órbita homoclínica clássica, e a função de Husimi se distribui em torno desta, a linha vermelha na figura 3.7, direita. Já no pólo sul da esfera, há uma região com alta probabilidade de encontrar a partícula. Essa região corresponde ao ponto de equilíbrio instável associado à órbita homoclínica, em estreita relação com o fato de esta órbita ter período infinito², conforme mostra figura 3.13.

A figura 3.9 mostra duas funções de Husimi para o estado fundamental do modelo com acoplamento $\chi = 0,5$. A primeira, é obtida da Hamiltoniana com $j = 10$ e a outra com $j = 100$. O aumento de j resulta em uma diminuição na área média da distribuição. Isso dá uma certa compreensão em relação ao limite clássico $j \rightarrow \infty$: a área média da distribuição se torna um ponto quando j atinge este limite. Por último, a figura 3.10 mostra a função de Husimi para o estado fundamental depois da transição. Observa-se uma diminuição drástica na intensidade da distribuição. Na verdade essa distribuição está dividida em duas, a outra parte se encontra na face oculta da esfera.

²Para o cálculo do período das órbitas, vide Apêndice

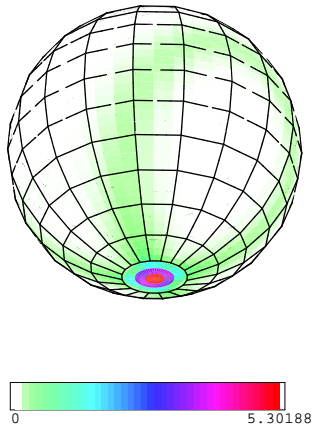


Figura 3.8: Função de Husimi para $\chi = 2,5$, $E = -1.00223$, $j = 100$

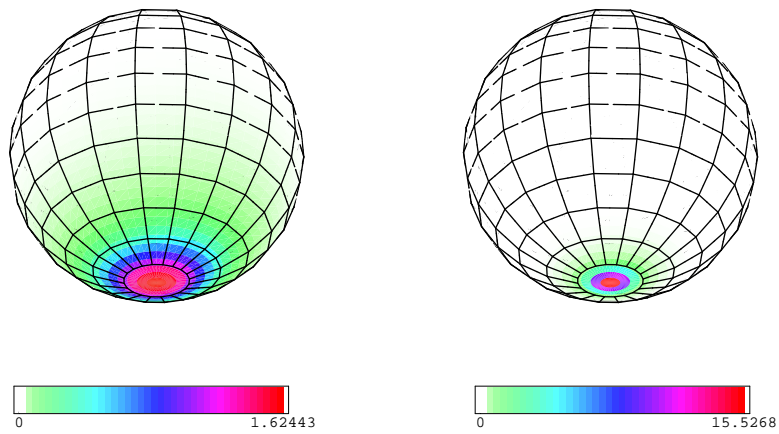


Figura 3.9: Função de Husimi para $\chi = 0,5$, estado fundamental. Esquerda: $j = 10$. Direita: $j = 100$

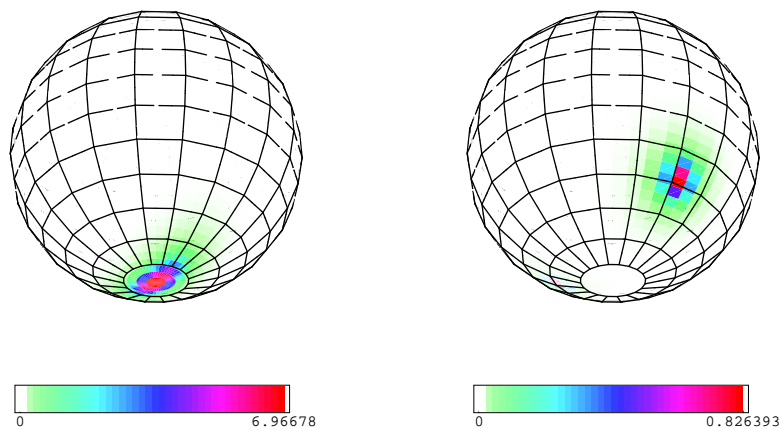


Figura 3.10: Função de Husimi do estado fundamental, $j = 100$. Esquerda: $\chi = 1,0$, Direita: $\chi = 1,5$.

3.4 Transição de Regime

É possível estabelecer uma relação entre a transição de fase quântica e a transição de fase na dinâmica clássica correspondente dada pela bifurcação de um ponto de equilíbrio em dois e pelo surgimento de uma região de órbitas periódicas fechadas, com uma separatriz associada a um ponto de equilíbrio hiperbólico³. A acumulação de níveis no espectro quântico está associada ao surgimento de uma órbita homoclínica, de período infinito, na dinâmica clássica, no sentido em que as duas coisas ocorrem em um mesmo valor de energia. A figura 3.11 mostra o espectro quântico em função do parâmetro χ . O espectro forma um “joelho” na região próxima a $\chi = 1$. Este comportamento também foi observado no modelo de Lipkin por Heiss e Müller [6] e consiste numa diminuição da diferença de energia entre níveis adjacentes. Classicamente, essa acumulação de níveis está intimamente ligada ao período das órbitas, conforme mostra a figura 3.13.

³Do ponto de vista da física nuclear, isso corresponde a uma deformação do núcleo descrito pelo modelo.

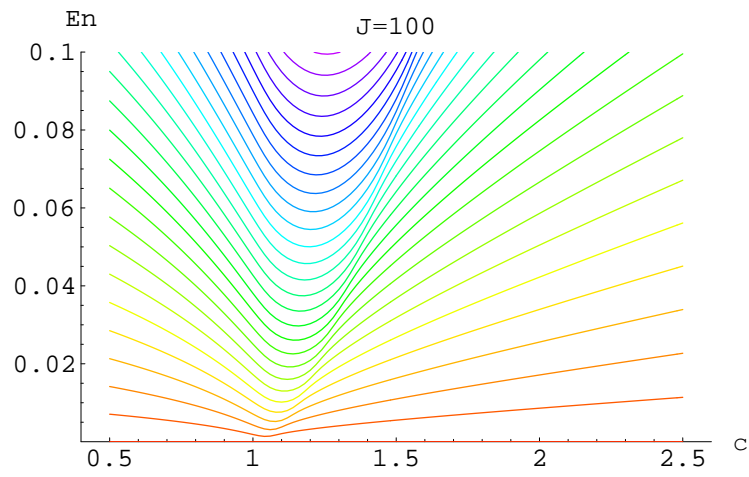


Figura 3.11: Espectro da energia (unidades arbitrárias) em função do parâmetro χ .

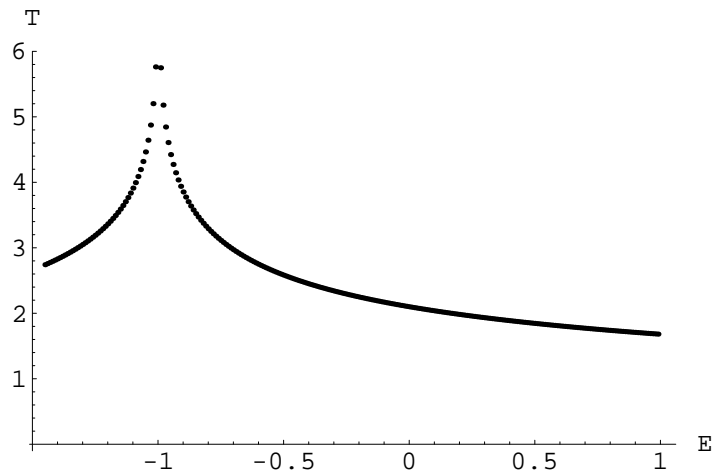


Figura 3.12: Período das órbitas em função da energia para $\chi = 2,5$. Para valores de $E \leq -1$, regime vibracional; para $E \geq -1$, regime rotacional.

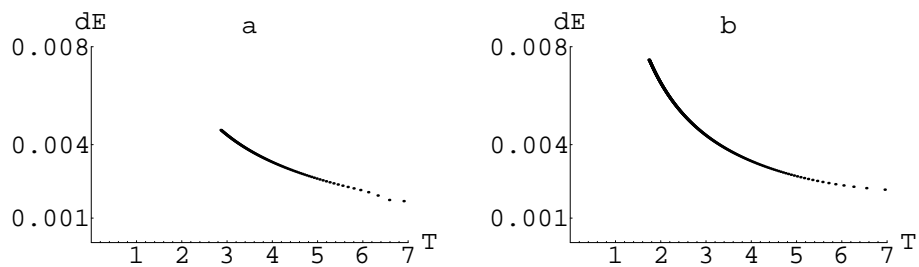


Figura 3.13: Diferença de energia entre níveis no espectro quântico em função do período das órbitas clássicas correspondentes, $\chi = 2,5$. Em (a), regime vibracional, em (b) regime rotacional.

Capítulo 4

O Modelo de Dicke para Super-radiância

A Super-radiância é um fenômeno coletivo de interação da radiação com a matéria. Normalmente, desprezando se interações entre partículas, pode-se propor inicialmente que a taxa de emissão de um agregado de moléculas ou átomos seja proporcional à taxa com a qual elas decaem. Usando o modelo usual de decaimento $dN/dt = -\gamma N$, espera-se portanto que a taxa de emissão espontânea seja igualmente proporcional ao número de moléculas no agregado. No entanto, a simplicidade deste modelo impede que importantes fenômenos como ecos de fons [30, 31] e transparência auto-induzida [32] possam ser descritos adequadamente pela teoria. R. H. Dicke [11] propôs em 1953 um modelo que levava em conta a interação das partículas com o campo e através dele. Com isso, foi possível descrever um processo de emissão espontânea onde a taxa de emissão varia com N^2 ao invés de N , indicando uma coerência entre as moléculas responsáveis pela emissão.

O modelo de Dicke também apresenta uma Transição de Fase Quântica em função do parâmetro de acoplamento entre matéria e radiação e, assim como o modelo de emparelhamento, possui uma Hamiltoniana Clássica análoga onde há uma contrapartida para essa transição.

4.1 O modelo

A Hamiltoniana do modelo de Dicke pode ser escrita $H = H_o + H_I$, onde H_o representa a parte separável da Hamiltoniana e H_I representa a interação átomo-campo. Neste tratamento, cada átomo é considerado um sistema de dois níveis, representando $|e\rangle$ o estado excitado e $|g\rangle$ o estado desexcitado. Pode-se então obter a Hamiltoniana de interação somando os termos de in-

teração de dipolo ($U = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$) de cada átomo com o campo:

$$H_I = - \sum_i^N \hat{\mathbf{p}}_i \cdot \hat{\mathbf{E}} \quad (4.1)$$

onde $\hat{\mathbf{p}}_i = q(\hat{x}_i \mathbf{e}_x + \hat{y}_i \mathbf{e}_y)$ é o operador momento de dipolo do i -ésimo átomo, aqui escrito em termos da carga do elétron q e dos operadores posição \hat{x} e \hat{y} . O operador campo elétrico $\hat{\mathbf{E}}$ será dado por¹ [19]

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}) = \sum_m^\infty \sqrt{\frac{\omega_m}{2\epsilon_0 V}} (a_m + a_m^\dagger) \mathbf{u}_m(\mathbf{x}) \quad (4.2)$$

sendo a_m, a_m^\dagger operadores de criação e aniquilação de fótons de frequência ω_m , com relação de comutação $[a_m, a_{m'}^\dagger] = \delta_{m,m'}$ ($\hbar = 1$); ϵ_0 a constante dielétrica do vácuo; V o volume no qual o campo elétrico está quantizado e $\mathbf{u}_m(\mathbf{x})$ uma *função modal* que carrega a parte espacial do campo e satisfaz:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{u}_m(\mathbf{x}) &= -\omega_m^2/c^2 \mathbf{u}_m(\mathbf{x}), \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_m(\mathbf{x}) &= 0 \end{aligned}$$

Como o operador momento de dipolo tem paridade ímpar, sua representação na base de autoestados da Hamiltoniana do átomo só contém termos fora da diagonal, i.e., $\langle e | \hat{\mathbf{p}} | e \rangle = \langle g | \hat{\mathbf{p}} | g \rangle = 0$. Usando a resolução da identidade $|e\rangle\langle e| + |g\rangle\langle g| = 1$ aplicada à esquerda e à direita do operador $\hat{\mathbf{p}}$ mostra-se que este pode ser escrito em termos das matrizes de Pauli σ_\pm e dos valores esperados $p_{xi} = \langle e | q\hat{x} | g \rangle$, $p_{yi} = \langle e | q\hat{y} | g \rangle$ dos momentos de dipolo entre os os estados $|e\rangle, |g\rangle$,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}_i &= (\sigma_+^{(i)} + \sigma_-^{(i)})(p_{xi} \mathbf{e}_x + p_{yi} \mathbf{e}_y), \\ \sigma_+ &= |e\rangle\langle g|; \sigma_- = |g\rangle\langle e|. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Em termos destas matrizes, a Hamiltoniana de interação passa a ser escrita como:

$$\begin{aligned} &\sum_i^N \sum_m^\infty \sqrt{\frac{\omega_m}{2\epsilon_0 V}} (\sigma_+^{(i)} + \sigma_-^{(i)})(a_m^\dagger + a_m) \times \\ &\times \mathbf{u}_m(\mathbf{x}_i) \cdot (\langle e | p_{xi} | g \rangle \mathbf{e}_x + \langle e | p_{yi} | g \rangle \mathbf{e}_y) \end{aligned} \quad (4.4)$$

¹Versão simplificada para uma polarização linear. Atenderá aos propósitos do modelo. Uma descrição detalhada é encontrada em [33]

e a parte separável H_0 possui a forma²

$$H_0 = \sum_m^{\infty} \omega_m a_m^\dagger a_m + \frac{1}{2} \sum_i^N \omega_0 \sigma_z^{(i)} \quad (4.6)$$

onde ω_0 é a frequência de transição entre níveis.

Pode-se definir operadores de spin a partir das matrizes de Pauli,

$$J_z = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_z^{(i)} \quad (4.7)$$

$$J_\pm = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_\pm^{(i)}. \quad (4.8)$$

Se os autoestados da Hamiltoniana atômica forem escritos como um produto direto dos estados de cada átomo, um autoestado típico terá a forma:

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\cdots\uparrow\uparrow\rangle. \quad (4.9)$$

com N_+ estados excitados e N_- estados desexcitados, $N_+ + N_- = N$. Há portanto dois números quânticos j, m que rotulam estes estados de tal forma que sejam satisfeitas as relações:

$$J^2 |j m\rangle = j(j+1) |j m\rangle, \quad J_z |j m\rangle = m |j m\rangle \quad (4.10)$$

sendo $J^2 = J_+ J_- + J_- J_+ - J_z^2$. O número quântico m pode ser interpretado através da igualdade

$$m = \frac{1}{2}(N_+ - N_-), \quad (4.11)$$

variando entre $-j$ e j , $j = N/2$. Um autoestado da Hamiltoniana não perturbada terá portanto a forma:

$$|n, m\rangle = |n\rangle \otimes |j m\rangle, \quad (4.12)$$

que corresponde a n fótons no campo e $m + j$ átomos excitados.

Se apenas um modo do campo for considerado e as dimensões ocupadas pelos átomos forem pequenas comparadas com o comprimento de onda

²Para obter a energia total contida no campo, procede-se com o cálculo [33]

$$H = \frac{1}{2} \int_V [\epsilon_0 E^2 + \mu_0^{-1} B^2] d^3r. \quad (4.5)$$

Isso leva a $H = \sum_m (a_m^\dagger a_m + 1/2)$. O fator 1/2 foi retirado por não afetar as equações de movimento.

do modo em questão, todos os átomos do sistema percebem efetivamente o mesmo campo, e portanto $\mathbf{u}_m(\mathbf{x}_i) \rightarrow \mathbf{u}_m(\mathbf{x})$, permitindo que a hamiltoniana de Dicke seja escrita como:

$$H = a^\dagger a + \epsilon J_z + \frac{G}{\sqrt{2j}}(a + a^\dagger)(J_+ + J_-), \quad (4.13)$$

onde

$$G = 2\sqrt{\frac{\rho}{\omega_m \epsilon_0}} \mathbf{u}_m(\mathbf{x}_i) \cdot (\langle e | p_{xi} | g \rangle \mathbf{e}_x + \langle e | p_{yi} | g \rangle \mathbf{e}_y),$$

$\rho = N/V$.

A equação (4.13) apresenta um termo $(aJ_- + a^\dagger J_+)$. A interpretação física para este termo é a criação de um fóton no campo com correspondente excitação atômica. Usando teoria de perturbação, pode-se mostrar [34] que no cálculo de taxas de transição, sua contribuição contém um fator $(\omega_0 + \omega_m)^{-1}$. Perto da ressonância, $\omega_0 \approx \omega_m$, este termo se torna desprezível comparado com o termo conservativo $(aJ_+ + a^\dagger J_-)$. Se este termo for descartado, faz-se a chamada aproximação de onda girante, e a Hamiltoniana do modelo passa a ser escrita como:

$$H_{RWA} = a^\dagger a + \epsilon J_z + \frac{G}{\sqrt{2j}}(aJ_+ + a^\dagger J_-). \quad (4.14)$$

Para este caso, há uma conservação no número de fótons e átomos excitados, $[a^\dagger a + J_z, H] = 0$. O fenômeno da super-radiância pode ser mostrado pelo cálculo da taxa de transição atômica:

$$I = I_o |\langle j \ m | J_- | j \ m + 1 \rangle|^2 = I_o (j + m)(j - m + 1). \quad (4.15)$$

No caso $N = 1$, o estado $|j \ m\rangle = |\frac{1}{2} \ \frac{1}{2}\rangle$ terá taxa de transição dada por $I = I_o$, ou seja, I_o representa a taxa de transição de uma partícula isolada. Um estado com $m \cong 0$ terá uma taxa de emissão máxima, sendo proporcional a N^2 . Este estado é chamado *Super-radiante*.

Fora da aproximação de onda girante, a Hamiltoniana será escrita como

$$H = a^\dagger a + \epsilon J_z + \frac{G}{\sqrt{2j}}(a^\dagger J_+ + aJ_-) + \frac{G'}{\sqrt{2j}}(aJ_+ + a^\dagger J_-). \quad (4.16)$$

Os valores de G e G' na Hamiltoniana (4.13) são os mesmos. A Hamiltoniana (4.16) os distinguiu para verificar como os efeitos da aproximação de onda girante afetam o comportamento do sistema.

A transição de fase no sentido termodinâmico para o modelo de Dicke foi mostrada rigorosamente por Hepp e Lieb [35], tendo sido mostrada de forma diferente por Wang e Hioe [36] que calcularam a função partição usando os estados coerentes de campo no limite $N \rightarrow \infty$. Os resultados obtidos por estes podem ser resumidos da seguinte forma:

1. Para $G^2 \leq \epsilon$, não há transição de fase em nenhuma temperatura.
2. Para $G^2 \geq \epsilon$, há uma temperatura crítica dada por

$$\frac{\epsilon}{\lambda^2} = \tanh\left(\frac{1}{2}\beta_c\epsilon\right), \beta_c = \frac{1}{kT_c}. \quad (4.17)$$

Quando o sistema está abaixo da temperatura crítica, ele se encontra em uma fase denominada super-radiante, onde densidade média de fótons é diferente de zero, i.e.,

$$\left\langle \left(\frac{a^\dagger a}{N} \right) \right\rangle \neq 0.$$

À medida que se aumenta a temperatura, essa quantia muda descontinuamente quando $T = T_c$, passando a ser nula.

Observando o estado fundamental do sistema (temperatura zero), é possível identificar o valor do parâmetro G para o qual passa a existir uma transição de fase (no sentido termodinâmico). Em particular, pode-se identificar essa Transição de Fase Quântica [38] através da entropia linear $\delta = 1 - \text{Tr}\{\rho_a^2\}$ do estado fundamental do sistema. Neste caso ρ_a , matriz densidade reduzida, é obtida traçando-se o campo na matriz densidade do estado fundamental.

A figura 4.1 mostra o gráfico da entropia linear do estado fundamental como função dos parâmetros de acoplamento. Nota-se que no caso integrável há um aumento abrupto da entropia linear quando $G_+/\epsilon = 1$, isto é, nesse ponto a derivada de δ em relação a G_+ apresenta uma descontinuidade, caracterizando a transição de fase quântica.

É possível entender melhor essa transição caracterizada por δ observando-se o gráfico do espectro quântico como função do parâmetro G , figura 4.2. Até o ponto $G = 1$, no estado fundamental não há fótons no campo ou excitações atômicas, ou seja, como no caso integrável há conservação do número $n \equiv (\text{Número de fótons} + \text{átomos excitados})$, o estado fundamental é um estado com $n = 0$ e energia $E = -j\epsilon$. No entanto, o estado de superposição

$$|\Lambda\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, -j\rangle - |0, -j+1\rangle) \quad (4.18)$$

é autoestado da Hamiltoniana de interação com autovalor $-G$, e pertence ao subespaço de estados com $n = 1$. Quando $G > \epsilon$, a energia deste estado³ passa a ser menor que a do autoestado $|0, -j\rangle$. Para valores de G ainda

³No caso ressonante $\epsilon = 1$, $|\Lambda\rangle$ é autoestado da Hamiltoniana total $H_0 + H_I$ com energia $E = -j + 1 - G$.

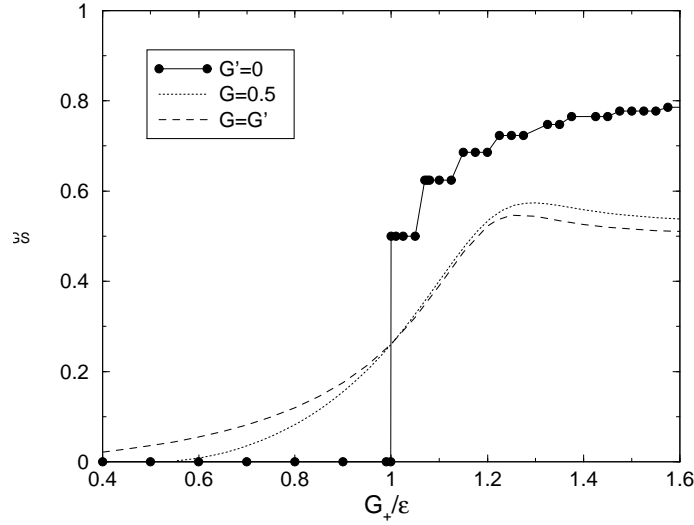


Figura 4.1: Entropia Linear do estado fundamental para $j = 9/2$, $\hbar = 1$, em função de G_+/ϵ , $G_+ = G + G'$ para os casos: (i) Integrável, $G' = 0$, linha contínua; (ii) Não-integrável com $G' = 0.5$, linha pontilhada; (iii) Não-integrável com $G' = G$, linha tracejada.

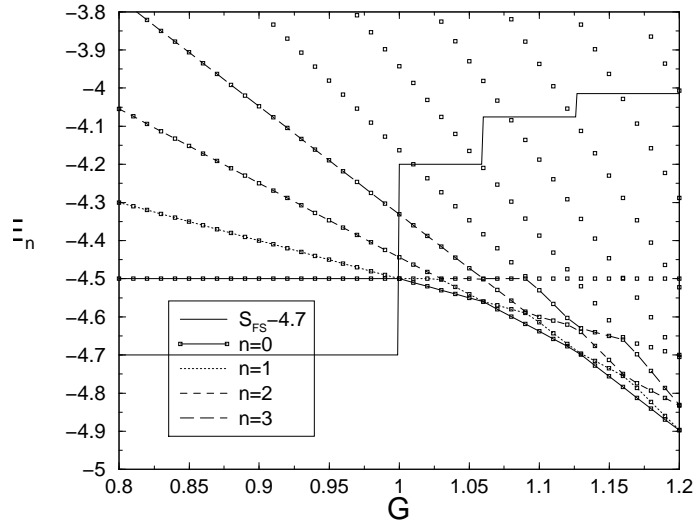


Figura 4.2: Espectro do modelo no caso integrável $G' = 0$, $j = 9/2$, $\hbar = 1$, em função de G/ϵ . Na legenda, n é o autovalor do operador $a^\dagger a + J_z + j$. A linha contínua mostra o gráfico da entropia linear do estado fundamental em função do parâmetro G . As mudanças abruptas desta quantidade ocorrem nos pontos onde há cruzamento de níveis no espectro.

maiores, ocorrem sucessivos cruzamentos de nível, o que é representado pela seqüência de degraus no gráfico de entropia linear.

A diferença entre os casos integrável e não-integrável é o crescimento suave na entropia do estado fundamental (figura 4.1). Isso porque a Hamiltoniana não-integrável possui elementos de matriz entre os subespaços de diferentes valores de n . O autoestado de energia mínima é então uma superposição de estados com diferentes valores de n .

4.2 Análogo Clássico

A transição de fase quântica observada para a Hamiltoniana (4.13) possui correspondência na Hamiltoniana Clássica análoga obtida por projeção nos estados coerentes $|\alpha\omega\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\omega\rangle$. Essa Hamiltoniana Clássica é dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{cls} &= \langle \alpha\omega | H | \alpha\omega \rangle = \\ &= |\alpha|^2 - j\epsilon \left(\frac{1-|\omega|^2}{1+|\omega|^2} \right) + \frac{\sqrt{2j}}{1+|\omega|^2} [G(\omega^*\alpha + \omega\alpha^*) + G'(\omega^*\alpha^* + \omega\alpha)]. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Para simplificar a equação (4.19), faz-se uma projeção estereográfica na variável ω (assim como foi feito para o modelo de emparelhamento)

$$\omega = \left(\frac{j + I_1}{j - I_1} \right)^{1/2} e^{i\theta_1} \quad (4.20)$$

e escreve-se a variável α na forma polar

$$\alpha = \sqrt{I_2} e^{i\theta_2}. \quad (4.21)$$

Como última simplificação, tomam-se a parte real e imaginária de cada variável em um par canônico⁴:

$$q_1 = \sqrt{2(j + I_1)} \text{sen}\theta_1, \quad p_1 = \sqrt{2(j + I_1)} \text{cos}\theta_1 \quad (4.22)$$

$$q_2 = \sqrt{2I_2} \text{sen}\theta_2, \quad p_2 = \sqrt{2I_2} \text{cos}\theta_2 \quad (4.23)$$

Em termos dessas variáveis, a Hamiltoniana se torna:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{cls}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) &= \epsilon \frac{1}{2} (p_1^2 + q_1^2) + \epsilon \frac{1}{2} (p_2^2 + q_2^2) + \\ &+ \sqrt{\frac{2j - (p_1^2 + q_1^2)/2}{2j}} (G_+ p_1 p_2 + G_- q_1 q_2) \end{aligned} \quad (4.24)$$

⁴o fator $\sqrt{2}$ foi colocado para que a transformação seja canônica

onde $G_{\pm} = G + G'$.

As equações de movimento podem ser escritas na forma matricial:

$$\dot{\eta} = \mathbf{J} \nabla \mathcal{H}_{cls}, \quad (4.25)$$

onde η é o vetor das variáveis e \mathbf{J} a matriz simplética, i.e.,

$$\eta = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

Para verificar o análogo da transição de fase quântica na Hamiltoniana Clássica, deve-se analisar a condição de equilíbrio, $\dot{\eta} = 0$. Isso leva às seguintes equações:

$$\epsilon p_2 = -G_+ \frac{p_1}{\sqrt{2j}} \sqrt{2j - (p_1^2 + q_1^2)/2} \quad (4.27)$$

$$\epsilon q_2 = -G_- \frac{q_1}{\sqrt{2j}} \sqrt{2j - (p_1^2 + q_1^2)/2} \quad (4.28)$$

$$p_1 [4j(\epsilon - G_+^2) + 2G_+^2 p_1^2 + q_1^2 (G_+^2 + G_-^2)] = 0 \quad (4.29)$$

$$q_1 [4j(\epsilon - G_-^2) + 2G_-^2 q_1^2 + q_1^2 (G_+^2 + G_-^2)] = 0, \quad (4.30)$$

No caso integrável, $G_+ = G_-$, as equações (4.29), (4.30) são equivalentes. Existe uma solução trivial para as condições de equilíbrio dada por $q_1 = p_1 = q_2 = p_2 = 0$. A outra solução é encontrada igualando o termo entre colchetes a zero. Essa segunda solução é válida se $G^2 > \epsilon$ e é dada por

$$\frac{q_1^2 + p_1^2}{2} = j \left(\frac{G^2 - \epsilon}{G^2} \right); \quad \frac{q_2^2 + p_2^2}{2} \equiv |\alpha|^2 = \frac{J(G^4 - \epsilon^2)}{2G^4}. \quad (4.31)$$

A equação (4.31) indica um ponto de energia mínima (análogo ao estado fundamental quântico) com número médio de fótons diferente de zero.

No caso não-integrável, as soluções são divididas nos seguintes casos, conforme os valores de G_{\pm} :

1. $q_1 = p_1 = q_2 = p_2 = 0$, solução trivial válida para qualquer valor de G_{\pm} .

2. se $p_1 \neq 0$ mas $q_1 = q_2 = 0$

$$p_1 = \pm \left(\frac{2j(G_+^2 - \epsilon)}{G_+^2} \right)^{1/2} \quad p_2 = \mp \left(\frac{j(G_+^4 - \epsilon^2)}{G_+^2} \right)^{1/2}, \quad (4.32)$$

válida se $G_+ > \epsilon$.

3. se $q_1 \neq 0$ mas $p_1 = p_2 = 0$

$$q_1 = \pm \left(\frac{2j(G_+^2 - \epsilon)}{G_+^2} \right)^{1/2} \quad q_2 = \mp \left(\frac{j(G_+^4 - \epsilon^2)}{G_+^2} \right)^{1/2}, \quad (4.33)$$

válida se $G_+^2 > \epsilon$ e $G_-^2 > \epsilon$.

O análogo clássico da transição de fase quântica é identificado pela mudança de estabilidade dos pontos de equilíbrio citados acima. A estabilidade num ponto de equilíbrio η_0 é dada pelos autovalores da matriz

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 H}{\partial \eta_i \partial \eta_j} \Big|_{\eta_0} \quad (4.34)$$

Quando os autovalores são positivos, o ponto de equilíbrio é instável. Quando os autovalores são negativos, o ponto de equilíbrio é estável. Autovalores com sinais diferentes caracterizam um ponto hiperbólico. A transição é vista da seguinte forma:

- No caso integrável, a origem é estável para $G < \epsilon$. Quando $G > \epsilon$ a origem deixa de ser estável e os pontos dados por

$$q_1 = \pm \left(\frac{2j(G_+^2 - \epsilon)}{G_+^2} \right)^{1/2} \quad q_2 = \mp \left(\frac{j(G_+^4 - \epsilon^2)}{G_+^2} \right)^{1/2},$$

são estáveis.

- No caso não-integrável, quando $G_+ < \epsilon$ o único ponto de equilíbrio é a origem e é estável. Quando $G_+ > \epsilon$, a origem se torna um ponto hiperbólico e o ponto de equilíbrio dado por $q_1 = q_2 = 0$ e

$$p_1 = \pm \left(\frac{2j(G_+^2 - \epsilon)}{G_+^2} \right)^{1/2} \quad p_2 = \mp \left(\frac{j(G_+^4 - \epsilon^2)}{G_+^2} \right)^{1/2}, \quad (4.35)$$

surge, sendo este último estável.

Portanto, no caso não-integrável ocorre uma bifurcação tipo *ponto de sela*, e no caso integrável uma bifurcação do tipo *Hopf* [3].

A seguir são mostrados os gráficos da função de Wigner atômica do estado fundamental antes e depois da transição. A parte negativa na função de Wigner do estado fundamental após a transição é uma assinatura quântica. Neste caso, percebe-se que após a transição o estado fundamental se torna um estado de superposição.

Pode-se obter a energia do estado fundamental através da Hamiltoniana Clássica, uma aproximação que se torna exata no limite $j \rightarrow \infty$. A comparação é feita na figura 4.8.

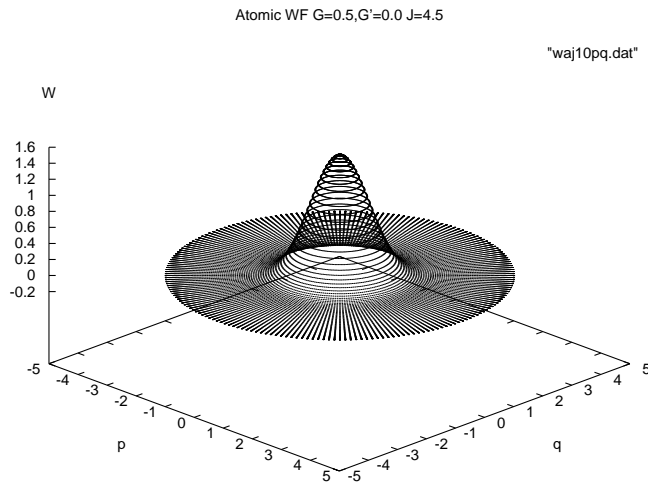


Figura 4.3: Função de Wigner atômica para o estado fundamental antes da transição, caso integrável $G/\epsilon = 0,5$; $G' = 0$, $J = 9/2$ e $E_{GS} = -4,5$.

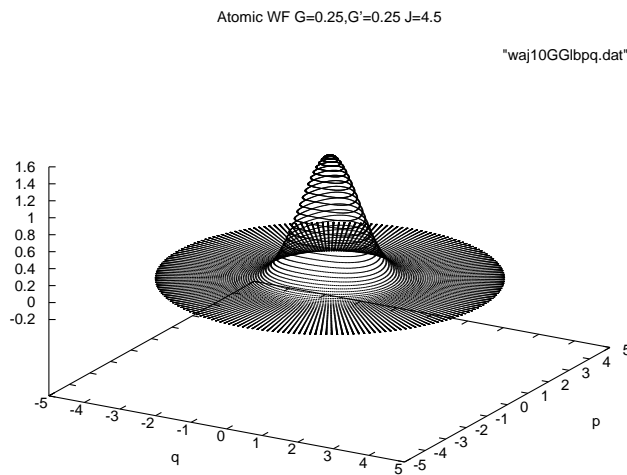


Figura 4.4: Função de Wigner atômica para o estado fundamental antes da transição, caso não integrável $G/\epsilon = 0,25$; $G'/\epsilon = 0,25$, $J = 9/2$ e $E_{GS} = -4,5$.

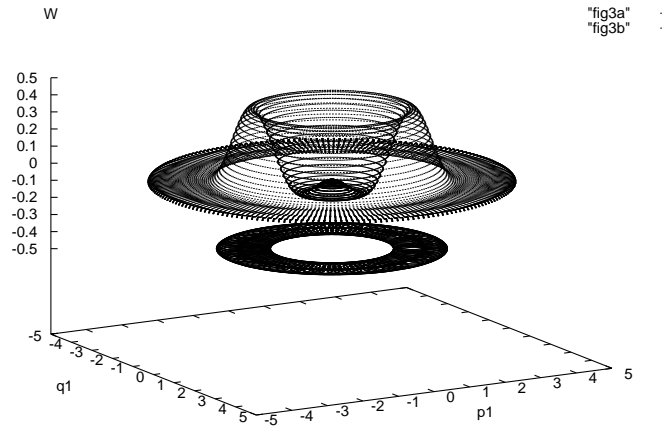


Figura 4.5: Função de Wigner atômica para o estado fundamental depois da transição, caso integrável $G/\epsilon = 1,5$; $G' = 0$, $J = 9/2$ e $E_{GS} = -6,277713$. Abaixo, no mesmo gráfico, projeção das trajetórias clássicas no plano (q_1, p_1) com mesmos parâmetros e $E = -5,5$.

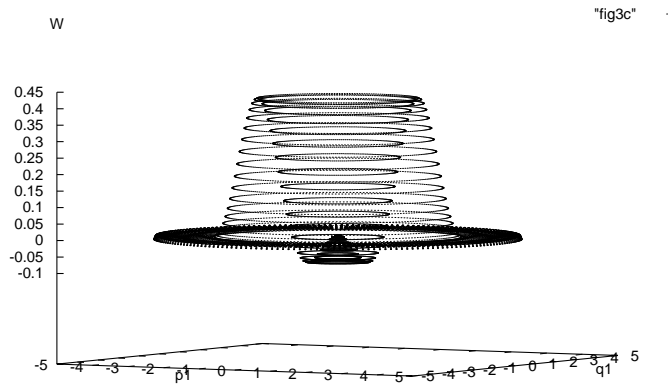


Figura 4.6: Detalhe para a parte negativa do gráfico anterior.

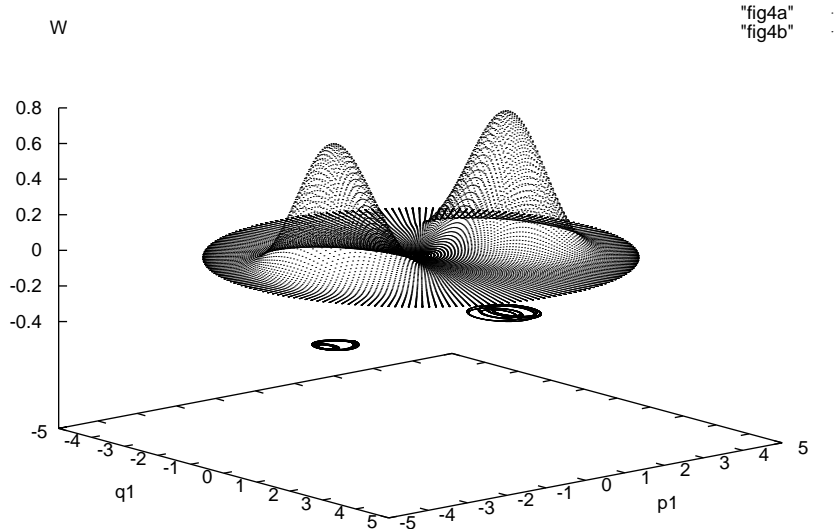


Figura 4.7: Função de Wigner atômica para o estado fundamental depois da transição, caso não-integrável $G/\epsilon = G'/\epsilon = 0,75$, $J = 9/2$ e $E = -6,102916$. Na região em torno da origem a função assume valores negativos. Abaixo, no mesmo gráfico, projeção das trajetórias clássicas no plano (q_1, p_1) para energia $E = -6,0$.

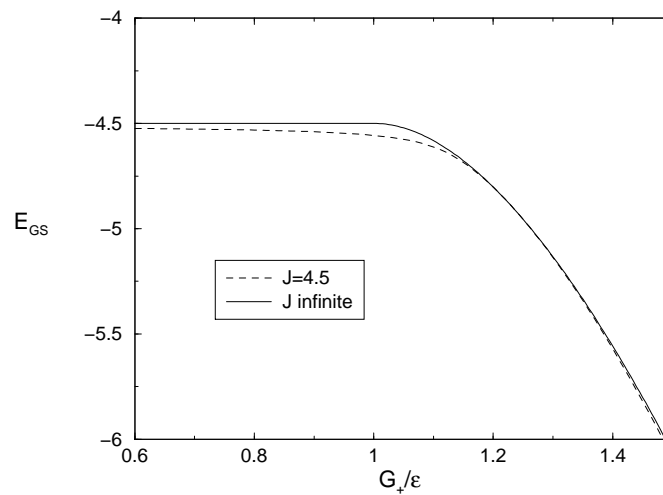


Figura 4.8: Linha tracejada: Energia do estado fundamental em função de $G_+ = G$, caso integrável e $J = 9/2$. Linha contínua: Energia do estado fundamental calculada pela Hamiltoniana Clássica análoga.

Capítulo 5

Conclusão

Este trabalho versa sobre as analogias clássico-quânticas relativas ao fenômeno de transição de fase para sistemas de uma classe de modelos com limite clássico bem definido. Do ponto de vista clássico, no modelo de emparelhamento mostramos que o ingrediente essencial para a separação dos dois possíveis comportamentos é a separatriz. Além disto, no limite em que o número de partículas é suficientemente grande, $N \rightarrow \infty$, os espectros clássico e quântico praticamente coincidem e para todos os efeitos observáveis são indistinguíveis. Este é um aspecto "experimental" do limite clássico: o poder de resolução do medidor.

No caso do modelo de Dicke que apresenta uma versão integrável e outra não-integrável, mostramos que a transição de fase é muito diferente nos regimes. Essa diferença se manifesta também no análogo clássico do modelo.

Apêndice A

Soluções das equações de movimento da Hamiltoniana Clássica do modelo de Emparelhamento

Como o sistema é unidimensional, integrável, usa-se a Energia das órbitas como constante de movimento e realizar a integral de quadratura, encontrando assim uma solução $(\eta(t), \theta(t))$. Combinando a equação (3.18) com as equações canônicas (3.19) e (3.20) resulta em:

$$\dot{\alpha} = \pm \sqrt{1 + 2\chi \cos^2 \alpha (E + \frac{\chi}{2} \cos^2 \alpha)}. \quad (\text{A.1})$$

Formalmente a solução de (A.1) pode ser obtida como a função inversa da integral:

$$t = \int_0^{\alpha(t)} [1 + 2\chi \cos^2 \alpha (E + \frac{\chi}{2} \cos^2 \alpha)]^{-\frac{1}{2}} d\alpha. \quad (\text{A.2})$$

Para resolver (A.2) usa-se um importante teorema:

Toda integral com a forma $\int R(x, y) dx$ onde $R(x, y)$ é uma função racional de x e y com y^2 sendo um polinômio cúbico ou quártico de x de raízes distintas pode ser resolvida analiticamente em termos de inversas das funções elípticas de Jacobi.

A prova deste teorema é o próprio método pelo qual se obtém as soluções e pode ser encontrada em [29]. A resolução deste tipo de integrais é de

fundamental importância no estudo de sistemas dinâmicos¹.

Para transformar a integral dada por (A.2) em uma integral elíptica, faz-se uma mudança para a variável: $u = \chi \cos^2 \alpha$, o que resulta na integral

$$I = -2 \int_0^{u'} [(1 + 2uE + u^2)(u\chi - u^2)]^{-1/2} du \quad (\text{A.3})$$

$$u' = \chi \cos^2 \alpha',$$

em seguida o radicando $(1 + 2uE + u^2)(u\chi - u^2)$ deve ser transformado num produto de duas funções S_1, S_2 com a forma:

$$S_1 = \frac{1}{p^2 - q^2} [(1 - q^2)(u - p)^2 + (p^2 - 1)(u - q)^2] \quad (\text{A.4})$$

$$S_2 = \frac{1}{p^2 - q^2} [q^2(u - p)^2 - p^2(u - q)^2] \quad (\text{A.5})$$

p e q dados por:

$$p = \frac{-1 - \sqrt{1 + 2E\chi + \chi^2}}{2E + \chi}; \quad (\text{A.6})$$

$$q = \frac{-1 + \sqrt{1 + 2E\chi + \chi^2}}{2E + \chi}. \quad (\text{A.7})$$

Com isso, a integral em (A.3) pode ser escrita como:

$$-\frac{2}{|p^2 - q^2|} \int_0^{u'} \left\{ [(1 - q^2)(u - p)^2 - (1 - p)^2(u - q)^2] \right. \\ \left. [q^2(u - p)^2 - p^2(u - q)^2] \right\}^{-1/2} du. \quad (\text{A.8})$$

Em [29] encontram-se tabelas para resolução desta integral. As funções elípticas inversas $\text{sn}^{-1}(x, k)$, $\text{cn}^{-1}(x, k)$ e $\text{dn}^{-1}(x, k)$ são definidas para x e k no intervalo $[0, 1]$. Para resolver (A.8) devem ser feitas transformações de variáveis de modo a atender esses critérios. Como p e q dependem da energia e do parâmetro χ , as soluções são divididas nos casos mostrados abaixo, sendo:

$$a = |q/p|, \quad b = \sqrt{(1 - q^2)/(1 - p^2)};$$

$$\gamma = \frac{-2(p - q)|p|\sqrt{p^2 - 1}}{|p^2 - q^2|} \quad (\text{A.9})$$

¹Integrar um sistema dinâmico é encontrar constantes de movimento para diminuir seus graus de liberdade e obter as soluções através de quadratura.

1. Para $E < -1$ e $E < -\chi/2$:

$$\begin{aligned}
y &= (q-u)/(u-p) \\
\gamma t &= \frac{1}{a} \operatorname{dn}^{-1} \left[\frac{y(t)}{a}, \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a} \right] \\
y(t) &= a \operatorname{dn} \left[a\gamma t, \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a} \right]
\end{aligned} \tag{A.10}$$

2. Para $E < -1$ e $E > -\chi/2$:

$$\begin{aligned}
v &= (u-q)(u-p) \\
\gamma t &= \frac{1}{a} \operatorname{dn}^{-1} \left[\frac{v(t)}{a}, \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a} \right] \\
v(t) &= a \operatorname{dn} \left[a\gamma t, \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a} \right]
\end{aligned} \tag{A.11}$$

3. Para $E > -1$, $y = (q-u)/(u-p)$

$$\begin{aligned}
\gamma t &= \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2}} \operatorname{cn}^{-1} \left[\frac{v(t)}{a}, \frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} \right] \\
v(t) &= a \operatorname{cn} \left[\sqrt{a^2 + b^2} \gamma t, \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a} \right]
\end{aligned} \tag{A.12}$$

4. Quando $E = -\chi/2$, $E < -1$ fazemos a transformação $u = \operatorname{sen} 2\alpha$ em (A.3) e a integral se torna:

$$\int_0^{u(t)} \left[(1-u^2) \left(1 - \frac{\chi^2}{4} u^2 \right) \right]^{-1/2} du$$

resultando em:

$$u(t) = \operatorname{sn} \left[2t, \frac{\chi}{2} \right] \tag{A.13}$$

5. Quando $E = -\chi/2$, $E > -1$ a transformação $u = (\chi \operatorname{sen} 2\alpha)/2$ em (A.3) resulta em:

$$u(t) = \operatorname{sn} \left[\chi t, \frac{2}{\chi} \right] \tag{A.14}$$

A integral elíptica completa

$$K(k) = \int_0^1 [(1-t^2)(1-k^2t^2)]^{-1/2} dt \quad (\text{A.15})$$

determina o período das órbitas, já que $\text{sn}(x, k) = \text{sn}(x + 4K, k)$, $\text{cn}(x, k) = \text{cn}(x + 4K, k)$, $\text{dn}(x, k) = \text{dn}(x + 2K, k)$. A figura 3.12 mostra o período das órbitas em função da energia. Há uma divergência em $E = -1$, energia que corresponde a órbita homoclínica.

Referências Bibliográficas

- [1] E. Wigner, *On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium*. Phys. Rev, **40** 749, 1932.
- [2] A. Das *Field Theory: A Path Integral Approach*. Lectures Notes in Physics, vol **52** World Scientific.
- [3] M. Gutzwiller *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer Verlag, New York, 1990.
- [4] A. Voros and J. Zinn-Justin *Chaos in Quantum Physics*. North Holland, 1991.
- [5] W. Zhang, D. H. Feng, R. Gilmore, *Coherent States: Theory and some Applications*, Reviews of Modern Physics, **62**, 4, 1990.
- [6] W. D. Heiss and M. Müller, *Universal Relationship between a Quantum Phase Transition and Instability Points of Classical Systems*. Phys. Rev. E **66**, 016217, 2002.
- [7] Lipkin, H. J., N. Meshkov, and A. J. Glick, Nucl. Phys. **62**, 188, 1965.
- [8] Krieger, S. and Goeke, K. Nucl. Phys. **A234**, 269, 1974.
- [9] M. Trindade dos Santos et. al *Quantum and Classical Aspects of Deformation in the Symmetric Pairing Model.*, Physica Scripta **55**, 415, 1997.
- [10] Maurício Reis, M. de O. Terra Cunha, Adélcio C. Oliveira, M. C. Nemes, submetido a Phys. Rev. E
- [11] R. H. Dicke. *Coherence in Spontaneous Radiation Processes*. Phys. Rev., **93** 99-110, 1954.
- [12] M. A. M. de Aguiar, K. Furuya, and M. C. Nemes. *The Classical Analogue of the Super-Radiant Phase Transition in the Dicke model*. Quantum Opt.**3**, 305-314, 1991.

- [13] Clive Emary and Tobias Brandes. *Chaos and the Quantum Phase Transition in the Dicke Model*. Phys. Rev. E **67**, 066203, 2003.
- [14] S. M. Barnett, S. D. Phoenix. Entropy as a Measure of Quantum Optical Correlation. Phys. Rev. A **40**, 2404, 1989.
- [15] G. Vidal et. al *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*. Phys. Rev. Lett. **90**, 227902, 2003.
- [16] K. Furuya, M. C. Nemes, and G. Q. Pellegrino. Quantum Dynamical Manifestation of Chaotic Behavior in the Process of Entanglement. Phys. Rev. Letters **80**, 5524, 1988.
- [17] R. M. Angelo, K. Furuya, M. C. Nemes, and G. Q. Pellegrino. Recoherence in the Entanglement Dynamics and Classical Orbits in the N-atom Jaynes-Cummings Model. Phys. Rev. A **64**, 043801, 2001.
- [18] Andrew P. Hines et. al Entanglement and Bifurcations in Jahn-Teller Models. Phys. Rev. A **70**, 022303, 2004.
- [19] Leslie E. Ballentine *Quantum Mechanics - A Modern Development*, World Scientific.
- [20] Roy J Glauber. *Coherent and Incoherent State of the Radiation Field*. Phys. Rev., **131**, 2766-2788, 1963.
- [21] Claude Cohen-Tanoudji, Bernard Diu, Franck Laloë *Quantum Mechanics*. John Wiley and Sons, New York.
- [22] Arecchi, F. T., Courtens, Gilmore, R., Thomas, H. *Atomic Coherent States in Quantum Optics*. Phys. Rev., **6**, 2211, 1972.
- [23] Gilmore, R. *Baker-Campbell-Hausdorff Formulas*. Journal of Mathematical Physics, **15**, 2090, 1974.
- [24] Leonhardt, Ulf Measuring the Quantum State of Light. Cambridge University Press, 1997.
- [25] G. S. Agarwal. *Relation Between Atomic Coherent-State Representation, State Multipoles and Generalized Phase-Space Distributions*. Phys. Rev. A, **24**, 2889, 1981.
- [26] Jonathan P. Dowling, G. S. Agarwal, and Wolfgang P. Schleich. *Wigner Distribution of a General Angular-Momentum State: Applications to a Collection of two-level Atoms*. Phys. Rev. A, **49** 4101, 1994.

- [27] K. Husimi. Proc. Phys. Math. Soc. Japan, **22** 264, 1940.
- [28] Asher Peres. *Quantum Theory: Concepts and Methods*. Kluwer Academic Publishers, 1995.
- [29] Derek F. Lawden *Elliptic Functions and Applications* Springer-Verlag, New York, 1989
- [30] H. M. Nussenzveig *Introduction to Quantum Optics*. Gordon and Breach Science Publishers, 1973.
- [31] N. A. Kurnit, I. D. Abella, and S. R. Hartmann, Phys. Rev. Lett. **13**, 567, 1964.
- [32] S. L. McCall and E. L. Hahn, Phys. Rev. Lett. **18**, 9, 1967.
- [33] Mandel, L., and Wolf. E. *Optical Coherence and Quantum Optics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [34] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1994.
- [35] Hepp K. and Lieb E. H., Ann. Phys. **76**, 360, 1973.
- [36] Y. K. Wang and F. T. Hioe *Phase Transition in the Dicke Model of Superradiance*. Phys. Rev. A **7**, 3, 1973.
- [37] F. Camargo, M. Trindade dos Santos, M. C. Nemes *Correlation effects in the Chaotic Masermodel* Physica A, **246**, 1997.
- [38] M. C. Nemes, K. Furuya, Adélcio C. Oliveira, Maurício Reis, and L. Sanz *Entanglement and the Characterization of Quantum Phase Transition in the Integrable and Non-Integrable Versions of the Dicke model*. Submetido Phys. Rev. Lett.
- [39] José Geraldo de Faria, Tese de Mestrado.
- [40] Marcelo de Oliveira Terra Cunha, Tese de Doutorado em andamento, UFMG.
- [41] Liliane Sanz de La Torre, Tese de Doutorado, UNICAMP, agosto de 2003