Leonardo da Silva Souza

Decoerência de sistemas quânticos induzida por cadeias de spin

Belo Horizonte

2015

Leonardo da Silva Souza

Decoerência de sistemas quânticos induzida por cadeias de spin

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Raphael Campos Drumond

Belo Horizonte 2015 Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

S729d Souza, Leonardo da Silva.
 Decoerência de sistemas quânticos induzida por cadeias de spin / Leonardo da Silva Souza. - 2015.
 65f., enc. : il.

Orientador: Raphael Campos Drumond. Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física. Bibliografia: f. 59-60.

1. Sistemas quânticos. 2. Decoerência. 3. Modelo de Ising. 4. Transição de fase.

I. Título. II. Drumond, Raphael Campos. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU - 530.145 (043)

Ficha catalográfica elaborada por Romário Martins – CRB6 3595 Biblioteca Professor Manoel Lopes de Siqueira – Departamento de Física - UFMG



Universidade Federal de Minas Gerais Instituto de Ciências Exatas Programa de Pós-Graduação em Física Caixa Postal 702 30.123-970 Belo Horizonte - MG - Brasil

Telefone (xx) (31) 3499 5637 (xx) (31) 3499 5633 Fax (xx) (31) 3499 5688 (xx) (31) 3499 5600 e-mail pgfisica@fisica.ufmg.br

ATA DA SESSÃO DE ARGUIÇÃO DA 544ª DISSERTAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA, DEFENDIDA POR LEONARDO DA SILVA SOUZA, orientado pelo professor Raphael Campos Drumond para obtenção do grau de MESTRE EM FÍSICA. Às 09:00 horas de treze de março de 2015, na sala 4128 do Departamento de Física da UFMG, reuniu-se a Comissão Examinadora, composta pelos professores Raphael Campos Drumond (Orientador - Departamento de Matemática/UFMG), Carlos Henrique Monken (Departamento de Física/UFMG) e Maria Carolina de Oliveira Aguiar (Departamento de Física/UFMG) para dar cumprimento ao Artigo 37 do Regimento Geral da UFMG, submetendo o LEONARDO DA SILVA SOUZA à arguição de seu trabalho de dissertação de Mestrado, que recebeu o título de "Decoerência de sistemas de spin em contato com cadeias magnéticas". Às 14:00 horas do mesmo dia o candidato fez uma exposição oral de seu trabalho durante aproximadamente 50 minutos. Após esta, os membros da comissão prosseguiram com a sua arguição e apresentaram seus pareceres individuais sobre o trabalho e o parecer final da comissão, concluindo pela aprovação do trabalho.

Belo Horizonte, 13 de março de 2015.

Qu D

Prof. Raphael Campos Drumond Orientador do estudante Departamento de Matemática/UFMG

Unoulen

Prof. Carlos Henrique Monken Departamento de Física/UFMG

Maria Carolin de S. Desi Prof. Maria Carolina de Oliveira Aguiar Departamento de Física/UFMG

Candidato Leonordo da Silva Sough

Agradecimentos

Aos meus familiares pelo incentivo e apoio. Aos meus pais Francisco e Almerinda, ao meu irmão Jadson e minha cunhada Cristiene, as minhas sobrinhas Vitória e Anna Laura.

Ao professor Raphael Campos, pela orientação realizada com extrema competência, pelo apoio e amizade, além das inúmeras sugestões e auxílios que foram fundamentais para realização deste trabalho.

A professora Maria Carolina Nemes (*in memorian*), pela orientação inicial, paciência e grande disposição ao ensinar.

Aos companheiros de pós-graduação, em particular, Adailton, Alberto, Andreij, Daniel, Flavio, Murilo, Paulo, Rafael e Raul.

Aos meus amigos Ricardo, Rosemberg, Oziel e Tarcísio pela agradável convivência. Aos funcionários e professores da física e ao CNPq, pelo apoio financeiro. Muito obrigado a todos!

"A menos que modifiquemos a nossa maneira de pensar, não seremos capazes de resolver os problemas causados pela forma como nos acostumamos a ver o mundo" (Albert Einstein)

Resumo

Neste trabalho estudamos a decoerência em um sistema quântico central S acoplado uniformemente a um reservatório R, escolhido como uma cadeia de Ising quântica com campo transverso. Inicialmente, revisamos a abordagem usual para diagonalização do Hamiltoniano de Ising quântico. Investigamos algumas das propriedade do gap (diferença de energia entre o estado de menor energia do subespaço de paridade positiva com o do subespaço de paridade negativa). Em seguida, consideramos o sistema S como um sistema de dois níveis e estudamos o comportamento do eco de Loschmidt (EL), que para esta configuração do modelo pode ser utilizado para caracterizar a decoerência. Vimos que o EL possui decaimento abrupto quando o reservatório R se encontra com o valor do campo transverso próximo à transição de fase quântica. Por fim, assumimos o sistema Scomo um sistema de spin s arbitrário e estudamos como a escolha de s afeta a transição quântica-clássica do modelo.

Palavras-chave: Sistema Quântico Aberto, Decoerência, Modelo de Ising, Transição de Fase.

Abstract

In this work we studied the decoherence in a central quantum system S uniformly coupled to a reservoir R, chosen as a quantum Ising chain with transverse field. Initially, we review the usual approach to diagonalize the quantum Ising Hamiltonian. We investigate some properties of the gap (energy gap between the lower energy state of the positive and negative parity subspace). We consider the system S as a two-level system and study the Loschmidt echo (EL) behavior, which for this model configuration may be use to characterize the decoherence. We show that LE decay sharply when the reservoir R is near the critical value of the transverse field. Finally, we assume the system S as a arbitrary spin-s system and study how the choice of s affect quantum-classical transition of the model.

Keywords: Open Quantum System, Decoherence, Ising Model, Phase Transition.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	11
2	CONCEITOS BÁSICOS	13
2.1	Estado quântico	13
2.1.1	Vetor de estado	13
2.1.2	Operador densidade	14
2.1.2.1	Estados puros e mistura estatística	16
2.2	Sistemas compostos	16
2.2.1	Produto tensorial	16
2.2.2	Traço parcial	17
2.3	Estados coerentes de spin	18
2.3.1	Momento angular	18
2.3.2	Definição do estado coerente de spin	19
3	DIAGONALIZAÇÃO DO HAMILTONIANO DE ISING QUÂNTICO	
	COM CAMPO TRANSVERSO	21
3.1	Hamiltoniano do sistema	21
3.2	Transformação de Jordan-Wigner	23
3.3	Diagonalização do Hamiltoniano	25
3.3.1	Número par de sítios, subespaço de paridade positiva	25
3.3.2	Número par de sítios, subespaço de paridade negativa	28
3.3.3	Número ímpar de sítios, subespaço de paridade positiva	29
3.3.4	Número ímpar de sítios, subespaço de paridade negativa	29
3.4	Estado Fundamental e Gap	30
4	DECOERÊNCIA DE UM SISTEMA ACOPLADO A UMA CADEIA	
	DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO	37
4.1	Decoerência do sistema S de dois níveis, induzida pela trasição de	
	fase do reservatório	38
4.1.1	Modelo	38
4.1.2	Eco de Loschmidt para o sistema central	39
4.2	Decoerência do sistema central para s arbitrário	44
4.2.1	Spin $\frac{1}{2}$	47
4.2.2	Spin s	50
5	CONCLUSÃO	57

REFERÊNCIAS					 59
APÊNDICES					61
APÊNDICE A-	GAP NO	MODELC) DE ISING	i	 63

1 Introdução

A caracterização da dinâmica de um sistema quântico que pode estar correlacionado com outros sistemas tem sido objeto de investigação em diversas áreas, variando de processamento quântico de informação à cosmologia [1,2]. A inevitável interação de um sistema com o ambiente que o cerca, consequentemente a correlação entre eles, leva ao processo denominado decoerência, onde o sistema perde a capacidade de exibir superposições entre estados, portanto processo em que estados puros do sistema quântico são transformados em misturas estatísticas. Esta "fragilidade" da coerência de um estado quântico tem sido o principal obstáculo para construção do computador quântico [3], e desempenha um papel de fundamental importância na descrição da emergência de classicalidade em sistemas quânticos [4]. A necessidade de combater a decoerência, para garantir o funcionamento adequado das tecnologias quânticas, renovou a motivação para estudos aprofundados da dinâmica de interação entre sistema e ambiente. Trabalhos interessados em compreender o fenômeno de decoerência introduziram modelos representando o ambiente com um sistema de muitos corpos, por exemplo, conjunto de osciladores harmônicos [5] e partículas de spins $\frac{1}{2}$ [6]. Os primeiros trabalhos analisando decoerência devida a um reservatório de spins o assumem como um conjunto de spins independentes [7]. Posteriormente, é considerada uma estrutura mais complexa, com a cadeia de spins sendo descrita por modelos de transição de fase quântica [8]. Na maioria destes trabalhos assume-se um sistema altamente simétrico, onde um sistema quântico central é acoplado uniformemente com os spins do reservatório. Entretanto, buscando um modelo que possa ser realizado experimentalmente foi estudado um sistema quântico interagindo com apenas alguns spins da cadeia [9].

Neste trabalho, analisamos um modelo constituído de um sistema quântico central acoplado uniformemente a uma cadeia de N spins $\frac{1}{2}$, onde os primeiros vizinhos interagem entre si, sendo descrita por um modelo apresentando transição de fase quântica. Recentemente este sistema tem despertado o interesse de muitos pesquisadores e sido bastante explorado [8, 10, 11]. Resultados obtidos por Quan el al. [8], demonstram que a criticalidade quântica da cadeia descrita pelo modelo de Ising com campo transverso afeta fortemente o decaimento do eco de Loschimdt (EL), conceito introduzido em estudos de transição quântica-clássica em caos [12] e posteriormente na caracterização da decoerência. Nosso objetivo com este modelo é, além de revisar alguns dos estudos realizados, considerar um estrutura mais complexa para o sistema central. Assumimos um sistema quântico de spin s que nos permita estudar o limite clássico, em que o sistema central deixa de interagir com a cadeia e passa a se comportar como uma fonte externa de campo clássico.

A dissertação está organizada da seguinte forma. No capítulo 2, revisamos alguns conceitos básicos da mecânica quântica que utilizamos no decorrer do trabalho. No capítulo 3, apresentamos a diagonalização do Hamiltoniano de Ising com campo transverso, discutindo seu estado fundamental, computando e analisando uma expressão para o gap de energia entre o estado fundamental do subespaço de paridade positiva e negativa. Por fim, no capítulo 4, discutimos a decoerência de um sistema quântico central em contato uniforme com os spins da cadeia magnética. Descrevemos o bem conhecido modelo onde o sistema central é um sistema de dois níveis, apresentando um estudo teórico do comportamento do eco de Loschimidt caracterizando a decoerência. Estudamos o modelo com sistema central de spin s fazendo uma análise introdutória sobre a existência ou não existência de um limite clássico quando $s \to \infty$.

2 Conceitos básicos

Neste capítulo introduzimos conceitos fundamentais utilizados ao longo do trabalho. Iniciamos com uma discussão sobre estado quântico. Em seguida, apresentamos algumas das ferramentas básicas na descrição de sistemas compostos. Por fim, realizamos uma breve revisão da definição de estados coerentes de spin.

2.1 Estado quântico

2.1.1 Vetor de estado

A descrição do estado quântico de um sistema físico, em certas condições, se dá por meio de um vetor $|\psi\rangle$ pertencente a um espaço vetorial complexo, dotado de norma e produto interno bem definido, denominado espaço de Hilbert \mathcal{H} [13,14]. Dada uma base ortonormal qualquer $\{|u_i\rangle\}$ no espaço de Hilbert \mathcal{H} , um vetor de estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ pode ser escrito como uma combinação linear dos elementos da base:

$$|\psi\rangle = \sum_{i} \alpha_{i} |u_{i}\rangle , \qquad (2.1)$$

com $\alpha_i \in \mathbb{C}$. Aqui iremos considerar o vetor de estado normalizado, sendo assim, $\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$. Suponha um sistema descrito pelo vetor de estado (2.1), onde $\{|u_i\rangle\}$ são autoestados de um observável A (operador que caracteriza uma quantidade física qualquer) com autovalores $\{a_i\}$ (resultados de uma medida de A). Após realizar uma medida do observável A e o resultado for, por exemplo, a_k , o estado do sistema após a medida é reduzido para $|u_k\rangle$. No formalismo da mecânica quântica, dado (2.1), sendo o vetor estado que caracteriza sistema físico, a probabilidade do mesmo ser reduzido para $|u_k\rangle$ após uma medida é dada por $|\alpha_k|^2 = |\langle u_k | \psi \rangle|^2$.

A dinâmica deste sistema, supondo que o mesmo seja fechado, é descrita por um vetor de estado evoluindo no tempo de maneira determinista, obedecendo a equação de Schrödinger:

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

Sendo assim, conhecendo o estado do sistema no instante inicial e a solução da equação (2.2), nos é permitido determinar o vetor de estado em qualquer instante posterior. Aqui, H é um operador hermitiano, conhecido como hamiltoniano do sistema. A solução geral da equação (2.2) pode ser escrita na forma:

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \qquad (2.3)$$

onde $\mathcal{U}(t, t_0)$ é denominado operador evolução temporal. Propriedades de $\mathcal{U}(t, t_0)$ a serem destacadas são:

- 1. $\mathcal{U}^{-1}(t, t_0) = \mathcal{U}^{\dagger}(t, t_0)$, que garante a normalização de $|\psi(t)\rangle$ para todo t.
- 2. $\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1)\mathcal{U}(t_1, t_0)$, propriedade de composição.

A partir das equações (2.2) e (2.3), obtém-se a equação de Schrödinger para o operador evolução temporal,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{U}(t, t_0) = H \mathcal{U}(t, t_0).$$
(2.4)

Para casos em que o hamiltoniano é independente do tempo, a solução da equação (2.4) assume a forma:

$$\mathcal{U}(t,t_0) = \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right].$$
(2.5)

Soluções em que o Hamiltoniano depende do tempo não foram utilizadas no decorrer do trabalho. A forma do operador evolução temporal para estes casos pode ser encontradas na referência [13].

Conhecido o vetor de estado $|\psi\rangle$, é possível obter o valor médio de um observável associado a um operado hermitiano A, em qualquer instante t, utilizando a relação:

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle. \tag{2.6}$$

A seguir apresentaremos um formalismo mais geral para descrição de um estado quântico.

2.1.2 Operador densidade

Na subseção anterior admitimos o "conhecimento completo" sobre o estado do sistema, consequentemente, sua descrição era realizada através de um vetor de estado no espaço de Hilbert. Porém, em muitos casos não se tem acesso a este conhecimento, pois o estado do sistema pode estar sujeito a incertezas de caráter clássico, originadas, por exemplo, da interação do sistema com um segundo sistema quântico. Também pode haver incerteza na preparação do estado do sistema, tornando necessária sua inclusão na descrição do problema. Mais precisamente, o sistema será caracterizado por um ensemble $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$, onde p_i representa a probabilidade de se encontrar o sistema no estado $|\psi_i\rangle$. Uma formalismo que permite trabalhar o problema desta forma é o do operador densidade, no qual o sistema é descrito por um operador linear da forma:

0

$$\rho \equiv \sum_{i} p_{i} |\psi_{i}\rangle \langle\psi_{i}|,$$

$$\leq p_{i} \leq 1, \quad \sum_{i} p_{i} = 1,$$
(2.7)

onde $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ representa o projetor na direção do vetor $|\psi_i\rangle$.

O operador ρ satisfaz as seguintes propriedades:

- 1. Tr $\rho = 1$, é normalizado.
- 2. $\rho = \rho^{\dagger}$, é hermitiano.
- 3. $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \ge 0, \forall | \psi \rangle$, é semidefinido positivo.

A equação que determina a dinâmica de um sistema cujo estado inicial é $\rho(0) \equiv \sum_i p_i |\psi_i(0)\rangle \langle \psi_i(0)|$ pode ser obtida de maneira simples. Considerando o ensemble deixado sem perturbação, ou seja p_i constante, a evolução temporal do operador densidade ρ será regida pela evolução temporal dos vetores de estado $|\psi_i(t)\rangle$. Quer dizer:

$$\rho(t) \equiv \sum_{i} p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|, \qquad (2.8)$$

onde cada $|\psi_i(t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger. Diferenciando a equação (2.8) em relação ao tempo e utilizando a equação de Schrödinger (2.2), obtemos

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar}[H(t),\rho(t)],$$
(2.9)

conhecida como equação de Liouville-von Neumann.

O valor esperado de um observável A medido, é dado por:

$$\langle A \rangle(t) = \sum_{i} p_i \langle \psi_i(t) | A | \psi_i(t) \rangle, \qquad (2.10)$$

sabendo que $|\psi_i(t)\rangle$ é um vetor pertencente ao espaço de Hilbert \mathcal{H} , então existe uma base ortonormal $\{|u_j\rangle\}$ em que ele ou qualquer outro vetor de \mathcal{H} possa ser representado. Utilizando a relação de completeza, $\sum_j |u_j\rangle\langle u_j| = I$, da base na equação (2.10) obtemos:

$$\langle A \rangle(t) = \sum_{j} \sum_{i} p_{i} \langle \psi_{i}(t) | A | u_{j} \rangle \langle u_{j} | \psi_{i}(t) \rangle = \sum_{j} \sum_{i} p_{i} \langle u_{j} | \psi_{i}(t) \rangle \langle \psi_{i}(t) | A | u_{j} \rangle = \sum_{j} \langle u_{j} | \left(\sum_{i} p_{i} | \psi_{i}(t) \rangle \langle \psi_{i}(t) | \right) A | u_{j} \rangle = \operatorname{Tr} [A\rho(t)],$$
 (2.11)

como o traço é independente da representação, (2.11) pode ser computada utilizando qualquer base.

2.1.2.1 Estados puros e mistura estatística

Estados caracterizados por um vetor no espaço de Hilbert são ditos puros. No formalismo do operador densidade, podem ser descritos como uma coleção de sistemas idênticos (ensemble), todos preparados no mesmo estado $|\psi\rangle$, logo:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|. \tag{2.12}$$

Caso contrário, o descreveremos por uma mistura estatística, com os sistemas do ensemble preparados tal que cada fração p_i está no estado $|\psi_i\rangle$.

Podemos definir se o operador densidade é caracterizado por um estado puro ou mistura estatística, calculando o traço do quadrado do operador:

$$\operatorname{Tr}\left[\rho^{2}\right] = \sum_{k} \sum_{i} \sum_{j} p_{i} p_{j} \langle u_{k} | \psi_{i} \rangle \langle \psi_{i} | \psi_{j} \rangle \langle \psi_{j} | u_{k} \rangle$$
$$= \sum_{i} p_{i}^{2} \leq \left[\sum_{i} p_{i}\right]^{2} = 1.$$
(2.13)

onde a igualdade é válida se $p_k = 1$ para algum índice $k \in p_i = 0$ para os índices $i \neq k$, e neste caso o estado é puro. Para as outras situações, $\operatorname{Tr} [\rho^2] < 1$ é uma mistura estatística. Se $\operatorname{Tr} [\rho^2] = \frac{1}{d}$, com d sendo a dimensão do espaço, o estado é maximamente misturado, ou seja, o ensemble é completamente "aleatório". Posteriormente iremos denominar por "pureza" a função $\mu = \operatorname{Tr} [\rho^2]$, pois será utilizada como uma medida do quão próximo um estado ρ é de um estado puro.

2.2 Sistemas compostos

2.2.1 Produto tensorial

Suponha um sistema constituído de N subsistemas i, onde cada subsistema está associado a um espaço de Hilbert \mathcal{H}_i . O espaço do sistema composto será dado pelo produto tensorial dos espaços de Hilbert de cada subsistema, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N$ [15]. Tal espaço conterá as possíveis combinações lineares de vetores do tipo: $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle$, com $|\psi_i\rangle$ pertencendo a \mathcal{H}_i , denominados vetores produto. Sabendo que os espaços $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \ldots, \mathcal{H}_N$ possuem bases $\{|u_i^{(1)}\rangle\}, \{|u_i^{(2)}\rangle\}, \ldots, \{|u_i^{(N)}\rangle\}$, o produto tensorial dos espaços admite a base $\{|u_{i_1}^{(1)}\rangle \otimes |u_{i_2}^{(2)}\rangle \otimes \cdots \otimes |u_{i_N}^{(N)}\rangle\}$. Sendo assim, um vetor de estado $|\Psi\rangle$ pertencente a \mathcal{H} pode ser escrito como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \alpha_{i_1, i_2, \dots, i_N} |u_{i_1}^{(1)}\rangle \otimes |u_{i_2}^{(2)}\rangle \otimes \dots \otimes |u_{i_N}^{(N)}\rangle,$$
(2.14)

onde $\alpha_{i_1,i_2,...,i_N} \in \mathbb{C}$. Assim, o produto interno entre dois vetores produto quaisquer $|\Psi_1\rangle = \sum_{i_1,...,i_N} \alpha_{i_1,...,i_N} |u_{i_1}^{(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |u_{i_N}^{(N)}\rangle \in |\Psi_2\rangle = \sum_{j_1,...,j_N} \beta_{j_1,...,j_N} |u_{j_1}^{(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |u_{j_N}^{(N)}\rangle \in \mathbb{C}$ definido como:

$$\langle \Psi_{1} | \Psi_{2} \rangle = \sum_{i_{1}, i_{2}, \dots, i_{N}} \sum_{j_{1}, j_{2}, \dots, j_{N}} \alpha^{*}_{i_{1}, i_{2}, \dots, i_{N}} \beta_{j_{1}, j_{2}, \dots, j_{N}} \langle u^{(1)}_{i_{1}} | u^{(1)}_{j_{1}} \rangle \langle u^{(2)}_{i_{2}} | u^{(2)}_{j_{2}} \rangle \dots \langle u^{(N)}_{i_{N}} | u^{(N)}_{j_{N}} \rangle$$

$$= \sum_{i_{1}, i_{2}, \dots, i_{N}} \alpha^{*}_{i_{1}, i_{2}, \dots, i_{N}} \beta_{i_{1}, i_{2}, \dots, i_{N}}$$

$$(2.15)$$

Um observável A_k em \mathcal{H}_k pode ser estendido ao observável em \mathcal{H} como:

$$A_k \longrightarrow A = I_1 \otimes \dots \otimes A_k \otimes \dots I_N, \tag{2.16}$$

com ${\cal I}_j$ sendo o operador identidade do
 j-ésimo espaço. Explicitamente temos:

$$A|\Psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \alpha_{i_1, i_2, \dots, i_N} I_1 |u_{i_1}^{(1)}\rangle \otimes \dots \otimes A_k |u_{i_k}^{(k)}\rangle \otimes \dots \otimes I_N |u_{i_N}^{(N)}\rangle.$$
(2.17)

Podemos citar como exemplo o Hamiltoniano de um sistema composto por dois subsistemas $\mathcal{A} \in \mathcal{B}$ que não interagem entre si. Sendo assim, $H = H_A \otimes I_B + I_A \otimes H_B$ com $H_A \in H_B$ sendo o hamiltoniano de cada subsistema, onde os mesmos atuam nos seus correspondentes espaços.

Por conveniência, no decorrer das discussões o produto tensorial também será denotado por:

$$|u_1\rangle \otimes |u_2\rangle \otimes \cdots \otimes |u_N\rangle = |u_1, u_2, \dots, u_N\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |u_i\rangle.$$
 (2.18)

2.2.2 Traço parcial

A operação traço parcial permite de forma simples inferir as probabilidades de um dos subsistemas que constituem o sistema composto, descartando a informação referente aos outros subsistemas. A fim de ilustrar esta operação, iremos supor um sistema quântico constituído de dois subsistema $\mathcal{A} \in \mathcal{B}$, sendo o espaço de Hilbert do sistema composto $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \in \rho$ um operador densidade arbitrário. Queremos obter, por exemplo, um operador densidade para o subsistema \mathcal{A} . Considerando uma base $\{|u_i^{(A)}, u_i^{(B)}\rangle\}$ para o sistema composto, respectivamente $\{|u_i^{(A)}\rangle\} \in \{|u_i^{(B)}\rangle\}$ constituindo bases para os espaços dos subsistemas $\mathcal{A} \in \mathcal{B}$, definimos ρ_A tal que:

$$\langle u_i^{(A)} | \rho_A | u_j^{(A)} \rangle = \sum_k \langle u_i^{(A)}, u_k^{(B)} | \rho | u_j^{(A)}, u_k^{(B)} \rangle, \qquad (2.19)$$

sejam seus elmentos de matriz, ou seja,

$$\rho_A = \operatorname{Tr}_B\left[\rho\right],\tag{2.20}$$

denominado de operador densidade reduzido do subsistema \mathcal{A} . Este operador contém as informações referentes a este subsistema, no sentido de que nos é permitido calcular o valor

esperado de qualquer medida realizada sobre ele. De fato, o valor esperado do observável $A \otimes I_B$ satisfaz:

$$\langle A \otimes I_B \rangle = \operatorname{Tr} \left[A \otimes I_B \rho \right] = \sum_i \sum_j \langle u_i^A, u_j^B | A \otimes I_B \rho | u_i^A, u_j^B \rangle$$

$$= \sum_i \sum_j \sum_k \sum_l \langle u_i^A, u_j^B | A \otimes I_B | u_k^A, u_l^B \rangle \langle u_k^A, u_l^B | \rho | u_i^A, u_j^B \rangle$$

$$= \sum_i \sum_k \langle u_i^A | A | u_k^A \rangle \sum_j \langle u_k^A, u_j^B | \rho | u_i^A, u_j^B \rangle$$

$$= \sum_i \sum_k \langle u_i^A | A | u_k^A \rangle \langle u_k^A | \rho_A | u_i^A \rangle$$

$$= \operatorname{Tr}_A \left[A \rho_A \right].$$

$$(2.21)$$

2.3 Estados coerentes de spin

Nesta seção estudaremos a definição e algumas das principais propriedades de estados coerentes de spin, baseando-nos nas referências [16,17]. Inicialmente faremos uma breve revisão da álgebra caracterizada pelos operadores momento angular, visto que a classe de estados coerentes que estamos interessados é baseada nesta álgebra.

2.3.1 Momento angular

No formalismo da mecânica quântica as componentes do momento angular de uma partícula são associadas a operadores hermitianos, $J_i(i = x, y, z)$, obedecendo as relações de comutação:

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k, \qquad (2.22)$$

$$\left[J^2, J_i\right] = 0, \qquad (2.23)$$

com $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ sendo o quadrado do operador momento angular total. Como o momento angular total comuta com suas três componentes, podemos diagonalizá-lo simultaneamente com uma de suas componentes (com as três não seria possível, pois não comutam entre si). Aqui escolhemos a componente z. Dito isso, os autoestados do operador momento serão caracterizados por dois autovalores correspondentes aos observáveis J^2 e J_z ,

$$J^2|\nu,m\rangle = \hbar^2 \nu |\nu,m\rangle, \qquad (2.24)$$

$$J_z|\nu,m\rangle = \hbar m|\nu,m\rangle, \qquad (2.25)$$

com intuito de se determinar os valores para $\nu \in m$, podemos definir os operadores

$$J_{\pm} = \frac{J_x \pm i J_y}{2},$$
 (2.26)

de forma que obtemos as relações de comutação,

$$[J_+, J_-] = 2J_z, (2.27)$$

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}. \tag{2.28}$$

Com alguma manipulação algébrica, que pode ser encontrada em detalhes na referência [18], obtemos

$$J^{2}|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^{2}|j,m\rangle, \qquad (2.29)$$

$$J_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle, \qquad (2.30)$$

$$J_{\pm}|j,m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\hbar|j,m \pm 1\rangle, \qquad (2.31)$$

sendo j inteiro ou semi-inteiro, m = -j, -j + 1, ..., j - 1, j e um autoestado arbitrário do momento angular $|j, m\rangle$ podendo ser construído a partir do estado "fundamental" $|j, -j\rangle$, definido por $J^{-}|j, -j\rangle = 0$,

$$|j,m\rangle = \frac{1}{(j+m)!} {2j \choose j+m}^{\frac{1}{2}} J_{+}^{j+m} |j,-j\rangle$$
(2.32)

Dito isto, possuímos as relações necessárias para darmos continuidade à definição dos estados coerentes de spin.

2.3.2 Definição do estado coerente de spin

Um estado coerente de spin $|\theta, \varphi\rangle$, também conhecido como estado de Bloch, pode ser gerado por uma rotação arbitrária do estado "fundamental" $|j, -j\rangle$,

$$|\theta,\varphi\rangle = R_{\theta,\varphi}|j,-j\rangle, \qquad (2.33)$$

considerando o operador $R_{\theta,\varphi}$ produzindo uma rotação de um ângulo θ em torno do eixo $\vec{n} = (\sin \varphi, -\cos \varphi, 0)$, veja figura (1), ou seja,

$$R_{\theta,\varphi} = e^{-i\theta J_{\vec{n}}} = e^{-i\theta (J_x \sin \varphi - J_y \cos \varphi)}.$$
(2.34)

Escrevendo o operador rotação (2.34) em termos dos operadores (2.26), obtemos:

$$R_{\theta,\varphi} = e^{\zeta J_+ - \zeta^* J_-},\tag{2.35}$$

onde $\zeta = \frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}$, uma expressão análoga ao operador deslocamento que gera estados coerentes para o oscilador harmônico a partir do estado de vácuo.

Com intuito de se expandir o estado coerente de spin $|\theta, \varphi\rangle$ em termo dos autoestados do operador momento angular $|j, m\rangle$, reescrevemos (2.35) utilizando a decomposição de Gauss [17]

$$R_{\theta,\varphi} = \exp\{\tau J_+\} \exp\{-\ln(1+|\tau|^2)J_z\} \exp\{\tau^* J_-\}, \qquad (2.36)$$



Figura 1 – Representação da rotação $R_{\theta,\varphi}$ no espaço do momento angular

onde $\tau = e^{-i\varphi} \tan \frac{\theta}{2}$. A partir das equações (2.36) e (2.32) em (2.33), temos

$$\begin{aligned} |\theta,\varphi\rangle &= \frac{1}{(1+|\tau|^2)^j} e^{\tau J_+} |j,-j\rangle, \\ &= \sum_{m=-j}^j \frac{1}{(1+|\tau|^2)^j} {2j \choose j+m}^{\frac{1}{2}} \tau^{j+m} |j,m\rangle. \end{aligned}$$
(2.37)

Estados coerentes de spin em geral são não ortogonais,

$$\langle \theta, \varphi | \theta', \varphi' \rangle = \frac{1}{(1+|\tau|^2)^j (1+|\tau'|^2)^j} \sum_{m=-j}^j {2j \choose j+m} \tau^{*j+m} \tau'^{j+m},$$

= $\frac{(1+\tau^*\tau')^{2j}}{(1+|\tau|^2)^j (1+|\tau'|^2)^j}.$ (2.38)

e possuem uma relação de supercompleteza, que pode ser obtida utilizando a equação (2.37) com τ escrito em termos de θ e φ ,

$$\frac{(2j+1)}{4\pi} \int \int \sin(\theta) d\theta d\varphi |\theta, \varphi\rangle \langle \theta, \varphi| =$$

$$= (2j+1) \sum_{m} {2j \choose j+m} \int d\theta \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2j-2m+1} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2j+2m+1} |j,m\rangle \langle j,m|$$

$$= \sum_{m} |j,m\rangle \langle j,m| = 1.$$
(2.39)

Consequentemente, qualquer estado do espaço gerado pelos autovetores de J e J_z pode ser escrito como uma combinação linear de estados coerentes de spin.

3 Diagonalização do Hamiltoniano de Ising quântico com campo transverso

Neste capítulo discutimos a diagonalização exata do Hamiltoniano de Ising com campo transverso. Analisamos o estado fundamental do Hamiltoniano e estudamos o gap de energia entre o estado fundamental do subespaço de paridade positiva e negativa.

3.1 Hamiltoniano do sistema

O sistema estudado neste capítulo consiste de N spins $\frac{1}{2}$ arranjados em linha e tendo interação apenas entre os vizinhos mais próximos. A álgebra do momento magnético intrínseco (spin) é a mesma do momento angular, definido na subseção (2.3.1). Aqui estaremos interessados no spin $\frac{1}{2}$, descrito pelo operador spin total S e suas componentes $S_{\alpha} = \frac{\hbar}{2} \sigma^{\alpha} (\alpha = x, y, z)$, com relações de comutação análogas a (2.22) e (2.23). Os operadores σ_{α} são os conhecidos "operadores de Pauli" que na base ortonormal que diagonaliza σ_z , assumem a forma matricial:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

onde σ^z possui autovalores $\{1, -1\}$, com respectivos autoestados $\{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle\}$, o qual denominamos "spin para cima" $(|\uparrow\rangle)$ e "spin para baixo" $(|\downarrow\rangle)$.

O Hamiltoniano do sistema, chamado modelo de Ising unidimensional com campo transverso [19], é definido por:

$$H = -J\sum_{n=1}^{N} \left(\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + g\sigma_n^z\right),\tag{3.2}$$

com condições de contorno periódicas, $\sigma_{N+1}^{\alpha} = \sigma_1^{\alpha}$, onde σ_n^{α} "atua" no *n*-ésimo sítio da rede ($\sigma_n^{\alpha} = I_1 \otimes \cdots \otimes I_{n-1} \otimes \sigma^{\alpha} \otimes I_{n+1} \otimes \otimes \ldots I_N$), J > 0 (J < 0) está associado a energia de troca ferromagnética (antiferromagnética) e g ao campo magnético transverso. O primeiro termo do Hamiltoniano descreve a energia de interação entre os primeiros vizinhos e o segundo termo a interação entre o campo magético e a componete z do spin de cada sítio. Na figura (2), é apresentada a representação dos spins no modelo de Ising com campo transverso, onde cada ponto equivale a um sítio da rede, igualmente espaçados por a.

Antes de obtermos a solução exata de H, iremos fazer uma breve discussão qualitativa do modelo. Sabendo que $[\sigma^z, \sigma^x] \neq 0$, temos que o estado fundamental de H dependerá do campo g. Sendo assim, nos é interessante seu comportamento assintótico, para $g \ll 1$



Figura 2 – Representação do modelo de Ising com campo transverso unidimensional.

ou g >> 1. Definindo J = 1 e g > 0, para um campo g suficientemente pequeno, o sistema apresenta uma fase ferromagnética e o estado fundamental é duplamente degenerado. Com uma perturbação infinitesimal ao longo do eixo x todos os spins são polarizados para cima ou para baixo na direção x,

$$|F\rangle = \bigotimes_{n=1}^{N} |\langle -\rangle_n \quad \text{ou} \quad |F\rangle = \bigotimes_{n=1}^{N} |\rangle_n.$$
 (3.3)

onde

$$| \leftarrow \rangle_n = \frac{|\uparrow\rangle_n - |\downarrow\rangle_n}{\sqrt{2}}, \\ |\to\rangle_n = \frac{|\uparrow\rangle_n + |\downarrow\rangle_n}{\sqrt{2}}.$$
(3.4)

Entretando, se campo g for suficientemente grande, o sistema apresenta uma fase paramagnética onde o estado fundamental possui todos os spins polarizados para cima ao longo do eixo z,

$$|F\rangle = \bigotimes_{n=1}^{N} |\uparrow\rangle_n, \tag{3.5}$$

implicando o desaparecimento da magnetização espontânea ao longo de x. O comportamento assintótico do sistema dá indícios que deve existir um ponto de transição g_c entre as fases ferromagnética e paramagnética. De fato ele existe e foi determinado como $g_c = 1$ [19].

No decorrer das duas subseções a seguir apresentaremos o formalismo que permite a diagonalização de H, que será feita encontrando operadores fermiônicos η_k , tais que

$$H = \sum_{k} \epsilon_k \left(\eta_k^{\dagger} \eta_k - \frac{1}{2} \right).$$
(3.6)

com $\epsilon_k \geq 0$. O estado fundamental de H corresponde então ao estado sem nenhuma ocupação de pseudo-partícula associada a η_k , ou seja, $\eta_k |F\rangle = 0$, $\forall k$, implicando em $E_F = -\frac{1}{2} \sum_k \epsilon_k$, onde E_F é a energia do estado fundamental . Observe que o estado $|F\rangle$ não é definido de forma arbitrária, esta configuração de fato é a que minimiza a energia. Se qualquer modo \bar{k} estivesse ocupado, ocasionaria o acréscimo de um termo positivo $\epsilon_{\bar{k}}$. A partir do estado fundamental geram-se todos os autoestados de H, populando os estados associados a cada pseudo-partícula

$$\eta_{k_1}^{\dagger} \eta_{k_2}^{\dagger} \dots \eta_{k_j}^{\dagger} |F\rangle, \qquad (3.7)$$

onde

$$j = 1, 2, \dots, N,$$
 (3.8)

com energia dada por:

$$E = \sum_{k=k_1,k_2,\dots k_N} \epsilon_k + E_F.$$
(3.9)

3.2 Transformação de Jordan-Wigner

Reformulamos o Hamiltoniano (3.2), utilizando como principal ferramenta a transformação de Jordan-Wigner [19,20], que permite mapear um sistema de spins $\frac{1}{2}$ interagentes para um sistema de férmions não interagentes, através das seguintes definições:

$$c_{n} = \sigma_{n}^{+} \left(\prod_{m < n} \sigma_{m}^{z} \right),$$

$$c_{n}^{\dagger} = \sigma_{n}^{-} \left(\prod_{m < n} \sigma_{m}^{z} \right),$$
(3.10)

onde

$$\sigma_n^{\pm} = \frac{\sigma_n^x \pm i\sigma_n^y}{2},\tag{3.11}$$

e c_n, c_n^{\dagger} são operadores fermiônicos que satisfazem as seguintes relações de anticomutação:

$$\{c_i, c_j\} = \left\{c_i^{\dagger}, c_j^{\dagger}\right\} = 0$$
$$\left\{c_i, c_j^{\dagger}\right\} = \delta_{ij}.$$
(3.12)

Utilizando a inversão das relações (3.10), juntamente com a definição dos operadores (3.1) e (3.11), podemos escrever

$$\sigma_{n}^{z} = 1 - 2c_{n}^{\dagger}c_{n},$$

$$\sigma_{n}^{x} = (c_{n} + c_{n}^{\dagger})\prod_{m < n} (1 - 2c_{m}^{\dagger}c_{m}).$$
(3.13)

A partir das equações (3.13) podemos reescrever o segundo termo do Hamiltoniano (3.2) por substituição direta. Entretanto, no primeiro termo é necessário tratar os elementos de borda separadamente, e de alguma manipulação algébrica utilizando as relações de anticomutação (3.12), como veremos a seguir.

Para $n = 1, 2, \dots, N - 1$,

$$\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x = (c_n + c_n^{\dagger}) \prod_{m < n} (1 - 2c_m^{\dagger} c_m) (c_{n+1} + c_{n+1}^{\dagger}) \prod_{m' < n+1} (1 - 2c_{m'}^{\dagger} c_{m'})$$

$$= (c_n + c_n^{\dagger}) (1 - 2c_n^{\dagger} c_n) (c_{n+1} + c_{n+1}^{\dagger}) \prod_{m < n} (1 - 2c_m^{\dagger} c_m) (1 - 2c_m^{\dagger} c_m)$$

$$= \left[c_n + c_n^{\dagger} - 2c_n (1 - c_n c_n^{\dagger}) \right] (c_{n+1} + c_{n+1}^{\dagger})$$

$$\prod_{m < n} \left[1 - 4c_m^{\dagger} c_m + 4c_m^{\dagger} c_m (1 - c_m c_m^{\dagger}) \right]$$

$$= (c_n^{\dagger} - c_n) (c_{n+1}^{\dagger} + c_{n+1}). \qquad (3.14)$$

Já para o termo de borda (para n = N) temos que:

$$\sigma_N^x \sigma_1^x = (c_N + c_N^{\dagger}) \prod_{m < N} (1 - 2c_m^{\dagger} c_m) (c_1 + c_1^{\dagger}) = \prod_{m < N} (1 - 2c_m^{\dagger} c_m) (1 - 2c_N^{\dagger} c_N) (1 - 2c_N^{\dagger} c_N) (c_N + c_N^{\dagger}) (c_1 + c_1^{\dagger}) = \prod_m^N (1 - 2c_m^{\dagger} c_m) \left[c_N + c_N^{\dagger} - 2c_N^{\dagger} (1 - c_N^{\dagger} c_N) \right] (c_1 + c_1^{\dagger}) = -\prod_{m=1}^N (1 - 2c_m^{\dagger} c_m) (c_N^{\dagger} - c_N) (c_1^{\dagger} + c_1).$$
(3.15)

Portanto o Hamiltoniano (3.2) pode ser escrito como:

$$H = -J \sum_{n}^{N} \left(c_{n}^{\dagger} c_{n+1} + c_{n+1}^{\dagger} c_{n} + c_{n}^{\dagger} c_{n+1}^{\dagger} + c_{n+1} c_{n} \right) + J \left(1 + P \right) \left(c_{N}^{\dagger} c_{1} + c_{1}^{\dagger} c_{N} + c_{N}^{\dagger} c_{1}^{\dagger} + c_{1} c_{N} \right) + J g \sum_{n}^{N} \left(2 c_{n}^{\dagger} c_{n} - 1 \right), \qquad (3.16)$$

sendo $P = \prod_{m}^{N} (1 - 2c_{m}^{\dagger}c_{m})$ denominado "operador paridade", cujos possíveis autovalores são {1, -1}. O operador P faz com que o problema dependa da paridade do subespaço, uma vez que P possui autovalor 1 para o subespaço definido como de paridade positiva e -1 para o subespaço definido como de paridade negativa. Observa-se que P comuta com o Hamiltoniano (3.16), [P, H] = 0, o que implica na conservação da paridade, ou seja, a criação (destruição) de pseudo-partículas associadas a c_n^{\dagger} (c_n) acontece unicamente em pares. De posse destas informações, podemos diagonalizar H em cada subespaço (paridade negativa ou positiva) independentemente, sendo interessante escrever o Hamiltoniano (3.16) como:

$$H = H^+ + H^-, (3.17)$$

onde $H^{\pm} = HP^{\pm}$ e $P^{\pm} = \frac{1\pm P}{2}$ são operadores de projeção em subespaços com números pares (+) e ímpares (-) de pseudo-partículas. Desta forma:

$$H^{\pm} = -J \sum_{n}^{N} \left(c_{n}^{\dagger} c_{n+1} + c_{n+1}^{\dagger} c_{n} + c_{n}^{\dagger} c_{n+1}^{\dagger} + c_{n+1} c_{n} - 2g c_{n}^{\dagger} c_{n} + g \right), \qquad (3.18)$$

são as projeções de H nos subespaços correspondentes. Para H^+ os operadores fermiônicos satisfazem condições de contorno antiperiódicas ($c_{N+1} = -c_1$), entretanto, para H^- as condições de contorno são periódicas ($c_{N+1} = c_1$).

3.3 Diagonalização do Hamiltoniano

Nesta subseção iremos apresentar a diagonalização do hamiltoniano (3.18) nos subespaços de paridade positiva e negativa por meio de uma transformada de Fourier seguida por uma transformada de Bogoliubov [21, 22]. Estes cálculos devem ser feitos separadamente caso o números de sítios na cadeia seja par ou ímpar.

3.3.1 Número par de sítios, subespaço de paridade positiva

Primeiramente fazemos a transformada de Fourier

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikna},\tag{3.19}$$

onde

$$k = \pm \frac{1}{2} \frac{2\pi}{Na}, \dots, \pm \left(\frac{N}{2} - \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi}{Na}, \tag{3.20}$$

são escolhidos de forma que os operadores c_n satisfaçam a condição de contorno antiperiódica. Aqui a é o espaçamento entre os sítios da rede. As relações de anticomutação (3.12) se mantem no espaço recíproco (k), quer dizer, para os operadores c_k .

A partir da equação (3.19), temos que as somas presentes no Hamiltoniano (3.18) assumem a forma:

$$\sum_{n=1}^{N} c_n^{\dagger} c_n = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \left(\sum_k c_k^{\dagger} e^{-ikna} \right) \left(\sum_{k'} c_{k'} e^{ik'na} \right)$$
$$= \sum_k \sum_{k'} c_k^{\dagger} c_{k'} \left(\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} e^{i(k'-k)na} \right)$$
$$= \sum_k c_k^{\dagger} c_k, \qquad (3.21)$$

$$\sum_{n=1}^{N} c_{n}^{\dagger} c_{n+1} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \left(\sum_{k} c_{k}^{\dagger} e^{-ikna} \right) \left(\sum_{k'} c_{k'} e^{ik'(n+1)a} \right)$$
$$= \sum_{k} \sum_{k'} c_{k}^{\dagger} c_{k'} e^{ik'a} \left(\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} e^{i(k'-k)na} \right)$$
$$= \sum_{k} c_{k}^{\dagger} c_{k} e^{ika}, \qquad (3.22)$$

$$\sum_{n=1}^{N} c_{n+1}c_n = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \left(\sum_k c_k^{\dagger} e^{ik(n+1)a} \right) \left(\sum_{k'} c_{k'} e^{ik'na} \right)$$
$$= \sum_k \sum_{k'} c_k c_{k'} e^{ika} \left(\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} e^{i(k'+k)na} \right)$$
$$= \frac{1}{2} \sum_k c_k c_{-k} e^{ika} + \frac{1}{2} \sum_k' c_{-k'} c_{k'} e^{-ik'a}$$
$$= -i \sum_k \sin(ka) c_{-k} c_k, \qquad (3.23)$$

as duas somas restantes são as adjuntas de (3.22) e (3.23),

$$\sum_{n=1}^{N} c_{n+1}^{\dagger} c_n \left(\sum_{n=1}^{N} c_n^{\dagger} c_{n+1} \right)^{\dagger} = \sum_k c_k^{\dagger} c_k e^{-ika}, \qquad (3.24)$$

$$\sum_{n=1}^{N} c_n^{\dagger} c_{n+1}^{\dagger} = \left(\sum_{n=1}^{N} c_{n+1} c_n\right) = -i \sum_k \sin(ka) c_{-k}^{\dagger} c_k^{\dagger}.$$
(3.25)

As equações (3.21-3.25) nos permitem escrever o Hamiltoniano como:

$$H^{+}(N \operatorname{par}) = J \sum_{k} \left\{ [g - \cos(ka)] \left[c_{k}^{\dagger} c_{k} - c_{-k} c_{-k}^{\dagger} \right] + i \sin(ka) \left[c_{k}^{\dagger} c_{-k}^{\dagger} + c_{-k} c_{k} \right] \right\}, \quad (3.26)$$

que também pode assumir a forma:

$$H^{+}(N \operatorname{par}) = J \sum_{k} \left(\begin{array}{c} c_{k}^{\dagger} & c_{-k} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} g - \cos(ka) & -i\sin(ka) \\ i\sin(ka) & -[g - \cos(ka)] \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} c_{k} \\ c_{-k}^{\dagger} \end{array} \right).$$
(3.27)

A diagonalização de $H^+(N \text{ par})$ é completada pela transformação de Bogoliubov, onde introduziremos ao problema novos operadores $\eta_k \in \eta_k^{\dagger}$, construídos como combinações lineares dos operadores $c_k \in c_k^{\dagger}$.

$$\eta_{k} = \cos\left(\frac{\theta_{k}}{2}\right)c_{k} - i\sin\left(\frac{\theta_{k}}{2}\right)c_{-k}^{\dagger},$$

$$\eta_{-k}^{\dagger} = \cos\left(\frac{\theta_{k}}{2}\right)c_{-k}^{\dagger} - i\sin\left(\frac{\theta_{k}}{2}\right)c_{k},$$
(3.28)

onde se pode verificar que os operadores $\{\eta_k\}$ também são operadores fermiônicos, ou seja, obedecem as relações:

$$\{\eta_k, \eta_{k'}\} = \left\{\eta_k^{\dagger}, \eta_{k'}^{\dagger}\right\}$$
$$\left\{\eta_k, \eta_{k'}^{\dagger}\right\} = \delta_{kk'}.$$
(3.29)

Invertendo (3.28), podemos escrever:

$$\begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) & i\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \\ i\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_k \\ \eta_{-k}^{\dagger} \end{pmatrix}.$$
 (3.30)

Substituindo (3.30) em (3.27) e exigindo que $H^+(N \text{ par})$ tenha a forma (3.6), obtemos que as relações abaixo devem ser satisfeitas,

$$2J \begin{pmatrix} g - \cos(ka) & -i\sin(ka) \\ i\sin(ka) & -[g - \cos(ka)] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \\ i\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \end{pmatrix} = \epsilon^+ \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \\ i\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

$$2J \begin{pmatrix} g - \cos(ka) & -i\sin(ka) \\ i\sin(ka) & -[g - \cos(ka)] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \end{pmatrix} = \epsilon^{-} \begin{pmatrix} i\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \end{pmatrix}.$$
(3.32)

Resolvendo as equações (3.31) e (3.32), conhecidas como equações estacionarias de Bogoliubov-de Genes, determinamos $\epsilon^{\pm} e \theta_k$, que obedecem a equação (3.6),

$$\epsilon^{\pm} = \pm \epsilon_k = 2J\sqrt{\left[g - \cos(ka)\right]^2 + \sin^2(ka)},\tag{3.33}$$

е

$$\theta_k = \arctan\left[\frac{\sin(ka)}{g - \cos(ka)}\right].$$
(3.34)

Finalmente, podemos escrever $H^+(N \text{ par})$ como

$$H^{+}(N \operatorname{par}) = \frac{1}{2} \sum_{k} \epsilon_{k} \left(\eta_{k}^{\dagger} \eta_{k} - \eta_{-k} \eta_{-k}^{\dagger} \right), \qquad (3.35)$$

o que é equivalente a:

$$H^{+}(N \operatorname{par}) = \sum_{k} \epsilon_{k} \left(\eta_{k}^{\dagger} \eta_{k} - \frac{1}{2} \right).$$
(3.36)

Restringindo-se ao subespaço de paridade positiva, o estado fundamental é o estado sem nenhuma excitação, ou seja, o estado definido por:

$$\eta_k |F\rangle = 0, \forall k, \tag{3.37}$$

com energia

$$E_F^+(N \operatorname{par}) = -\frac{1}{2} \sum_k \epsilon_k.$$
(3.38)

Para este caso específico obteremos uma expressão para o estado fundamental $|F\rangle$, em termos dos autoestados dos operadores fermiônicos $c_k \in c_k^{\dagger}$, através do seguinte "ansatz":

$$|F\rangle = \prod_{k} \eta_{k} |0\rangle = \prod_{k>0} \eta_{k} \eta_{-k} |0\rangle, \qquad (3.39)$$

onde $|0\rangle$ é o estado de vácuo aniquilado por todos operadores $\{c_k\}$, portando satisfaz $c_k|0_k\rangle = 0$, $\forall k$. Das relações de anticomutação dos operador fermiônicos, temos que $\eta_k\eta_k \equiv 0 \ \forall k$, sendo assim a relação (3.39) obedece $\eta_k|F\rangle = 0 \ \forall k$. Resta então verificar que $|F\rangle \neq 0^1$. Uma expressão análoga para $|F\rangle$ será conveniente para o estudo desenvolvido

¹ Se em um espaço de dimensão 2^N temos N operadores fermiônicos γ_k , $\exists |\psi\rangle \neq 0$, tal que $\gamma_k |\psi\rangle = 0 \ \forall k$. Este vetor $|\psi\rangle$ é unico, a menos de constantes multiplicativas.

no próximo capítulo. Utilizando as relações (3.28), podemos computar:

$$\eta_k \eta_{-k} |0\rangle = \left[\cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_k - i \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_{-k}^{\dagger} \right] \\ \times \left[\cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_{-k} + i \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_k^{\dagger} \right] |0_k, 0_{-k}\rangle \\ = \left[i \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_k^{\dagger} c_{-k}^{\dagger} \right] |0\rangle.$$
(3.40)

Impondo a condição de normalização $\langle F|F\rangle = 1$ e aplicando as relações de anticomutação fermiônicas, temos:

$$|F\rangle = \prod_{k>0} \left(\cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_k^{\dagger} c_{-k}^{\dagger} \right) |0\rangle.$$
(3.41)

A seguir apresentaremos uma descrição resumida da diagonalização dos outros casos, uma vez que os cálculos são similares aos apresentados neste subseção.

3.3.2 Número par de sítios, subespaço de paridade negativa

Efetuando a transformada de Fourier (3.19), de forma que c_n satisfaça condições de contorno periódicas, fazendo:

$$k = 0, \pm \frac{2\pi}{Na}, \pm 2\frac{2\pi}{Na}, \dots, \pm \left(\frac{N}{2} - 1\right)\frac{2\pi}{Na}, \frac{\pi}{a},$$
(3.42)

o Hamiltoniano $H^{-}(N \text{ par})$ pode ser escrito como:

$$H^{-}(N \text{ par}) = J \sum_{k \setminus \{0, \pi/a\}} \left\{ [g - \cos(ka)] \left[c_{k}^{\dagger} c_{k} - c_{-k}^{\dagger} c_{-k} \right] + i \sin(ka) \left[c_{k}^{\dagger} c_{-k}^{\dagger} + c_{-k} c_{k} \right] \right\} + J \left(g - 1 \right) \left(c_{0}^{\dagger} c_{0} - c_{0} c_{0}^{\dagger} \right) + J \left(g + 1 \right) \left(c_{\pi/a}^{\dagger} c_{\pi/a} - c_{\pi/a} c_{\pi/a}^{\dagger} \right).$$
(3.43)

Observe que os termos $k = \{0, \pi/a\}$ de $H^-(N \text{ par})$ estão na forma desejada. Já a soma $k \setminus \{0, \pi/a\}$ é diagonalizada com a transformação de Bogoliobov (3.30), onde obtemos

$$H^{-}(N \text{ par}) = \sum_{k \setminus \{0, \pi/a\}} \epsilon_{k} \left(\eta_{k}^{\dagger} \eta_{k} - \frac{1}{2} \right) + 2J \left(g - 1 \right) \left(c_{0}^{\dagger} c_{0} - \frac{1}{2} \right) + 2J \left(g + 1 \right) \left(c_{\pi/a}^{\dagger} c_{\pi/a} - \frac{1}{2} \right).$$
(3.44)

O estado fundamental da paridade negativa terá o modo k = 0 ou $k = \pi/a$ ocupado. Levando em consideração a minimização da energia, temos que o modo k = 0 está ocupado e o modo $k = \pi/a$ está vazio, então a energia do estado fundamental é

$$E_F^-(N \text{ par}) = -\frac{1}{2} \sum_{k \setminus \{0, \pi/a\}} \epsilon_k - 2J.$$
 (3.45)

3.3.3 Número ímpar de sítios, subespaço de paridade positiva

Realizando a transformada de Fourier (3.19), de forma que c_n satisfaça condições de contorno antiperiódicas

$$k = \pm \frac{1}{2} \frac{2\pi}{Na}, \dots, \pm \left(\frac{N}{2} - 1\right) \frac{2\pi}{Na}, \frac{\pi}{a},$$
(3.46)

podemos escrever $H^+(N \text{ impar})$ como:

$$H^{+}(N \text{ impar}) = J \sum_{k \setminus \{\pi/a\}} \left\{ [g - \cos(ka)] \left[c_{k}^{\dagger} c_{k} - c_{-k}^{\dagger} c_{-k} \right] + i \sin(ka) \left[c_{k}^{\dagger} c_{-k}^{\dagger} + c_{-k} c_{k} \right] \right\} + J \left(g + 1 \right) \left(c_{\pi/a}^{\dagger} c_{\pi/a} - c_{\pi/a} c_{\pi/a}^{\dagger} \right).$$
(3.47)

A soma em $\{k\} \setminus \{\pi/a\}$ é diagonalizada com a transformação de Bogoliubov (3.30), sendo assim

$$H^{+}(N \,\text{impar}) = \sum_{k \setminus \{\pi/a\}} \epsilon_k \left(\eta_k^{\dagger} \eta_k - \frac{1}{2}\right) + 2J \left(g + 1\right) \left(c_{\pi/a}^{\dagger} c_{\pi/a} - \frac{1}{2}\right).$$
(3.48)

No estado de menor energia todos os modos k estarão vazios, inclusive $k = \pi/a$. Sua energia será

$$E_F^+(N\,\text{impar}) = -\frac{1}{2} \sum_{k \setminus \{\pi/a\}} \epsilon_k - J(g+1).$$
(3.49)

3.3.4 Número ímpar de sítios, subespaço de paridade negativa

Finalmente, utilizando a transformada de Fourier (3.19), de forma que c_n satisfaça condições de contorno periódicas

$$k = 0, \pm \frac{2\pi}{Na}, \pm 2\frac{2\pi}{Na}, \dots, \pm \left(\frac{N}{2} - \frac{1}{2}\right)\frac{2\pi}{Na}, \tag{3.50}$$

o hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H^{-}(N \text{ impar}) = J \sum_{k \setminus \{0\}} \left\{ [g - \cos(k)] \left[c_{k}^{\dagger} c_{k} - c_{-k}^{\dagger} c_{-k} \right] + i \sin(k) \left[c_{k}^{\dagger} c_{-k}^{\dagger} + c_{-k} c_{k} \right] \right\} + J \left(g - 1 \right) \left(c_{0}^{\dagger} c_{0} - c_{0} c_{0}^{\dagger} \right).$$
(3.51)

A soma em $k \setminus \{0\}$ é diagonalizada com a transformação de Bogoliobov (3.30),

$$H^{-}(N \,\text{impar}) = \sum_{k \setminus \{0\}} \epsilon_k \left(\eta_k^{\dagger} \eta_k - \frac{1}{2} \right) + 2J \left(g - 1 \right) \left(c_0^{\dagger} c_0 - \frac{1}{2} \right). \tag{3.52}$$

O estado fundamental de $H^-(N$ ímpar) será ocupado apenas no modo k = 0, para que sua paridade seja negativa, assumindo a energia

$$E_F^-(N\,\text{impar}) = -\frac{1}{2}\sum_{k\setminus\{0\}} \epsilon_k + J(g-1).$$
(3.53)

3.4 Estado Fundamental e Gap

Nesta seção iremos comparar a energia do estado fundamental do subespaço de paridade positiva com o subespaço de paridade negativa, com intuito de obter o estado de menor energia do Hamiltoniano como um todo, seguindo a análise detalhada de Damski et. al [22].

Estamos interessados em quantificar a diferença $(E_F^- - E_F^+)$, aqui denominada gap. No decorrer da seção assumiremos J = 1, a = 1 e g > 0. Iniciamos escrevendo ϵ_k (assumindo k uma variável contínua) como um série de Fourier:

$$\epsilon_k = \sum_{l=0}^{\infty} b_l \cos(lk), \qquad (3.54)$$

onde

$$b_l = \frac{2}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \cos(kl) \sqrt{\left[g - \cos(k)\right]^2 + \sin^2(k)}.$$
 (3.55)

Note que ϵ_k é uma função par de período 2π , logo sua série de Fourier tem apenas os termos cosseno.

Substituindo (3.54) nas equações (3.38), (3.45), (3.49), (3.53) e utilizando a identidade $\sum_{j=0}^{n-1} \cos(x+jy) = \cos\left(x+(n-1)\frac{y}{2}\right) \sin\left(n\frac{y}{2}\right) \csc\left(\frac{y}{2}\right)$, obtemos

$$E_{F}^{+}(N \operatorname{par}) = -\frac{1}{2} \sum_{k} \epsilon_{k}, \quad k = \pm \frac{1}{2} \frac{2\pi}{N}, ..., \pm \left(\frac{N}{2} - \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi}{N},$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} \sum_{j=0}^{N-1} \cos\left[\left(j - \frac{N-1}{2}\right) \frac{2\pi}{N}l\right]$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} \sin\left(\pi l\right) \csc\left(\frac{\pi}{N}l\right)$$

$$= -\frac{1}{2} N(b_{0} - b_{N} + b_{2N} - b_{3N} + ...), \qquad (3.56)$$

$$E_{F}^{-}(N \operatorname{par}) = -\frac{1}{2} \sum_{k \setminus \{0,\pi\}} \epsilon_{k} - 2, \quad k = 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm 2\frac{2\pi}{N}, ..., \pm \left(\frac{N}{2} - 1\right) \frac{2\pi}{N}, \pi,$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} \left\{ \sum_{j=0}^{N-2} \cos\left[\left(j - \frac{N-2}{2}\right) \frac{2\pi}{N} l \right] - 1 \right\}$$

$$= -2 + \frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} - \frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} \sin\left(\frac{N-1}{N}\pi l\right) \csc\left(\frac{\pi}{N} l\right)$$

$$= -2 + \frac{1}{2} \epsilon_{0} + \frac{1}{2} \epsilon_{\pi} - \frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} \sin\left(\pi l\right) \cot\left(\frac{\pi}{N} l\right)$$

$$= (g - 1) + |g - 1| - \frac{1}{2} N(b_{0} + b_{N} + b_{2N} + b_{3N} + ...), \quad (3.57)$$

$$E_{F}^{+}(N \text{ impar}) = -\frac{1}{2} \sum_{k \setminus \{\pi\}} \epsilon_{k} - (g+1), \quad k = \pm \frac{1}{2} \frac{2\pi}{N}, ..., \pm \left(\frac{N}{2} - 1\right) \frac{2\pi}{N}, \pi,$$

$$= -(g+1) - \frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} \left\{ \sum_{j=0}^{N-2} \cos\left[\left(j - \frac{N-2}{2}\right) \frac{2\pi}{N}l\right] \right\}$$

$$= -(g+1) + \frac{1}{2} \epsilon_{\pi} - \frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} \sin(\pi l) \cot\left(\frac{\pi}{N}l\right)$$

$$= -\frac{1}{2} N(b_{0} - b_{N} + b_{2N} - b_{3N} + ...), \qquad (3.58)$$

$$E_{F}^{-}(N \text{ impar}) = -\frac{1}{2} \sum_{k \setminus \{0\}} \epsilon_{k} + (g-1), \quad k = 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm 2\frac{2\pi}{N}, ..., \pm \left(\frac{N}{2} - \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi}{N},$$

$$= (g-1) - \frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} \cos\left[\left(j - \frac{N-1}{2}\right) \frac{2\pi}{N}l\right] - 1 \right\}$$

$$= (g-1) + \frac{1}{2} \epsilon_{0} - \frac{1}{2} \sum_{l}^{\infty} b_{l} \sin(\pi l) \csc\left(\frac{\pi}{N}l\right)$$

$$= (g-1) + |g-1| - \frac{1}{2} N(b_{0} + b_{N} + b_{2N} + b_{3N} + ...). \quad (3.59)$$

As equações (3.56-3.59) nos dizem que:

$$E_F^- - E_F^+ = 2(g-1)\Theta(g-1) - N(b_N + b_{3N} + b_{5N} + \dots),$$
(3.60)

on de Θ é a função de Heaviside.

Restringindo ao caso da fase ferromagnética (0 < g < 1) e l > 2, introduzimos a variável $z = e^{ik}$, que juntamente com as definições:

$$\cos(k) = \frac{e^{ik} + e^{-ik}}{2},$$

$$\sin(k) = \frac{e^{ik} - e^{-ik}}{2i},$$
(3.61)

nos permite escrever os coeficiente de Fourier (3.55) como:

$$b_{l} = -\frac{2}{\pi} \oint_{|z|=1} dz \sqrt{\frac{(z-g)(gz-1)}{z}} z^{l-1}.$$
(3.62)

Note que, denominando $h(z) = \frac{(z-g)(gz-1)}{z}$, $h^{\frac{1}{2}} = e^{\frac{1}{2}\ln h}$, então, para que $h^{\frac{1}{2}}$ seja unívoca, definimos um "corte" no "ramo" que nos restrinja a uma região onde não exista um caminho fechado que encerre a origem. Por conveniência, definimos o corte ao longo do eixo positivo Re h, o que equivale a tomar cortes ao longo de $(0,g) \cup (\frac{1}{g},\infty)$ no plano complexo z, representado por linhas vermelhas na figura (3).



Figura 3 – Ilustração do plano complexo z. As linhas em vermelho representam os cortes $(0,g) \cup \left(\frac{1}{g},\infty\right)$. A circunferência tracejada o caminho de integração, |z| = 1, e a curva C o caminho de integração originado da deformação de |z| = 1.

Na figura (3) a curva C surge da deformação do caminho de integração, |z| = 1, em (3.62), nos levando a escrever

$$b_l = -\frac{2}{\pi} \oint_C dz f(z) \tag{3.63}$$

onde $f(z) = \sqrt{\frac{(z-g)(gz-1)}{z}} z^{l-1}$. Possuímos a liberdade para escolher a curva C em um limite tendendo ao corte (0, g). Para tal fim, particionamos C em quatro curvas representadas na figura (4), a seguir: As curvas são escolhidas nos limites $r_1 \to 0, r_2 \to 0$ e $\varepsilon \to 0$, sendo $r_1 \in r_2$, os raios correspondentes às curvas $C_1 \in C_2$, e ε a diferença em módulo entre o eixo Re z e as curvas $C_3 \in C_4$. Escrevendo a integral (3.63) particionada temos:

$$b_l = -\frac{2}{\pi} \left(\int_{C_1} dz f(z) + \int_{C_2} dz f(z) + \int_{C_3} dz f(z) + \int_{C_4} dz f(z) \right).$$
(3.64)



Figura 4 – Ilustração do caminho de integração C. Caminhos C_1 , C_2 e C_3 , C_4 , estão representados de azul e preto, respectivamente.

Para C_1 , uma vez que:

$$\left| \int_{C_1} dz f(z) \right| \le \int_{C_1} dz \left| f(z) \right|,$$
 (3.65)

onde $\left|f(z)\right|$ é uma função contínua, o que nos diz que existe uma constante M_{1} tal que

$$|f(z)| \le M_1.$$
 (3.66)

Substituindo a desigualdade (3.66) na desigualdade (3.65), temos

$$\left| \int_{C_1} dz f(z) \right| \leq \int_{C_1} dz M_1,$$

= $M_1 L_1,$ (3.67)

onde L_1 é o perímetro da curva C_1 , como $r_1 \to 0$ implica em $L_1 \to 0$, então

$$\lim_{r_1 \to 0} \int_{C_1} dz f(z) = 0.$$
(3.68)

O mesmo raciocínio vale para a curva C_2 , logo

$$\lim_{r_2 \to 0} \int_{C_2} dz f(z) = 0.$$
(3.69)

Já na curva C_3 , escrevemos $z = x + i\varepsilon$, com $x \in \mathbb{R}$, mais especificamente $0 \le x \le g$.

$$\int_{C_3} dz f(z) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_0^g dx \exp\left\{\frac{1}{2} \left[\ln(x - g + i\varepsilon) + \ln(gx - 1 + ig\varepsilon) - \ln(x + i\varepsilon)\right]\right\} (x + i\varepsilon)^{l-1}$$

$$= \int_0^g dx \exp\left\{\frac{1}{2} \left[\ln(x - g) + 0 \cdot i + \ln(gx - 1) + 0 \cdot i - \ln(x) - 0 \cdot i\right]\right\} x^{l-1}$$

$$= \int_0^g dx \sqrt{\frac{(x - g)(gx - 1)}{x}} x^{l-1}.$$
(3.70)

Para C_4 , temos que $z = x - i\varepsilon$, sendo assim

$$\int_{C_4} dz f(z) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_g^0 dx \exp\left\{\frac{1}{2} \left[\ln(x - g - i\varepsilon) + \ln(gx - 1 - ig\varepsilon) - \ln(x - i\varepsilon)\right]\right\} (x - i\varepsilon)^{l-1} \\
= \int_g^0 dx \exp\left\{\frac{1}{2} \left[\ln(x - g) + 2\pi i + \ln(gx - 1) + 2\pi i - \ln(x) - 2\pi i\right]\right\} x^{l-1} \\
= e^{i\pi} \int_g^0 dx \sqrt{\frac{(x - g)(gx - 1)}{x}} x^{l-1} \\
= \int_0^g dx \sqrt{\frac{(x - g)(gx - 1)}{x}} x^{l-1}.$$
(3.71)

A partir das equações (3.68-3.71) e (3.64), definindo a variável x = gt, obtemos

$$b_l = -\frac{4g^l}{\pi} \int_0^1 dt \sqrt{(1-t)(1-g^2t)} t^{l-\frac{3}{2}}.$$
(3.72)

Substituindo a equação (3.72) na equação (3.60), obtemos

$$E_{F}^{-} - E_{F}^{+} = \frac{4N}{\pi} \int_{0}^{1} dt \sqrt{(1-t)(1-g^{2}t)} \sum_{l=N,3N,\dots} g^{l} t^{l-\frac{3}{2}}$$
$$= \frac{4Ng^{N}}{\pi} \int_{0}^{1} dt \frac{t^{N-\frac{3}{2}} \sqrt{(1-t)(1-g^{2}t)}}{1-(gt)^{2N}}, \qquad g < 1.$$
(3.73)

O gap na fase paramagnética (g > 1) pode ser obtido através do mapeamento

$$g \leftrightarrow \frac{1}{g},$$
 (3.74)

do gap da fase ferromagnética. Realizando o mapeamento (3.74) nas equações (3.38), (3.45), (3.49) e (3.53), temos que

$$\epsilon_k\left(\frac{1}{g}\right) = \frac{\epsilon_k(g)}{g}, \qquad g > 0.$$
 (3.75)

Substituindo (3.75) em (3.60), podemos escrever

$$E_{F}^{-}(g) - E_{F}^{+}(g) = 2(g-1) - Ng \left[b_{N} \left(\frac{1}{g} \right) + b_{3N} \left(\frac{1}{g} \right) + b_{5N} \left(\frac{1}{g} \right) + \dots \right]$$

$$= 2(g-1) - g \left[E_{F}^{-} \left(\frac{1}{g} \right) - E_{F}^{+} \left(\frac{1}{g} \right) \right], \qquad g > 1.$$
(3.76)

Combinado as equações (3.76) e (3.73), obtemos

$$E_F^- - E_F^+ = 2(g-1) + \frac{4Ng^{-N}}{\pi} \int_0^1 dt \frac{t^{N-\frac{3}{2}}\sqrt{(1-t)(g^2-t)}}{1-\left(\frac{t}{g}\right)^{2N}}, \qquad g > 1.$$
(3.77)

Podemos obter o gap em g = 1, fazendo o limite de $g \rightarrow 1$ nas equações (3.73) e (3.77)

$$E_{F}^{-} - E_{F}^{+} = \lim_{g \to 1^{\pm}} (E_{F}^{-} - E_{F}^{+})$$

= $\frac{4N}{\pi} \int_{0}^{1} dt \frac{t^{N-\frac{3}{2}}(1-t)}{1-t^{2N}}$
= $2 \tan\left(\frac{\pi}{4N}\right), g = 1.$ (3.78)

Observe que, a partir das equações (3.73), (3.77) e (3.78), temos que a paridade do estado fundamental do Hamiltoniano (3.16) é positiva para g > 0.

Por fim, discutiremos algumas propriedades do gap na fase ferromagnética. Ele cresce monotonicamente de g = 0 para g = 1, o que é discutido no apêndice A. O gap é também limitado pela seguinte inequação:

$$\max\left(g^{N}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{1-g^{2}}}{\sqrt{N}}, g^{N}\frac{4g}{\pi N}\right) \leq E_{F}^{-} - E_{F}^{+} \leq g^{N}2\frac{\sqrt{1-g^{2}}}{\sqrt{N-1}} + g^{N}\frac{\pi g}{2N-1}, \qquad (3.79)$$

aqui a igualdade acontece quando g = 0. Para detalhes a respeito da obtenção de (3.79), veja o apêndice A. A inequação (3.79), foi escrita de maneira conveniente a discutir dois limites de interesse.

Quando o denominado comprimento de correlação na cadeia infinita de Ising [19], $\xi = \frac{1}{|\log g|}$, é menor que o número de spin (tamanho) da cadeia, observamos que o gap é exponencialmente pequeno em N

$$E_F^- - E_F^+ = \mathcal{O}\left(\frac{e^{-N/\xi}}{\sqrt{N}}\right). \tag{3.80}$$

A relação (3.80) advém das desigualdades (3.79) e $\ln(1+x) \le x$ para x > -1. Se $\frac{N}{\xi} > 1$,

então

$$\frac{N}{\xi} > 1$$

$$\Rightarrow N |\ln g| > \frac{N}{2} \ln \left[1 + \frac{1}{N} \right]$$

$$\Rightarrow \ln \left[\frac{N}{N+1} \right] > \ln g^{2}$$

$$\Rightarrow \frac{1-g^{2}}{N} > \frac{g^{2}}{N^{2}}, \qquad 0 < g < 1,$$
(3.81)

o que nos permite escrever a inequação (3.79) como

$$e^{-N/\xi} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{1-g^2}}{\sqrt{N}} \le E_F^- - E_F^+ \le e^{-N/\xi} 2\frac{\sqrt{1-g^2}}{\sqrt{N-1}} + e^{-N/\xi} \frac{\pi g}{2N-1}, \tag{3.82}$$

implicando em (3.80). Observe que $e^{-N/\xi} = g^N$ para 0 < g < 1.

Quando o tamanho do sistema é menor que o comprimento de correlação, temos que

$$E_F^- - E_F^+ = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right). \tag{3.83}$$

Se $\frac{N}{\xi} < 1$, implica em $\frac{1-g^2}{N} < \frac{g^2}{N^2}$, podemos escrever a inequação (3.79) como

$$e^{-N/\xi} \frac{4g}{\pi N} \le E_F^- - E_F^+ \le e^{-N/\xi} 2\frac{\sqrt{1-g^2}}{\sqrt{N-1}} + e^{-N/\xi} \frac{\pi g}{2N-1},$$
(3.84)

o que nos leva à relação (3.83). Mostraremos que $\frac{N}{\xi} < N \ln \left[1 + \frac{1}{N}\right]$ implica em $\frac{1-g^2}{N} < \frac{g^2}{N^2}$.

$$\frac{N}{\xi} < N \ln \left[1 + \frac{1}{N} \right]$$

$$\Rightarrow \frac{N}{2} \ln \left[\frac{N}{N+1} \right] < -N |\ln g|$$

$$\Rightarrow \ln \left[\frac{N}{N+1} \right] < \ln g^{2}$$

$$\Rightarrow \frac{1-g^{2}}{N} < \frac{g^{2}}{N^{2}}, \quad 0 < g < 1.$$
(3.85)

Uma vez que $N \ln \left[1 + \frac{1}{N}\right] < 1$ então $\frac{N}{\xi} < 1$ também implica em $\frac{1-g^2}{N} < \frac{g^2}{N^2}$.

As relações (3.80) e (3.83) mostram quantitativamente o desaparecimento do gap na fase ferromagnética com o aumento do tamanho do sistema, diferentemente da fase paramagnética, onde o gap sempre existirá. Note que o termo 2(g-1) na equação (3.77) faz com que o gap na fase paramagnética seja sempre não nulo.

4 Decoerência de um sistema acoplado a uma cadeia de lsing com campo transverso

Neste capítulo analisaremos a decoerência de um sistema quântico central S, acoplado uniformemente a um segundo sistema R, que, por sua vez, será considerado um sistema "grande", sendo constituído de muitas partes, por isso, denominado "reservatório". Aqui, escolhemos R descrito por um modelo com transição de fase quântica (cadeia de Ising unidimensional com campo transverso). O sistema composto deve ser descrito por



Figura 5 – Representação do modelo: no sistema R, os spins são arranjados na cadeia em forma de anel. O sistema central S é acoplado homogeneamente com os spins devido à simetria espacial do sistema composto R+S.

um Hamiltoniano da forma:

$$H = H_S + H_R + H_I, \tag{4.1}$$

onde H_S é o Hamiltoniano do sistema S, H_R o do reservatório e H_I o da interação entre S e R. Assumindo S caracterizado pelo espaço de Hilbert d-dimensional, $\mathcal{H}_S \simeq \mathbb{C}^d$, onde focamos na dependência temporal dos elementos fora da diagonal $\rho_{ij}^S(t)$ do operador densidade $\rho_S(t)$ em uma base ortonormal, $\{|i\rangle\}$, $\rho_{ij}^S(t) = \langle i|\rho_S(t)|j\rangle$. Frequentemente esses elementos de matriz são associados a efeitos quânticos devido a superposições dos estados dessa base (quando o estado do sistema é a projeção na direção de um vetor, $c_{i_1}|i_1\rangle + c_{i_2}|i_2\rangle \cdots + c_{i_d}|i_d\rangle$, com $c_{i_1}, c_{i_2}, \ldots, c_{i_d} \neq 0$) sendo portanto seu decaimento denominado "decoerência", ou seja, em nosso contexto, decoerência se refere ao processo de redução de um estado puro para um estado misto. Como dito anteriormente, consideramos R como uma cadeia de Ising unidimensional com campo transverso, em que $\mathcal{H}_R \simeq \mathbb{C}^{2^N}$, e o Hamiltoniano H_R assume a forma (3.2).

4.1 Decoerência do sistema S de dois níveis, induzida pela trasição de fase do reservatório

4.1.1 Modelo

Nesta subseção consideramos S o sistema quântico mais simples possível, um sistema de dois níveis, descrito pelo espaço de Hilbert bidimensional $\mathcal{H}_S \simeq \mathbb{C}^2$, com base ortonormal $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ e $\rho_{01}^S(t) = \langle 0|\rho_S(t)|1\rangle$. Sem perda de generalidade, o Hamiltoniano de S, H_S , assume a forma:

$$H_S = \omega |1\rangle \langle 1|, \tag{4.2}$$

onde $|1\rangle$ é o estado excitado de S (o estado fundamental de S será representado por $|0\rangle$) e $\omega \in \mathbb{R}$. Já a interação entre S e R é descrita pelo Hamiltoniano proposto em [8]:

$$H_I = -J\delta|1\rangle\langle 1| \otimes \sum_{n=1}^N \sigma_n^z, \tag{4.3}$$

onde δ é a constate de acoplamento entre S e os N spins do reservatório R. Intuitivamente, caso S se encontre no estado $|0\rangle$, não haverá interação entre os sistemas. Caso esteja no estado $|1\rangle$, S perturba o campo externo g aplicado à cadeia, injetando um campo de magnitude δ .

A decoerência de um sistema quântico S de dois níveis acoplado a um sistema R descrito por um sistema com transição de fase quântica foi extensivamente explorado na literatura [8–11], onde tais estudos fazem uso de uma solução simplificada para o Hamiltoniano da cadeia (supostamente para N "grande") com transição de fase [20,23], por exemplo, para o modelo de Ising o termo proporcional a (1 + P) no Hamiltoniano (3.16) é negligenciado, fazendo assim com que o problema perca sua dependência da paridade do subespaço. Esta simplificação reflete na escolha da quantização do momento k que é deslocado por $\frac{\pi}{N}$, que aparentemente seria irrelevante para N >> 1. Entretanto, recentemente Damski et. al [22] demostraram que a escolha incorreta de k origina erros no cálculo na magnitude da susceptibilidade em torno do ponto crítico. De posse desta informação exploramos a decoerência do sistema fazendo uso da solução exata do Hamiltoniano de Ising quântico, apresentada no capítulo 3.

Na próxima subseção, veremos que é possível relacionar as entradas fora da diagonal do operador densidade, mais precisamente a pureza definida na subseção 2.1.2, com conceito de eco de Loshimidt (EL), módulo ao quadrado do produto interno do estado fundamental de um Hamiltoniano com o estado obtido pela evolução do estado fundamental devido a uma perturbação em um parâmetro do Hamiltoniano. Obteremos uma solução exata para EL e faremos uso desta para caracterizar a decoerência, estudando como seu comportamento depende dos parâmetros do reservatório.

4.1.2 Eco de Loschmidt para o sistema central

O Hamiltoniano do sistema composto será dado por:

$$H = \omega |1\rangle \langle 1| - J \sum_{n=1}^{N} \left[\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + g \sigma_n^z + \delta |1\rangle \langle 1| \otimes \sigma_n^z \right].$$
(4.4)

Inicialmente, em t = 0, consideramos o sistema S completamente desemaranhado com o reservatório R, ou seja, o estado do sistema global em t = 0 deve ser escrito na forma:

$$|\Psi(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle \otimes |\psi_R(0)\rangle, \tag{4.5}$$

onde assumimos S inicialmente preparado em uma superposição genérica do seu estado fundamental e excitado $|\psi_S(0)\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, com $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$, e R no estado fundamental de H_R , $|\psi_R(0)\rangle \equiv |F(0)\rangle$, sendo assim

$$|\Psi(0)\rangle = (c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) \otimes |F(0)\rangle, \qquad (4.6)$$

com evolução temporal, $|\Psi(t)\rangle$, dada por

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi(0)\rangle$$

= $c_0|0\rangle \otimes |F_0(t)\rangle + c_1 e^{-i\omega t}|1\rangle \otimes |F_1(t)\rangle.$ (4.7)

Note que a evolução de $|F(0)\rangle$, é particionada em dois ramos $|F_l(t)\rangle = e^{-iH_l t}|F(0)\rangle$ (l = 0, 1), onde

$$H_{l} = -J \sum_{n=1}^{N} \left[\sigma_{n}^{x} \sigma_{n+1}^{x} + (g+l\delta)\sigma_{n}^{z} \right].$$
(4.8)

A matriz reduzida de S pode ser computada como:

$$\rho_{S}(t) = \operatorname{Tr}_{R}[|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|]
= |c_{0}|^{2}|0\rangle\langle0|\operatorname{Tr}[|F_{0}(t)\rangle\langle F_{0}(t)|] + e^{i\omega t}c_{0}c_{1}^{*}|0\rangle\langle1|\operatorname{Tr}[|F_{0}(t)\rangle\langle F_{1}(t)|]
+ e^{-i\omega t}c_{0}^{*}c_{1}|1\rangle\langle0|\operatorname{Tr}[|F_{1}(t)\rangle\langle F_{0}(t)|] + |c_{1}|^{2}|1\rangle\langle1|\operatorname{Tr}[|F_{1}(t)\rangle\langle F_{1}(t)|]
= |c_{0}|^{2}|0\rangle\langle0| + c_{0}c_{1}^{*}D(t)|0\rangle\langle1| + c_{0}^{*}c_{1}D^{*}(t)|1\rangle\langle0| + |c_{1}|^{2}|1\rangle\langle1| \qquad (4.9)$$

onde

$$D(t) = e^{i\omega t} \langle F_0(t) | F_1(t) \rangle, \qquad (4.10)$$

observe que as entradas na diagonal principal são constantes, e a dependência temporal das entradas fora da diagonal se encontra na função D(t), denominada "fator de decoerência".

Como havia dito no início desta subseção, estamos interessados no estudo do EL (especificamente, no seu decaimento), $L(g,t) = |D(t)|^2$. Seu papel na caracterização da decoerência do sistema central pode ser visto na sua relação com a pureza $\mu_S = \text{Tr}_S [\rho_S^2]$, utilizada como uma medida do quão próximo o estado ρ_S é de um estado puro. Definido

o operador $P_{ij} = |i\rangle\langle j|$, podemos computar a pureza μ , do estado $\rho = \sum_{i,j} \rho_{ij} P_{ij}$, com $\rho_{ij} \in \mathbb{C}$, como

$$\mu = \operatorname{Tr} \left[\rho^{2} \right]$$

$$= \sum_{k} \sum_{i',j'} \sum_{i,j} \rho_{ij} \rho^{*}_{i'j'} \langle k | P_{ij} P^{\dagger}_{i'j'} | k \rangle$$

$$= \sum_{i',j'} \sum_{i,j} \rho_{ij} \rho^{*}_{i'j'} \delta_{ii'} \delta_{jj'}$$

$$= \sum_{i,j} |\rho_{ij}|^{2}. \qquad (4.11)$$

Para o sistema *S* temos que, $\rho_S = \sum_{i=0}^{1} \sum_{j=0}^{1} \rho_{ij}^S P_{ij}$, onde $\rho_{00}^S = |c_0|^2$, $\rho_{11}^S = |c_1|^2$ e $\rho_{01}^S = \rho_{10}^{S*} = c_0 c_1^* D(t)$, então podemos escrever:

$$\mu_S = |c_0|^4 + |c_1|^4 + 2|c_0c_1|^2|D(t)|^2$$

= 1 - 2|c_0c_1|^2[1 - L(g,t)] (4.12)

onde

$$L(g,t) = |\langle F(0)|e^{-iH_0t}e^{-iH_1t}|F(0)\rangle|^2$$

= $|\langle F_0(0)|e^{-iH_0t}e^{-iH_1t}|F_0(0)\rangle|^2$
= $|\langle F_0(0)|e^{-iH_1t}|F_0(0)\rangle|^2$. (4.13)

Na segunda igualdade utilizamos $|F(0)\rangle \equiv |F_0(0)\rangle$, uma vez que $H_0 \equiv H_S$.

Deduziremos uma expressão para o EL, L(g,t). Iniciamos escrevendo a forma diagonal do Hamiltoniano (4.8), H_l , fazendo uso dos resultados obtidos na seção (3.3), onde assumimos a modificação $g \to g + l\delta$ nestes. Supomos o número de sítios N par, e como estamos interessados no estado fundamental de H_l , nos restringimos ao subespaço de paridade positiva. Portanto, adotando os resultados da subseção (3.3.1). A forma diagonal de H_l , em termos dos operadores fermiônicos η_k^l , é dada pelas equações (3.36), (3.33), (3.28) e (3.34), considerando $g \to g + l\delta$,

$$H_l = \sum_k \epsilon_k^l \left(\eta_k^{l\dagger} \eta_k^l - \frac{1}{2} \right), \qquad (4.14)$$

 $\operatorname{com} k = \pm \frac{1}{2} \frac{2\pi}{Na}, \dots, \pm \left(\frac{N}{2} - \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi}{Na}, \text{ o espectro de energia na equação (4.14) é composto por}$ $\epsilon_k^l = 2J\sqrt{\left[(g + l\delta) - \cos(ka)\right]^2 + \sin^2(ka)}.$ (4.15)

A transformação de Bogoliubov, em que introduz-se operadores fermiônicos η_k^l , pode ser escrita na forma:

$$\eta_{k}^{l} = \cos\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right)c_{k} - i\sin\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right)c_{-k}^{\dagger},$$

$$\eta_{-k}^{l\dagger} = \cos\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right)c_{-k}^{\dagger} - i\sin\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right)c_{k},$$
(4.16)

onde

$$\theta_k = \arctan\left[\frac{\sin(ka)}{(g+l\delta) - \cos(ka)}\right].$$
(4.17)

Já a transformação inversa de Bogoliubov é dada por:

$$c_{k} = \cos\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right)\eta_{k}^{l} + i\sin\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right)\eta_{-k}^{l\dagger},$$

$$c_{-k}^{\dagger} = \cos\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right)\eta_{-k}^{l\dagger} + i\sin\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right)\eta_{k}^{l}.$$
(4.18)

Note que um caminho para obtenção da solução de (4.13) é escrever o estado fundamental de H_0 , $|F_0\rangle$, em termos dos autoestados H_1 . Sendo assim, nos é conveniente estabelecer uma relação entre os operadores $\eta_k^0 e \eta_k^1$. Este tipo de vínculo, que relaciona duas "famílias" de operadores fermiônicos, também será requisitado na discussão da próxima seção, sendo assim, nos é conveniente estabelecer uma relação mais geral, ou seja, entre dois operadores fermiônicos $\eta_k^l e \eta_k^{l'}$, com l e l' arbitrários. Substituindo a equação (4.18), fixada em l, na equação (4.16), definida em l', temos

$$\eta_{k}^{l} = \cos\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{\theta_{k}^{l'}}{2}\right)\eta_{k}^{l'} + i\sin\left(\frac{\theta_{k}^{l'}}{2}\right)\eta_{-k}^{l'\dagger}\right] -i\sin\left(\frac{\theta_{k}^{l}}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{\theta_{k}^{l'}}{2}\right)\eta_{-k}^{l'\dagger} + i\sin\left(\frac{\theta_{k}^{l'}}{2}\right)\eta_{k}^{l'}\right], = \cos\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right)\eta_{k}^{l'} - i\sin\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right)\eta_{-k}^{l'\dagger},$$

$$(4.19)$$

sendo

$$\alpha_k^{l,l'} = \frac{\theta_k^l - \theta_k^{l'}}{2}.$$
(4.20)

Feito isso, estabelecemos uma relação entre $|F_l\rangle$ e os autoestados de $H_{l'}$, de forma análoga a (3.39), através do "ansatz":

$$|F_l\rangle = \prod_{k>0} \eta_k^l \eta_{-k}^l |F_{l'}\rangle, \qquad (4.21)$$

onde $|F_{l'}\rangle$ satisfaz $\eta_k^{l'}|F_{l'}\rangle = 0 \ \forall k$. Lembrando que das relações de anticomutação dos operadores fermiônicos temos que $\eta_k^l \eta_k^l \equiv 0 \ \forall k$, portanto $|F_l\rangle$ (4.21) é o estado fundamental de H_l definindo pela relação (4.14), uma vez que obedece $\eta_k^l|F_l\rangle = 0 \ \forall k$.

Fazendo uso da relação (4.19), podemos computar:

$$\eta_{k}^{l}\eta_{-k}^{l}|F_{l'}\rangle = \left[\cos\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right)\eta_{k}^{l'}-i\sin\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right)\eta_{-k}^{l'\dagger}\right] \times \left[\cos\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right)\eta_{-k}^{l'}+i\sin\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right)\eta_{k}^{l'\dagger}\right]|F_{l'}\rangle \\ = \left[i\cos\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right)\sin\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right)-\sin^{2}\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right)\eta_{k}^{l'\dagger}\eta_{-k}^{l'\dagger}\right]|F_{l'}\rangle.$$

$$(4.22)$$

Impondo a condição de normalização $\langle F_l | F_l \rangle = 1$, temos que:

$$|F_l\rangle = \prod_{k>0} \left[\cos\left(\alpha_k^{l,l'}\right) + i \sin\left(\alpha_k^{l,l'}\right) \eta_k^{l'\dagger} \eta_{-k}^{l'\dagger} \right] |F_{l'}\rangle.$$
(4.23)

Retomando o caso específico, l = 0 e l' = 1, da equação (4.23), temos que

$$|F_0\rangle = \prod_{k>0} \left[\cos\left(\alpha_k\right) + i\sin\left(\alpha_k\right) \eta_k^{1\dagger} \eta_{-k}^{1\dagger} \right] |F_1\rangle, \qquad (4.24)$$

onde assumimos a notação $\alpha_k^{0,1} = \alpha_k$. A partir da relação (4.24), obtemos

$$\langle F_{0}(t)|e^{-iH_{1}t}|F_{0}(t)\rangle = \prod_{k>0} \left\{ \langle F_{1}|\left[\cos\left(\alpha_{k}\right)-i\sin\left(\alpha_{k}\right)\eta_{-k}^{1}\eta_{k}^{1}\right]e^{-i\epsilon_{k}^{1}\left(\eta_{k}^{1\dagger}\eta_{k}^{1}+\eta_{-k}^{1\dagger}\eta_{-k}^{-1}\right)t} \times \left[\cos\left(\alpha_{k}\right)+i\sin\left(\alpha_{k}\right)\eta_{k}^{1\dagger}\eta_{-k}^{1\dagger}\right]|F_{1}\rangle \right\}$$

$$= \prod_{k>0} \left[\cos^{2}\left(\alpha_{k}\right)e^{i\epsilon_{k}^{1}t}+\sin^{2}\left(\alpha_{k}\right)e^{-i\epsilon_{k}^{1}t}\right]$$

$$= \prod_{k>0} \left[\cos\left(\epsilon_{k}^{1}t\right)+i\cos\left(2\alpha_{k}\right)\sin\left(\epsilon_{k}^{1}t\right)\right].$$

$$(4.25)$$

Por fim, substituindo (4.25) na equação (4.13), podemos escrever

$$L(g,t) = \prod_{k>0} \left[\cos^2\left(\epsilon_k^1 t\right) + \cos^2\left(2\alpha_k\right) \sin^2\left(\epsilon_k^1 t\right) \right]$$

$$= \prod_{k>0} L_k = \prod_{k>0} \left[1 - \sin^2\left(2\alpha_k\right) \sin^2\left(\epsilon_k^1 t\right) \right].$$
(4.26)

Antes de estudarmos numericamente a expressão (4.26), iremos fazer uma breve análise heurística desta, conforme Quan et al. [8]. Uma vez que $0 \le L_k \le 1$, então, para um momento de corte k_c , que define um produto parcial de L(g, t), podemos afirmar que:

$$L_c(g,t) = \prod_{k>0}^{k_c} L_k \ge L(g,t).$$
(4.27)

Nada nos impede de escolhermos k_c que limite o produto (4.27) a k's "pequenos" o suficiente tal que as aproximações abaixo sejam válidas:

$$\epsilon_{k}^{1} = 2J\sqrt{[(g+\delta) - \cos(ka)]^{2} + \sin^{2}(ka)}$$

= $2J\sqrt{1 + (g+\delta)^{2} - 2(g+\delta)}\cos(ka)$
 $\approx 2J\sqrt{1 + (g+\delta)^{2} - 2(g+\delta)}$
 $\approx 2J|1 - g - \delta|,$ (4.28)

$$\sin^{2}(2\alpha_{k}) = \sin^{2}\left\{\arctan\left[\frac{\sin(ka)}{g-\cos(ka)}\right] - \arctan\left[\frac{\sin(ka)}{(g+\delta)-\cos(ka)}\right]\right\}$$
$$\approx \sin^{2}\left\{\arctan\left[\frac{ka}{g-1}\right] - \arctan\left[\frac{ka}{(g+\delta)-1}\right]\right\}$$
$$\approx \sin^{2}\left[\frac{ka}{g-1} - \frac{ka}{(g+\delta)-1}\right]$$
$$\approx \frac{(\delta ka)^{2}}{(1-g)^{2}(1-g-\delta)^{2}}.$$
(4.29)

42

Definindo a soma $S(g,t) = \ln L_c(g,t) = -\sum_{k>0}^{k_c} |\ln L_k|$, temos

$$S(g,t) \approx -\sum_{k>0}^{k_c} \left| \ln \left[1 - \frac{(\delta ka)^2 \sin^2 (2J|1 - g - \delta|)}{(1 - g)^2 (1 - g - \delta)^2} \right] \right|$$

$$\approx -\frac{(\delta a)^2 \sin^2 (2J|1 - g - \delta|)}{(1 - g)^2 (1 - g - \delta)^2} \sum_{k>0}^{k_c} k^2$$

$$\approx -\frac{\delta^2 \sin^2 (2J|1 - g - \delta|)}{(1 - g)^2 (1 - g - \delta)^2} \frac{4\pi^2}{N^2} \sum_{j=1}^{N_c/2} \left(j - \frac{1}{2} \right)^2$$

$$\approx -\frac{\delta^2 \sin^2 (2J|1 - g - \delta|)}{(1 - g)^2 (1 - g - \delta)^2} f(k_c), \qquad (4.30)$$

onde $f(k_c) = \frac{\pi^2 N_c(N_c-1)(N_c+1)}{6N^2}$ e $N_c = \frac{Nak_c}{2} + 1$. Para $g \to g_c = 1$, δ pequeno e fixado t, tomando a função exponencial na equação (4.30), podemos escrever:

$$L_c(g,t) = e^{-\gamma t},\tag{4.31}$$

sendo $\gamma = \frac{4J\delta^2 f(k_c)}{(1-g)^2}$. Uma vez que $L_c(g,t) \ge L(g,t)$, a equação (4.31) indica que para N suficientemente grande, porém finito, e g na proximidade do ponto crítico, o EL desaparece exponencialmente com o tempo.

Em seguida apresentaremos alguns resultados numéricos da expressão exata do EL (4.26).

Na figura (6) temos a representação tridimensional de L(g,t) como função de $g \in t$, mostrando a existência de um vale em torno dos pontos $g = g_c = 1$ e $g = g_c - \delta = 0, 9$. Isso demostra que perto do ponto crítico do reservatório, o EL é extremamente sensível a perturbação sobre o reservatório.

A figura (7) apresenta o comportamento de L(g,t) no ponto $g = 1 - \delta = 0, 9$, para diferentes valores de N, onde o EL decai e "renasce" no decorrer do tempo, com o período de renascimento proporcional ao tamanho de R.

Já a figura (8) mostra que, com o decréscimo de δ , o LE decai se aumentarmos N. Comparando a figura (8), onde $\delta = 0, 01, N = 500, 1000, 1500, 2000$ e 2500, com a figura (7), onde $\delta = 0, 1, N = 50, 100, 150, 200$ e 250, nota-se que as duas apresentam quase o mesmo comportamento, indicando uma "quase invariância" sobre a transformação de escala $\delta \to \delta/\alpha, N \to N\alpha$ e $t \to t\alpha$ do EL nas proximidades do ponto crítico.

Finalmente, como havíamos dito no início do capítulo, encontram-se na literatura trabalhos que avaliaram o produto (4.26), com k deslocados por $\frac{\pi}{N}$, por exemplo, a referência [8]. Nossos resultados numéricos indicam que o uso de k deslocado leva a erros quando o campo efetivo $g + \delta$ sobre a cadeia perturbada está nas próximidades do ponto crítico $g_c = 1$. As figuras (9) e (10) apresentam L(t) no ponto $g = 1 - \delta$ para diferentes valores de N e k deslocado por $\frac{\pi}{N}$, resultados que podem ser encontrados na referência [8]. Comparando (9) e (10) com (7) e (8) observamos que o EL com k deslocado possui valores

de mínimo visivelmente maiores e o período de renascimento a metade do EL com uso correto de k. Entretanto para $g + \delta$ afastado de g_c , o EL avaliado com k deslocado se mostra um boa aproximação como indica a semelhança entre a figura (11), onde o EL avaliado sem aproximação, e (12), onde o EL é avaliado com k deslocado.



Figura 6 – Representação tridimensional de L(g,t) como função de $g \in t$ para o reservatório com N = 150. O vale em torno dos pontos $g_c = 1 \in g = 0,9$ indica que o decaimento de L(g,t) é mais abrupto nas proximidades da transição de fase quântica de R.

4.2 Decoerência do sistema central para s arbitrário

Nesta subseção assumimos S um sistema quântico de spin s arbitrírio, com $\mathcal{H}_S \simeq \mathbb{C}^{2s+1}$, base ortonormal $\{|s,l\rangle\}$ onde l = -s, -s+1, ..., s-1, s, de forma que os elementos de matriz do operador densidade são $\rho_{ll'}^S(t) = \langle s, l | \rho_S(t) | s, l' \rangle$. Consideramos o Hamiltoniano de S nulo, $H_S = 0$. Como no caso do sistema de dois níveis, a utilização deste introduziria termos da forma $e^{il\omega t}$ nos elementos fora da diagonal da matriz densidade ρ_S . Como estamos interessados no estudo da pureza (4.11), tomaremos o módulo destes elementos. Sendo assim iremos negligencia-los desde já, sem perda de generalidade para a nossa discussão. Descrevemos a interação entre $S \in R$ pelo Hamiltoniano:

$$H_I = \delta S_z \otimes \sum_{n=1}^N \sigma_n^z. \tag{4.32}$$

onde S_z é o operador de spin na direção z. Intuitivamente, essa interação diz que autoestados de S_z , com autovalor l, aplicarão um campo de magnitude $l\delta$ em toda cadeia.



Figura 7 – L(t) como função de t para o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250, em $g = 1 - \delta = 0, 9$, mostrando que o período de renascimento de EL é proporcional ao tamanho de reservatório.



Figura 8 – L(t) como função de t
 para o reservatório com N = 500, 1000, 1500, 2000 e 2500, em
 $g = 1 - \delta = 0, 99.$

Antes de trabalharmos com S de spin s arbitrário, estudamos S de spin $\frac{1}{2}$, sistema de dois níveis análogo ao descrito anteriormente. Entretanto veremos que a dependência temporal das entradas fora da diagonal será dada pelo produto interno entre dois estados obtidos da evolução temporal do estado fundamental de um Hamiltoniano, devido à perturbação em um parâmetro deste, diferente do caso anterior, que foi dada pelo produto interno do estado fundamental de um Hamiltoniano com um estado obtido da evolução do



Figura 9 – L(t) como função de t para o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250,em $g = 1 - \delta = 0, 9$, onde k está deslocado por $\frac{\pi}{N}$. Os valores de mínimo do EL são maiores e o período de renascimento é a metade em relação ao EL da solução exata (figura 7).

mesmo devido a uma perturbação em um parâmetro do Hamiltoniano.



Figura 10 – L(t) como função de t para o reservatório com N = 500, 1000, 1500, 2000 e 2500, em $g = 1 - \delta = 0, 99$, com k deslocado por $\frac{\pi}{N}$.



Figura 11 – L(t) como função de t para o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250,em $g = 0, 7 e \delta = 0,077$, usando a solução exata.



Figura 12 – L(t) como função de t para o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250,em $g = 0, 7 e \delta = 0,077$, com k deslocado por $\frac{\pi}{N}$.

4.2.1 Spin $\frac{1}{2}$

O Hamiltoniano do sistema composto pode ser escrito como:

$$H = -J\sum_{n}^{N} \left[\sigma_{n}^{x} \sigma_{n+1}^{x} + g\sigma_{n}^{z} + \delta S_{z} \otimes \sigma_{n}^{z} \right].$$

$$(4.33)$$

Consideramos S inicialmente preparado em uma superposição do tipo, $|\psi_S(0)\rangle = c_{\downarrow}|\downarrow\rangle + c_{\uparrow}|\uparrow\rangle$, com $|c_{\downarrow}|^2 + |c_{\uparrow}|^2 = 1$, onde assumimos a notação $\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = |\uparrow\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = |\downarrow\rangle$

e R no estado fundamental de H_R , $|\psi_R(0)\rangle \equiv |F(0)\rangle$. Sendo assim, o estado inicial do sistema composto, $|\Psi(0)\rangle$, será dado por:

$$|\Psi(0)\rangle = (c_{\downarrow}|\downarrow\rangle + c_{\uparrow}|\uparrow\rangle) \otimes |F(0)\rangle.$$
(4.34)

A partir da equação (2.5) temos que a evolução temporal de $|\Psi(0)\rangle$ assume a forma:

$$|\Psi(t)\rangle = c_{\downarrow}|\downarrow\rangle \otimes |F_{-1/2}(t)\rangle + c_{\uparrow}|\uparrow\rangle \otimes |F_{1/2}(t)\rangle, \qquad (4.35)$$

sendo $|F_l(t)\rangle = e^{-iH_lt}|F(0)\rangle$, $l = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$, e H_j , dado pela equação (4.8).

Computando a matriz densidade reduzida de S, temos:

$$\rho_{S}(t) = \operatorname{Tr}_{R}\{|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|\}$$

$$= |c_{\downarrow}|^{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|\operatorname{Tr}\{|F_{-1/2}(t)\rangle\langle F_{-1/2}(t)|\} + c_{\downarrow}c_{\uparrow}^{*}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\operatorname{Tr}\{|F_{-1/2}(t)\rangle\langle F_{1/2}(t)|\}\}$$

$$+ c_{\downarrow}^{*}c_{\uparrow}|\uparrow\rangle\langle\downarrow|\operatorname{Tr}\{|F_{1/2}(t)\rangle\langle F_{-1/2}(t)|\} + |c_{\uparrow}|^{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\operatorname{Tr}\{|F_{1/2}(t)\rangle\langle F_{1/2}(t)|\}$$

$$= |c_{\downarrow}|^{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| + c_{\downarrow}c_{\uparrow}^{*}r(t)|\downarrow\rangle\langle\uparrow| + c_{\downarrow}^{*}c_{\uparrow}r^{*}(t)|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |c_{\uparrow}|^{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow|, \quad (4.36)$$

onde

$$r(t) = \langle F_{-1/2}(t) | F_{1/2}(t) \rangle$$

= $\langle F(0) | e^{iH_{-1/2}t} e^{-iH_{1/2}t} | F(0) \rangle,$ (4.37)

é o fator de decoerência. Para o sistema central de spin $\frac{1}{2}$ seu módulo ao quadrado, $|r(t)|^2$, será utilizado para descrever a decoerência, assim como na subseção anterior. Com intuito de calcular (4.37) faremos uso de alguns resultados obtidos na subseção (4.1.2), as equações (4.14-4.23). Estendendo para um fator de decoerência mais geral, estamos interessados em computar:

$$r_{l',l} = \langle F_0 | e^{iH_{l'}^{\dagger}t} e^{-iH_l t} | F_0 \rangle.$$
(4.38)

Combinando as relações (4.23) e (4.38), obtemos:

$$r_{l',l} = \prod_{k>0} \left\{ \langle F_{l'} | \left[\cos\left(\alpha_k^{0,l'}\right) e^{-i\epsilon_k^{l'}t} - i\sin\left(\alpha_k^{0,l'}\right) e^{i\epsilon_k^{l'}t} \eta_{-k}^{l'} \eta_k^{l'} \right] \times \left[\cos\left(\alpha_k^{0,l}\right) e^{i\epsilon_k^{l}t} + i\sin\left(\alpha_k^{0,l}\right) e^{-i\epsilon_k^{l}t} \eta_k^{l\dagger} \eta_{-k}^{l\dagger} \right] |F_l\rangle \right\}.$$

$$(4.39)$$

Determinando cada produto interno de (4.39) separadamente, temos:

$$\langle F_{l'}|F_l \rangle = \langle F_{l'}| \left[\cos\left(\alpha_k^{l,l'}\right) + i \sin\left(\alpha_k^{l,l'}\right) \eta_k^{l'\dagger} \eta_{-k}^{l'\dagger} \right] |F_{l'} \rangle$$

= $\cos\left(\alpha_k^{l,l'}\right),$ (4.40)

$$\langle F_{l'} | \eta_k^{l\dagger} \eta_{-k}^{l\dagger} | F_l \rangle = \langle F_l | \left[\cos \left(\alpha_k^{l',l} \right) - i \sin \left(\alpha_k^{l',l} \right) \eta_{-k}^l \eta_k^l \right] \eta_k^{l\dagger} \eta_{-k}^{l\dagger} | F_l \rangle$$

$$= -i \sin \left(\alpha_k^{l',l} \right) = i \sin \left(\alpha_k^{l,l'} \right),$$

$$(4.41)$$

$$\langle F_{l'} | \eta_{-k}^{l'} \eta_{k}^{l'} | F_{l} \rangle = \langle F_{l'} | \eta_{-k}^{l'} \eta_{k}^{l'} \left[\cos \left(\alpha_{k}^{l,l'} \right) + i \sin \left(\alpha_{k}^{l,l'} \right) \eta_{k}^{l'\dagger} \eta_{-k}^{l'\dagger} \right] | F_{l'} \rangle$$

$$= i \sin \left(\alpha_{k}^{l,l'} \right),$$

$$\langle F_{l'} | \eta_{-k}^{l'} \eta_{k}^{l\dagger} \eta_{k}^{l\dagger} \eta_{-k}^{l\dagger} | F_{l} \rangle = \langle F_{l'} | \left[\cos \left(\alpha_{k}^{l',l} \right) \eta_{k}^{l} + i \sin \left(\alpha_{k}^{l',l} \right) \eta_{-k}^{l\dagger} \right]$$

$$\times \left[\cos \left(\alpha_{k}^{l',l} \right) \eta_{-k}^{l} - i \sin \left(\alpha_{k}^{l',l} \right) \eta_{k}^{l\dagger} \right] \eta_{k}^{l\dagger} \eta_{-k}^{l\dagger} | F_{l} \rangle$$

$$= \cos^{2} \left(\alpha_{k}^{l,l'} \right) \langle F_{l'} | F_{l} \rangle - i \sin \left(\alpha_{k}^{l,l'} \right) \cos \left(\alpha_{k}^{l,l'} \right) \langle F_{l'} | \eta_{-k}^{l'} \eta_{k}^{l'} | F_{l} \rangle$$

$$= \cos \left(\alpha_{k}^{l,l'} \right).$$

$$(4.43)$$

Substituindo as equações (4.40-4.43) na equação (4.39) obtemos:

$$\begin{aligned} r_{l',l} &= \prod_{k>0} \left[\cos\left(\alpha_{k}^{0,l}\right) \cos\left(\alpha_{k}^{0,l'}\right) \cos\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right) e^{i(\epsilon_{k}^{l} - \epsilon_{k}^{l'})t} \right. \\ &+ \sin\left(\alpha_{k}^{0,l}\right) \sin\left(\alpha_{k}^{0,l'}\right) \cos\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right) e^{-i(\epsilon_{k}^{l} - \epsilon_{k}^{l'})t} \\ &+ \cos\left(\alpha_{k}^{0,l}\right) \sin\left(\alpha_{k}^{0,l'}\right) \sin\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right) e^{i(\epsilon_{k}^{l} + \epsilon_{k}^{l'})t} \right] \\ &- \cos\left(\alpha_{k}^{0,l'}\right) \sin\left(\alpha_{k}^{0,l}\right) \sin\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right) e^{-i(\epsilon_{k}^{l} + \epsilon_{k}^{l'})t} \right] \\ &= \prod_{k>0} \left\{ \cos\left[(\epsilon_{k}^{l} - \epsilon_{k}^{l'})t\right] \cos^{2}\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right) + \cos\left[(\epsilon_{k}^{l} + \epsilon_{k}^{l'})t\right] \sin^{2}\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right) \\ &+ i \sin\left[(\epsilon_{k}^{l} - \epsilon_{k}^{l'})t\right] \cos\left(\alpha_{k}^{0,l} + \alpha_{k}^{0,l'}\right) \cos\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right) \\ &+ i \sin\left[(\epsilon_{k}^{l} + \epsilon_{k}^{l'})t\right] \sin\left(\alpha_{k}^{0,l} + \alpha_{k}^{0,l'}\right) \sin\left(\alpha_{k}^{l,l'}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Seguem alguns resultados numéricos da expressão exata de $|r(g,t)|^2$, utilizando (4.44), para $l' = -\frac{1}{2}$ e $l = \frac{1}{2}$.

Na figura (13) temos a representação tridimensional de $|r(g,t)|^2$ como função de $g \in t$, onde temos um vale em torno dos pontos $g = g_c - \frac{1}{2}\delta = 0,9$ e $g = g_c + \frac{1}{2}\delta = 1, 1,$ mostrando que, nas proximidades do ponto crítico do reservatório, o fator de decoerência $|r(t)|^2$ é muito sensível a perturbações sobre o reservatório. Já as figuras (14) e (16) apresentam o comportamento de $|r(t)|^2$ nos pontos $g = 1 - \frac{1}{2}\delta = 0,9$ e $g = 1 + \frac{1}{2}\delta = 1, 1,$ para diferentes valores de N, onde $|r(t)|^2$ decai e "renasce" no decorrer do tempo, com o período de renascimento proporcional ao tamanho de R.

Na próxima subseção investigaremos o caso geral (4.32), onde estamos interessados se a escolha de s afeta na transição quântica-clássica do sistema. Especificamente, se fixarmos um tempo onde o sistema S com um valor arbitrário de spin s se encontra emaranhado com o reservatório R, queremos saber se S com spins s maiores também será emaranhado com R.



Figura 13 – Representação tridimensional do módulo ao quadrado do fator de decoerência $|r(g,t)|^2$ como função de $g \in t$ para o reservatório com N = 150. O vale em torno dos pontos $g = 0, 9 \in g = 1, 1$ indica que o decaimento de $|r(g,t)|^2$ é mais abrupto nas proximidades da transição de fase quântica de R.

4.2.2 Spin *s*

Iremos fazer um estudo preliminar sobre a existência ou não existência de um limite clássico quando $s \to \infty$, no qual S não se emaranha com R, comportando-se como uma fonte de campo clássica. Uma ideia similar foi desenvolvida para o sistema de um átomo de dois níveis interagindo com um modo do campo inicialmente preparado em um estado coerente com número médio de fótons grande [24].

Definimos o estado inicial de S, preparado como um superposição dos autoestados do operador S_z :

$$|\psi_S(0)\rangle = \sum_{l=-s}^{s} c_l |s,l\rangle.$$
(4.45)

Assim como nos casos anteriores R é preparado no estado fundamental de H_R , $|\psi_R(0)\rangle \equiv |F(0)\rangle$. A evolução do estado do sistema composto é regida pelo Hamiltoniano (4.33), sendo assim

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{l=-s}^{s} c_l |s,l\rangle \otimes |F_l(t)\rangle.$$
(4.46)

onde $|F_l(t)\rangle = e^{-iH_l t}|F(0)\rangle$ e H_j é dado pela equação (4.8).



Figura 14 – $|r(g,t)|^2$ como função de t para o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250, em $g = 1 - \delta = 0, 9$, mostrando que o período de renascimento de $|r(t)|^2$ é proporcional ao tamanho de reservatório.



Figura 15 – $|r(g,t)|^2$ como função de tpara o reservatório com $N=50,\,100,\,150,\,200$ e $250,\,{\rm em}~g=1+\delta=1,1.$

Utilizando as equações (2.20) e (4.46), obtemos:

$$\rho_{S}(t) = \operatorname{Tr}_{R}\{|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|\}$$

$$= \sum_{l=-s}^{s} \sum_{l'=-s}^{s} c_{l}c_{l'}^{*}|s,l\rangle\langle s,l'|\operatorname{Tr}\{|F_{l}(t)\rangle\langle F_{l'}(t)|\}$$

$$= \sum_{l=-s}^{s} \sum_{l'=-s}^{s} c_{l}c_{l'}^{*}r_{ll'}(t)|s,l\rangle\langle s,l'| \qquad (4.47)$$

onde

$$r_{ll'}(t) = \langle F_l(t) | F_{l'}(t) \rangle, \qquad (4.48)$$

Por fim, podemos escrever a pureza de S como:

$$\mu_S = \sum_{l=-s}^{s} \sum_{l'=-s}^{s} |c_l c_{l'}^*|^2 |r_{ll'}(t)|^2.$$
(4.49)

Com o espaço de Hilbert do sistema S podendo ter dimensão d > 2, descreveremos sua decoerência através da pureza, uma vez que a mesma poderá ser composta por somas de diferentes fatores de decoerência do tipo (4.44), diferente do caso d = 2 onde tínhamos apenas um fator de decoerência e o estudo deste era suficiente. Dito isso, sabemos que a pureza depende do estado inicial do sistema. Como primeira abordagem assumimos na superposição (4.46) todos autoestados de S_z com igual peso, ou seja, $c_l = \frac{1}{\sqrt{2s+1}}, \forall l$. Assim,

$$\mu_S = \frac{1}{(2s+1)^2} \sum_{l=-s}^{s} \sum_{l'=-s}^{s} |r_{ll'}(t)|^2.$$
(4.50)

Antes de estudarmos a pureza como função do spin s, observaremos alguns resultados numéricos que nos auxiliaram na escolha do tempo que será fixado. Note que é interessante escolhermos um tempo antes do renascimento da pureza para evitarmos avaliá-la em um pico. Sabendo disso examinaremos seu comportamento variando no tempo para mais dois valores s, s = 5 e s = 50, lembrando que na subseção anterior avaliamos o comportamento do fator de decoerência para $s = \frac{1}{2}$.

As figuras (16) e (17) apresentam o comportamento de $\mu(t)$ para S com s = 5e s = 50, para diferentes valores de N do reservatório em g = 0, 9. A constante de acoplamento, $\delta = 0, 1$, é escolhida de modo que a perturbação máxima de S sobre o reservatória seja a mesma para qualquer valor de spin s. As figuras dão indícios que o aumento de s não afetará de maneira significativa o emaranhamento entre S e R, pois apresentam magnitudes próximas apesar da grande diferença entre os spins. Fato reforçado pelos resultados apresentados nas figuras (18) e (19), onde fixados os instantes de tempos t = 1 e t = 15, inferiores ao período de ressurgimento da pureza para N = 50, consequentemente inferior também para todos os outros valores de N estudados. A pureza variando com s se estabiliza sem assíntota 1.

Uma vez que não conseguimos alcançar o limite clássico para S inicialmente preparado como uma superposição de todos autoestados de S_z com igual peso, agora iremos considerar o estado inicial de S como um estado coerente de spin definido na subseção (2.3),

$$|\theta,\varphi\rangle = \sum_{l=-s}^{s} \frac{1}{(1+|\tau|^2)^s} {2s \choose s+l}^{\frac{1}{2}} \tau^{s+l} |s,l\rangle,$$
(4.51)

onde $\tau = e^{-i\varphi} \tan \frac{\theta}{2}$. Análogamente ao estado coerente do oscilador harmônico, estes estados são frequentemente utilizados em estudos associados a limite clássico, por exemplo,



Figura 16 – $|r(g,t)|^2$ como função de t
 para o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250, em
 $g = 1 + \delta = 1, 1.$



Figura 17 – $\mu(t)$ como função de t para s = 50 e o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250, em g = 0, 9 e $\delta = 0, 1/s$.

na obtenção de um Hamiltoniano clássico a partir de um Hamiltoniano quântico [25]. Comparando as relações (4.51), (4.45) e utilizando (4.49) temos que:

$$\mu_S = \frac{1}{(1+|\tau|^2)^{4s}} \sum_{l=-s}^s \sum_{l'=-s}^s \binom{2s}{s+l} \binom{2s}{s+l'} |\tau|^{2(s+l)} |\tau|^{2(s+l')} |r_{ll'}(t)|^2, \tag{4.52}$$

Antes de prosseguir com a análise numérica da pureza, nos é interessante analisar o comportamento assintótico do estado coerente de spin, para $|\tau| >> 1$ tal que $\theta \approx \pi$



Figura 18 – $\mu(s)$ como função de s para t = 1 e o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250, em g = 0, 9 e $\delta = 0, 1/s$.



Figura 19 – $\mu(s)$ como função de s para t = 15 e o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250, em g = 0, 9 e $\delta = 0, 1/s$.

ou $|\tau| \ll 1$ tal que $\theta \approx 0$. Restringindo-nos a $\tau \in \mathbb{R}$, para τ suficientemente grande, $|\theta, \varphi\rangle = |s, s\rangle$. Já para τ suficientemente pequeno, $|\theta, \varphi\rangle = |s, -s\rangle$. Nestes casos mesmo após a evolução do sistema pelo Hamiltoniano (4.33), o sistema *S* não se emaranha com *R*, restando então a escolha de valores intermediários para τ . Aqui consideramos $\tau = 1$.

Dos resultados numéricos observamos que, diferentemente do caso anterior, já nas duas primeira figuras, (20) e (21), temos a intuição que o aumento de s nos leva a um

estado para S muito próximo de um estado puro. Note que utilizamos s = 5 e s = 50 assim como no caso anterior, e já para s = 50 temos a pureza nas proximidades de 1. As figuras (22) e (23) deixam mais claro que, nos instantes de tempos t = 1 e t = 15, a pureza variando com s converge para 1 para s suficientemente grande.



Figura 20 – $\mu(t)$ como função de t para s = 5, $\tau = 1$ e o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250, em g = 0, 9 e $\delta = 0, 1/s$.



Figura 21 – $\mu(t)$ como função de t para s = 50, $\tau = 1$ e o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250, em g = 0, 9 e $\delta = 0, 1/s$.



Figura 22 – $\mu(s)$ como função de spara t=1, $\tau=1$ e o reservatório com $N=50,\,100,\,150,\,200$ e 250, em g=0,9 e $\delta=0,1/s.$



Figura 23 – $\mu(s)$ como função de s para t = 15, $\tau = 1$ e o reservatório com N = 50, 100, 150, 200 e 250, em g = 0, 9 e $\delta = 0, 1/s$.

5 Conclusão

Neste trabalho investigamos um sistema composto consistindo de um sistema quântico S acoplado uniformemente a N spins de uma cadeia R descrita por um modelo com transição de fase quântica, denominado modelo de Ising quântico com campo transverso, onde estávamos interessados na decoerência do sistema S induzida pela cadeia de spins.

Revisamos a abordagem usual para diagonalização do Hamiltoniano de Ising quântico, realizada através das transformações de Jordan-Wigner, Fourier e Bogouliubov. Computamos e estudamos uma expressão para o gap de energia entre o estado fundamental do subespaço de paridade positiva e negativa da cadeia de Ising. Vimos que para valores positivos do campo magnético transverso g > 0, o estado de menor energia da cadeia se encontra no subespaço de paridade positiva. Estimamos que o gap na fase ferromagnética da cadeia decai drasticamente com o crescimento do número de spins N, equanto na fase paramagnética o gap é sempre finito.

Estudamos o sistema composto com S descrito por um espaço de Hilbert bidimensional. Constatamos que para este caso o eco de Loshimidt (EL) pode ser utilizado para caracterizar a decoerência do sistema S. A partir da análise do EL notamos que quando o campo transverso aplicado à cadeia assume valores nas proximidades do ponto crítico o decaimento do EL é mais abrupto e seu renascimento é proporcional ao número de spins na cadeia. Vimos ainda que a escolha da quantização do momento k deslocado por $\frac{\pi}{2}$ (advinda de uma simplificação no processo de diagonlização do Hamiltoniano da cadeia) em relação ao k da solução exata leva a erros na computação do EL com a cadeia na vizinhança do ponto crítico.

Passamos em seguida a considerar o sistema S como um sistema de spin s arbitrário. Observamos que escolhendo o estado inicial de S como um superposição dos autoestados do operador S_z , todos com mesmo peso, não alcançamos o limite clássico, ou seja, fixado um tempo onde o sistema S para um dado valor de s se encontrava emaranhado com a cadeia R, aumentando o valor de s, vimos que a pureza aumentava até certo ponto e se estabilizava sem que o estado de S se tornasse puro. Já considerando o estado inicial de S um estado coerente de spin, notamos que a escolha de s maiores leva ao aumento da pureza até que o estado de S tornasse puro no limite $s \to \infty$.

Em um estudo posterior, seria interessante verificar se algumas das propriedades encontradas no limite clássico do sistema descrito em [24] podem ser obtidas para nosso sistema, por exemplo, mostrar que no limite clássico o estado de S continua coerente após a evolução temporal.

Referências

- Breuer, H. P. e F. Petruccione: The Theory of Open Quantum Systems. Oxford University Press, Oxford, 2002. Citado na página 11.
- [2] Nielsen, M. A. e I. L. Chuang: Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press, New York, 2000. Citado na página 11.
- [3] DiVincenzo, P. D. Science, 270:255–261, 1995. Citado na página 11.
- [4] Zurek, W. H. Physics Today, 44:36–44, 1991. Citado na página 11.
- [5] Weiss, U.: *Quantum dissipative systems*. World Scientific, Singapore, 1999. Citado na página 11.
- [6] Prokof'ev, N. V. e P. C. E. Stamp. Reports on Progress in Physics, 63:669, 2000. Citado na página 11.
- [7] Zurek, W.H. Physical Review A, 72:052113, 2005. Citado na página 11.
- [8] Quan, H. T., Z. Song, X. F. Liu, P. Zanardi e C. P. Sun. *Physical Review Letters*, 96:140604, 2006. Citado 4 vezes nas páginas 11, 38, 42 e 43.
- [9] Rossini, D., T. Calarco, V. Giovannetti, S. Montangero e R. Fazio. *Physical Review A*, 75:032333, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 38.
- [10] Cucchietti, F. M., S. F. Vidal e J. P. Paz. *Physical Review A*, 75:032337, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 38.
- [11] Ou, Y. C. e H. Fan. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 40:2455–2461, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 38.
- [12] Perez, A.: Quantum Theory: Concepts and Methods. Kluwer Academic, 1995. Citado na página 11.
- [13] Sakurai, J. J.: Modern Quantum Mechanics. Addison-Wesley Publishing Company, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 14.
- [14] Cohen-Tannoudji, C., B. Diu e F. Laloe: *Quantum Mechanics*. John Wiley et Sons, 1977. Citado na página 13.
- [15] Toledo Piza, A. F. R. de: Sistemas quânticos compostos e emaranhamento, sistemas quânticos abertos e decoerência. II Escola de Física Teórica do Departamento de Física Matemática, 2009. Citado na página 16.

- [16] Arecchi, F. T., E. Courtens, R. Gilmore e H. Thomas. *Physical Review A*, 6:2211–2237, 1972. Citado na página 18.
- [17] Perelomov, A.: Generalizad Coherent States and Their Applications. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 19.
- [18] Griffiths, D. J.: Intoduction to Quantum Mechanics. Prentice Hall, 1994. Citado na página 19.
- [19] Sachdev, S.: Quantum Phase Transitions. Cambridge University Press, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 21, 22, 23 e 35.
- [20] Lieb, E., T. Schultz e D. Mattis. Annals of Physics, 16:407–466, 1961. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 38.
- [21] Dziarmaga, J. Physical Review Letters, 95:245701, 2005. Citado na página 25.
- [22] Damski, B. e M. M. Rams. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 47:025303, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 25, 30 e 38.
- [23] Pfeuty, P. Annals of Phyisics, 57:79–90, 1970. Citado na página 38.
- [24] Gea-Banacloche, J. Physical Review A, 44:5913–5931, 1991. Citado 2 vezes nas páginas 50 e 57.
- [25] Oliveira, A. C. e M. C. Nemes. Phyica Scripta, 64:279, 2001. Citado na página 53.
- [26] Wendel, J. G. Amer. Math. Monthly, 55:563, 1948. Citado na página 63.
- [27] Hardy, G. H., J. E. Littlewood e G. Pólya: *Inequalities*. Cambridge Mathematical Library, 1988. Citado na página 63.

Apêndices

APÊNDICE A – Gap no modelo de Ising

Neste apêndice demonstraremos algumas das propriedades do gap citadas na subseção (3.4). Aqui iremos focar na fase ferromagnética (0 < g < 1).

No decorrer das demonstrações utilizaremos as seguintes desigualdades [26,27]:

$$a^{r} - b^{r} \ge rb^{r-1}(a-b), \quad r \ge 1 \text{ ou } r \le 0,$$
 (A.1)

onde a, b > 0. A igualdade acontece somente quando a = b, r = 0 ou r = 1.

$$\left(\frac{x}{x+s}\right)^{1-s} < \frac{\Gamma(x+s)}{x^s \Gamma(x)} < 1, \quad s \in (0,1) \text{ e } x \in (0,\infty), \tag{A.2}$$

denominada desigualdade de Wendel's.

Primeiramente será demonstrado que o gap (3.73) cresce monotonicamente de g = 0 para g = 1. Diferenciando a equação em relação a g, temos:

$$\frac{d}{dg}(E_F^- - E_F^+) = \int_0^1 dt \frac{4N}{\pi} t^{N-\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1-t}{1-g^2t}} \frac{g^{N-1}}{\left[1-(gt)^{2N}\right]^2} f(g,t), \tag{A.3}$$

onde

$$f(g,t) = \left[1 - (gt)^{2N}\right] \left[N - (N+1)g^2t\right] + 2N(1 - g^2t)(gt)^{2N}.$$
 (A.4)

Observe que, se f(g,t) > 0, então, $\frac{d}{dg}(E_F^- - E_F^+) > 0$, para $t \in (0,1)$ e $g \in (0,1)$. Consequentemente, a monotonicidade do gap de g = 0 para g = 1 será satisfeita se f(g,t) > 0. Fazendo uso da desigualdade (A.1) no termo $\left[1 - (gt)^{2N}\right]$, onde assumimos a = 1, b = gt e r = 2N, obtemos

$$\begin{aligned} f(g,t) &\geq 2N(gt)^{2N} \left[1 - g + N\left(\frac{1}{gt} - 1 - g + g^2 t\right) \right] \\ &\geq 2N(gt)^{2N} (1 - g) \left[1 + N\left(1 - gt\right) \right] > 0, t \in (0,1) \text{ e } g \in (0,1). \end{aligned}$$
(A.5)

A última desigualdade também foi construída a partir da desigualdade (A.1), agora utilizando o termo $\left(\frac{1}{gt}-1\right)$, onde a = gt, b = 1 e r = -1.

Obtemos uma cota inferior para o gap. Sabendo que $b_l < 0$, onde b_l é dado pela equação (3.72), podemos a partir da equação (3.60) escrever:

$$E_F^- - E_F^+ = -N(b_N + b_{3N} + b_{5N} + \dots)$$

> $-Nb_N = \frac{4Ng^N}{\pi} \int_0^1 dt \sqrt{(1-t)(1-g^2t)} t^{N-\frac{3}{2}}.$ (A.6)

A partir da desigualdade:

$$\sqrt{(1-t)(1-gt^2)} = \sqrt{(1-g^2)(1-t) + g^2(1-t)^2} \ge \max\left(\sqrt{(1-g^2)}\sqrt{(1-t)}, g(1-t)\right),$$
(A.7)

e da relação (A.6), teremos que:

$$E_{F}^{-} - E_{F}^{+} \geq \frac{4Ng^{N}}{\pi} \int_{0}^{1} dt \left[\max\left(\sqrt{(1-g^{2})}\sqrt{(1-t)}, g(1-t)\right) \right] t^{N-\frac{3}{2}}$$

$$\geq \max\left(g^{N}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{\Gamma\left(N-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(N+1)}, \frac{2g^{N+1}}{\pi\left(N^{2}-\frac{1}{4}\right)}\right)$$

$$> \max\left(g^{N}\frac{2\sqrt{1-g^{2}}}{\sqrt{\pi N}}, g^{N}\frac{4g}{\pi N}\right).$$
(A.8)

Na última linha utilizamos $\frac{1}{\left(N^2-\frac{1}{2}\right)} > \frac{1}{N^2} e \frac{\Gamma\left(N-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(N+1)} > \frac{1}{N^{\frac{3}{2}}}$, advinda da desigualdade (A.2)

$$\frac{\Gamma(N)}{(N-1)^{\frac{1}{2}}\Gamma(N-1)} < 1$$

$$\Rightarrow \frac{N\Gamma(N)}{\Gamma(N-\frac{1}{2})} < N(N-1)^{\frac{1}{2}},$$

(A.9)

que requer

$$\frac{\Gamma(N-\frac{1}{2})}{\Gamma(N+1)} > \frac{1}{N(N-\frac{1}{2})^{\frac{1}{2}}} \\
> \frac{1}{N^{\frac{3}{2}}}.$$
(A.10)

Por último, definiremos um limite superior para o gap. Sabendo que (3.60),

$$E_F^- - E_F^+ = -N \sum_{l=N,3N,\dots} b_l,$$
 (A.11)

podemos utilizar a desigualdade

$$\sqrt{(1-t)(1-gt^2)} = \sqrt{(1-g^2)(1-t) + g^2(1-t)^2} \le \sqrt{(1-g^2)}\sqrt{(1-t)} + g(1-t),$$
(A.12)

para escrever a seguinte inequação

$$\begin{split} E_{F}^{-} - E_{F}^{+} &\leq \frac{4Ng^{N}}{\pi} \int_{0}^{1} dt \left[\sqrt{(1-g^{2})} \sqrt{(1-t)} + g(1-t) \right] t^{N-\frac{3}{2}} \\ &\leq \frac{4N}{\pi} g^{N+1} \sum_{l=N,3N,\dots} \frac{g^{l-N}}{l^{2}-\frac{1}{4}} + \frac{2N}{\sqrt{\pi}} g^{N} \sqrt{1-g^{2}} \sum_{l=N,3N,\dots} \frac{\Gamma\left(l-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(l+1)} g^{l-N} \\ &< \frac{4N}{\pi} g^{N+1} \frac{N}{N-\frac{1}{2}} \sum_{l=N,3N,\dots} \frac{g^{l-N}}{l^{2}} + \frac{2N}{\sqrt{\pi}} g^{N} \sqrt{1-g^{2}} \sqrt{\frac{N}{N-1}} \sum_{l=N,3N,\dots} \frac{g^{l-N}}{l^{\frac{3}{2}}} \\ &< g^{N} \frac{\pi g}{2N-1} + g^{N} 2 \frac{\sqrt{1-g^{2}}}{\sqrt{N-1}}. \end{split}$$
(A.13)

A terceira linha segue de

$$\frac{1}{l^2 - \frac{1}{4}} < \frac{1}{l^2},
\frac{\Gamma(l - \frac{1}{2})}{\Gamma(l + 1)} < \frac{1}{l^2} \sqrt{\frac{N}{N - 1}},$$
(A.14)

com as duas desigualdades validas par
a $l \geq N.$ A última desigualdade de (A.14) advém da desigualdade (A.2)

$$\frac{\Gamma(l-\frac{1}{2})}{(l-1)^{\frac{1}{2}}\Gamma(l-1)} < 1$$

$$\Rightarrow \frac{\Gamma(l-\frac{1}{2})}{l(l-1)\Gamma(l-1)} < \frac{1}{l(l-1)^{\frac{1}{2}}}$$

$$\Rightarrow \frac{\Gamma(l-\frac{1}{2})}{\Gamma(l+1)} < \frac{1}{l^{\frac{3}{2}}(1-\frac{1}{l})^{\frac{1}{2}}}$$

$$< \frac{1}{l^{\frac{3}{2}}(1-\frac{1}{N})^{\frac{1}{2}}}, \quad l \ge N.$$
(A.15)

Finalmente a ultima linha de (A.13), é obtida da soma avaliada em g = 1. Observe que estamos restritos a 0 < g < 1, consequentemente a soma avaliada em g = 1 é maior.