

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS
MESTRADO EM CIÊNCIAS - FÍSICA**

ANDRÉ GUSTAVO DE OLIVEIRA

***SPIN SQUEEZING* EM NÚCLEOS QUADRUPOLARES EM RESSONÂNCIA
MAGNÉTICA NUCLEAR E HAMILTONIANOS DE *ONE-AXIS TWISTING* COM
ADIÇÃO DE TERMO DO TIPO INTERAÇÃO DIPOLAR**

**PONTA GROSSA
2018**

ANDRÉ GUSTAVO DE OLIVEIRA

***SPIN SQUEEZING* EM NÚCLEOS QUADRUPOLARES EM RESSONÂNCIA
MAGNÉTICA NUCLEAR E HAMILTONIANOS DE *ONE-AXIS TWISTING* COM
ADIÇÃO DE TERMO DO TIPO INTERAÇÃO DIPOLAR**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências, área de concentração em Física, da Universidade Estadual de Ponta Grossa, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências-Física.

Orientador: Prof. Dr. Ruben Aucçaise Estrada

**PONTA GROSSA
2018**

Ficha Catalográfica
Elaborada pelo Setor de Tratamento da Informação BICEN/UEPG

Oliveira, André Gustavo de
048 Spin squeezing em núcleos quadripolares em ressonância magnética nuclear e Hamiltonianos de One-Axis Twisting com adição de termo do tipo interação dipolar/ André Gustavo de Oliveira. Ponta Grossa, 2018.
81f.

Dissertação (Mestrado em Ciências - Área de Concentração: Física), Universidade Estadual de Ponta Grossa.
Orientador: Prof. Dr. Ruben Aucchaise Estrada.

1.Spin squeezing. 2.Condensados de Bose-Einstein. 3.Ressonância magnética nuclear. 4.Hamiltonianos de OAT. 5.Interação dipolar. I.Estrada, Ruben Aucchaise. II. Universidade Estadual de Ponta Grossa. Mestrado em Ciências. III. T.

CDD: 515.39

TERMO DE APROVAÇÃO

ANDRÉ GUSTAVO DE OLIVEIRA

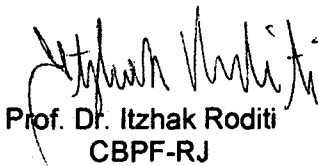
**"SPIN SQUEEZING EM NÚCLEOS QUADRUPOLARES EM
RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR E HAMILTONIANOS DE ONE-
AXIS TWISTING COM ADIÇÃO DE TERMO DO TIPO INTERAÇÃO
DIPOLAR"**

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre no Programa de Pós-Graduação em Ciências - Física da Universidade Estadual de Ponta Grossa, pela seguinte banca examinadora.

Orientador:



Prof. Dr. Ruben Auccaise Estrada
Departamento de Física, UEPG/PR



Prof. Dr. Itzhak Roditi
CBPF-RJ



Prof. Dr. José Danilo Szezech Junior
Departamento de Matemática UEPG/PR

Ponta Grossa, 26 de fevereiro de 2018.

Este trabalho é dedicado à minha família, amigos e colegas.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. Ruben Auccaise Estrada pelos conselhos, dedicação e apoio no desenvolver deste trabalho, assim como pelas inúmeras contribuições na minha formação profissional.

Do mesmo modo, agradeço ao Prof. Dr. Antônio Sérgio Magalhães de Castro, por seus conselhos, dúvidas e discussões, que muito contribuíram na minha formação científica.

Também gostaria de agradecer aos meus colegas e professores de Física por tornar o ambiente de ensino mais dinâmico e proveitoso.

Em especial, sou grato à minha família, minha irmã e meus pais, por todo o carinho e apoio durante todo o meu desenvolvimento acadêmico e como pessoa. Devo muito também aos meus amigos, uma segunda família, sempre presente.

Mas meu agradecimento mais intenso devo à minha companheira e amiga Mariana Tozetto pelas inúmeras horas de companhia, pelo incentivo e apoio, pelos cafés diários e até mesmo pelas discussões, mas principalmente por ser a pessoa mais carinhosa e delicada que já conheci.

Por fim, agradeço a CAPES pelo fomento.

RESUMO

DE OLIVEIRA, André. *Spin Squeezing* em Núcleos Quadrupolares em Ressonância Magnética Nuclear e Hamiltonianos de *One-Axis Twisting* com adição de termo do tipo interação dipolar. 2018. 81p. Dissertação (Mestrado em Ciências-Física) - Universidade Estadual de Ponta Grossa. Ponta Grossa, 2018.

Neste trabalho são analisados os efeitos da adição de um termo de acoplamento baseado na interação dipolar entre núcleos quadrupolares em RMN na produção de *spin squeezing* através de Hamiltonianos de *One-Axis Twisting*. Diversos regimes de acoplamento são abordados para o caso de subsistemas com momento angular $I = 7/2$ e $J = 3/2$. Verifica-se através das dinâmicas abordadas e pelos valores mínimos do parâmetro de *spin squeezing* ξ_S^2 em função da intensidade do acoplamento D que, apesar de mudanças significativas nas dinâmicas, estados *spin squeezed* ainda são encontrados durante as evoluções.

Palavras-chave: *Spin squeezing*. Condensados de Bose-Einstein. Ressonância Magnética Nuclear. Hamiltonianos de OAT. Interação dipolar.

ABSTRACT

DE OLIVEIRA, André. Spin Squeezing in Quadrupolar Nuclei in Nuclear Magnetic Resonance and One-Axis Twisting Hamiltonians with addition of a dipole-like interaction term. 2018. 81p. Dissertation (Mestrado em Ciências-Física) - Universidade Estadual de Ponta Grossa. Ponta Grossa, 2018.

In this work, are analyzed the effects of the addition of a coupling term based on the dipole interaction between quadrupolar nuclei in NMR in the production of spin squeezing through One-Axis Twisting Hamiltonians. Several coupling regimes are addressed in the case of subsystems with angular momentum $I = 7/2$ and $J = 3/2$. It is verified through the dynamics addressed and by the minimum values of the spin squeezing parameter ξ_S^2 as a function of the coupling intensity D that, despite significant changes in the dynamics, spin squeezed states are still encountered during the evolutions.

Keywords: Spin squeezing. Bose-Einstein condensates. Nuclear Magnetic Resonance. OAT Hamiltonians. Dipolar interaction.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	8
2	TEORIA QUÂNTICA DE MOMENTO ANGULAR	11
2.1	Elementos básicos da Mecânica Quântica	11
2.2	Operadores de momento angular	12
2.3	Sistemas de $spin-1/2$	14
2.4	Adição de momento angular e coeficientes de Clebsch-Gordan	16
2.5	Sistemas de N $spins-1/2$ e Estados Coerentes de $Spin$	19
3	CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN EM POÇOS-DUPLOS E REPRESENTAÇÃO DE SCHWINGER	23
3.1	Bósons, Férmions e Condensados de Bose-Einstein	23
3.2	Formalismo de Segunda Quantização	24
3.3	BECs em potenciais de poço duplo e Hamiltoniano de Bose-Hubbard	27
3.3.1	Aproximação de dois modos	28
3.3.2	Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios	29
3.4	Representação de Schwinger	30
4	ESTADOS $SPIN$ SQUEEZED	33
4.1	<i>Squeezing</i> no contexto de Ótica Quântica	34
4.2	Definição de <i>spin squeezing</i> segundo Kitagawa e Ueda	35
4.2.1	Cálculo do parâmetro ξ_S^2	36
4.3	<i>Spin squeezing</i> definido para aplicações em interferometria	38
4.4	<i>Spin Squeezing</i> e Separabilidade	39
4.5	O Hamiltoniano de One-Axis Twisting	40
5	NÚCLEOS QUADRUPOLARES EM RMN	45
5.1	Spins Nucleares em Campos Magnéticos Externos	45
5.2	Acoplamento Quadrupolar	46
5.3	Referencial Girante e Hamiltoniano de Bose-Hubbard	49
6	A INTERAÇÃO DIPOLAR E SPIN SQUEEZING	52
6.1	Interação dipolar em RMN	52
6.2	Hamiltoniano de OAT com termo do tipo dipolar	55
6.2.1	Dinâmica 1: subsistemas desacoplados	56
6.2.2	Dinâmica 2: apenas termo dipolar	59

6.2.3	Dinâmica 3 - Termo de acoplamento com $D = 2$	61
6.2.4	Dinâmica 4 - Termo de acoplamento com $D = 10$	63
6.2.5	Dinâmica 5 - Acoplamento forte ($D = 20$)	65
6.3	Discussões	67
6.4	Termo dipolar em termos de operadores bosônicos	70
7	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	72
	REFERÊNCIAS	73
	APÊNDICE A – CONDENSADOS DE DUAS ESPÉCIES EM POÇOS- DUPLOS E O HAMILTONIANO DIPOLAR	79

1 INTRODUÇÃO

Desde o início do século XX, intensa pesquisa foi dedicada à Mecânica Quântica, uma das teorias científicas mais precisas e surpreendentes de toda a Física, a qual levou a uma verdadeira revolução na compreensão humana da realidade (1–3). Além de suas fascinantes consequências científicas e filosóficas, a Mecânica Quântica também abre portas no desenvolvimento de novas tecnologias, em especial nas áreas de Informação e Computação Quântica, na busca do desenvolvimento de computadores quânticos exponencialmente mais eficientes do que computadores clássicos (4). Muitas das aplicações nestas áreas utilizam dois dos mais intrigantes conceitos da Mecânica Quântica, sendo eles correlações quânticas e emaranhamento, temas intensamente pesquisados na atualidade (5,6). Devido à importância destes conceitos, ferramentas que identifiquem, caracterizem ou quantifiquem emaranhamento e correlações quânticas são de extrema importância na busca da implementação de protocolos quânticos em laboratório (7).

Além das aplicações em Computação e Informação Quântica, correlações quânticas também desempenham papel importante na área de Metrologia Quântica (8–10), cujo o foco central consiste no esclarecimento de questões relacionadas aos limites de precisão teórico e experimental impostos pela Natureza como, por exemplo, existe um limite de precisão imposto pelo caráter quântico da Natureza? Caso sim, quão próximo é possível chegar deste limite? Que ferramentas podem ser exploradas para o aumento de precisão experimental?

Relacionada ao conceito e caracterização de correlações quânticas e emaranhamento, assim como às questões apresentadas pela Metrologia Quântica está a noção de *spin squeezing*, uma estratégia quântica que consiste na produção de estados *spin squeezed*, onde flutuações de observáveis de momento angular são reduzidas em comparação aos chamados Estados Coerentes de Spin que, embora quânticos, apresentam características mais próximas do comportamento clássico. Definido primeiramente por Kitagawa e Ueda (11) inspirados pelo conceito de *squeezing* no contexto de Ótica Quântica, *spin squeezing* foi posteriormente relacionado à metrologia nos trabalhos de Wineland, *et al.* que exploram a utilidade desta estratégia quântica no aumento de precisão de medidas em técnicas interferométricas, com aplicação direta no desenvolvimento de relógios atômicos mais precisos (12, 13). Apesar de Kitagawa e Ueda já indicarem a ligação entre correlações quânticas e *spin squeezing* em seu trabalho pioneiro, esta ligação foi abordada posteriormente de maneira mais clara e precisa em diversos trabalhos (14–17), onde muitas vezes as definições de *spin squeezing* são generalizadas de modo a se apresentarem como uma ferramenta na identificação e quantificação de correlações e emaranhamento, mais um exemplo da importância do estudo desta estratégia quântica.

Para explorar o potencial destes estados *spin squeezed*, são necessários processos que permitam a produção destes estados em laboratório. Embora diversos processos tenham sido introduzidos na literatura, a maneira mais frequentemente abordada devido à sua simplicidade e possibilidade de implementação, é a geração de estados *spin squeezed* através dos chamados

Hamiltonianos de *One-Axis Twisting* (OAT) introduzidos por Kitagawa e Ueda, Hamiltonianos com dependência quadrática em um operador cartesiano de momento angular (11, 17). Dinâmicas regidas por tais Hamiltonianos produzem estados *spin squeezed* quando estados coerentes adequados são adotados como estados iniciais dos sistemas quânticos. Dentre os sistemas quânticos onde tais dinâmicas podem ser realizadas, dois possuem papel de destaque neste trabalho: condensados de Bose-Einstein em poços-duplos (18–20) e núcleos quadrupolares em Ressonância Magnética Nuclear (21). A realização de Hamiltonianos de OAT nestes sistemas é abordada de maneira detalhada no texto, permitindo destacar um dos pontos principais visados na elaboração deste trabalho, sendo ele a relação entre sistemas bosônicos de dois modos, como condensados em poço-duplo, e sistemas de momento angular, onde uma descrição comum é possível através da Representação de Schwinger (22).

Uma vez salientada a importância do conceito de *spin squeezing* e apresentada a sua produção através de Hamiltonianos de OAT, destaca-se o ponto central deste trabalho, que consiste em estudar os efeitos introduzidos pela adição de um termo de acoplamento entre dois sistemas de momento angular nos quais *spin squeezing* é produzido através de Hamiltonianos de OAT, sendo as dinâmicas obtidas os resultados originais deste trabalho. A inspiração de tal estudo é proveniente da recente implementação de dinâmicas de *spin squeezing* em sistemas de núcleos quadrupolares em Ressonância Magnética Nuclear (21), sendo o termo de acoplamento utilizado no Hamiltoniano baseado na interação dipolar, uma interação do tipo *spin-spin* de origem magnética (23). Visando o estudo das dinâmicas de *spin squeezing* com acoplamento do tipo dipolar, este trabalho foi estruturado de modo a introduzir as ferramentas indispensáveis na construção e análise destas dinâmicas. O capítulo 2 traz as bases da descrição quântica de um sistema físico, apresentando os postulados e objetos básicos desta descrição como vetores de estado e operadores, utilizados em todo o decorrer do trabalho. Este capítulo contém também uma introdução ao tratamento quântico de momento angular, como operadores de momento angular, sistemas de *spin-1/2* e adição de momento angular. São abordados também a descrição de sistemas de N *spins-1/2* idênticos e o conceito de estado coerente de *spin*, ambos necessários na descrição de *spin squeezing*. Por fim, este capítulo introduz o ferramental básico de representação de estados quânticos de momento angular em espaço de fase através da função distribuição de quasiprobabilidade de Wigner, a qual é empregada nos capítulos seguintes como uma maneira de visualização gráfica das dinâmicas abordadas.

O capítulo 3 é voltado para a descrição de sistemas de Condensados de Bose-Einstein em poço-duplo, introduzindo o formalismo de Segunda Quantização frequentemente empregado na descrição de sistemas de muitas partículas idênticas. Condensados em poço-duplo são abordados por dois motivos principais: representam uma forma de implementação experimental de Hamiltonianos de *One-Axis Twisting* (OAT) utilizados na produção de estados *spin squeezed*, e devido a relação da descrição destes sistemas pela aproximação de dois modos com a teoria de momento angular do capítulo 2 através da representação de Schwinger. Estes conceitos são abordados de forma detalhada neste capítulo.

O capítulo quatro apresenta a definição de *spin squeezing* proposta por Kitagawa e Ueda, assim como a de Wineland, *et al.*, em conjunto com conceitos de *squeezing* no contexto de Ótica Quântica. Os parâmetros de *spin squeezing* ξ_S^2 e ξ_R^2 são então definidos, assim como a produção de estados *spin squeezed* caracterizados por estes parâmetros através de Hamiltonianos de OAT, sendo discutido o ciclo de *squeezing* obtido através destes Hamiltonianos, com estados sendo representados através da distribuição de Wigner introduzida no capítulo 2.

O quinto capítulo contém as ideias básicas da descrição teórica de núcleos quadrupolares em RMN, outra possível implementação de Hamiltonianos de OAT. Nele é discutido também a relação entre estes sistemas e condensados de Bose-Einstein em poço-duplo, duas possíveis realizações do Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios.

Tendo em mãos os conceitos introduzidos nos capítulos anteriores, o capítulo 6 ocupa-se da descrição da interação dipolar magnética entre núcleos homo e heteronucleares em RMN, focando no Hamiltoniano devido à dois núcleos quadrupolares heteronucleares interagindo por interação dipolar. Baseado neste Hamiltoniano, são analisadas dinâmicas de *spin squeezing* para um sistema composto por dois subsistemas de momento angular $I = 7/2$ e $J = 3/2$ através de Hamiltonianos de OAT em conjunto com um termo de acoplamento da mesma forma do termo de interação dipolar em RMN. Diversos regimes de acoplamento são analisados no texto, sendo as dinâmicas de *spin squeezing* obtidas caracterizadas pelo parâmetro de *spin squeezing* ξ_S^2 de Kitagawa e Ueda.

Antes de finalizar este capítulo, é importante destacar o fato de que as definições apresentadas neste trabalho utilizam unidades nas quais a constante de Planck reduzida \hbar é considerada igual à unidade, o que pode levar a definições diferentes das frequentemente encontradas na literatura.

2 TEORIA QUÂNTICA DE MOMENTO ANGULAR

Este capítulo contém o ferramental básico de Mecânica Quântica, como seus postulados e Teoria Quântica de Momento Angular, encontrados em livros-texto típicos deste tópico (2, 24–26). Também são introduzidos os conceitos de Estado Coerente de Spin e distribuição de quasiprobabilidade de Wigner, ferramentas empregadas posteriormente no estudo de *spin squeezing*.

2.1 ELEMENTOS BÁSICOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

A construção de qualquer pensamento científico necessita de alicerces sólidos, fatos ou definições fundamentais nos quais todo o processo de raciocínio e análise serão baseados. A Mecânica Quântica, teoria física empregada na investigação de sistemas em escala atômica ou subatômica, tem como alicerces postulados fundamentais que estabelecem de forma axiomática os objetos necessários à descrição quântica de um sistema físico (2, 24, 25). Estes postulados estabelecem que o estado de um sistema quântico é descrito matematicamente através de vetores pertencentes a espaços vetoriais complexos com norma chamados espaços de Hilbert (\mathbb{H}). Estes vetores são usualmente representados através da notação de Dirac, utilizando *kets* $|\psi\rangle$ e seus adjuntos $\langle\psi|$, chamados de *bras*. Um observável físico A relativo ao sistema é representado através de um operador linear hermitiano $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ que atua no espaço de Hilbert do sistema, onde \hat{A}^\dagger é o adjunto de \hat{A} . Os possíveis valores deste observável são os autovalores (todos reais) do operador \hat{A} , ou seja, valores a_i definidos pela expressão

$$\hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle, \quad (2.1)$$

onde os vetores $|a_i\rangle$ são os autovetores ou *autokets* deste operador. Sendo em seu cerne uma teoria probabilística, a Mecânica Quântica permite estabelecer valores médios $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ destas grandezas físicas observáveis, uma vez conhecido o estado do sistema. Outro aspecto de caráter estatístico central ao formalismo quântico é a relação entre as variâncias de dois observáveis e a relação de comutação entre ambos através de uma desigualdade, estabelecendo um limite de precisão na estimativa simultânea de dois observáveis físicos não-comutantes. Tal relação é chamada de princípio de Incerteza de Heisenberg, sendo expressa formalmente pela desigualdade

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} | \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle |^2, \quad (2.2)$$

relacionando as variâncias

$$(\Delta A)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2, \quad (2.3)$$

e

$$(\Delta B)^2 = \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2, \quad (2.4)$$

com o comutador

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (2.5)$$

entre os operadores. Dois operadores são ditos comutativos caso o comutador entre eles seja nulo.

A dinâmica de um sistema quântico, ou seja, como estados são alterados no decorrer do tempo, é estabelecida através da famosa equação de Schroedinger

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (2.6)$$

onde \hat{H} é o operador Hamiltoniano, associado à energia do sistema. Um resultado importante derivado desta equação estabelece que um estado $|\psi(t_0)\rangle$ no tempo t_0 evoluirá através da aplicação de um operador unitário chamado operador de evolução temporal

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)}, \quad (2.7)$$

sendo o estado quântico no tempo $t > t_0$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (2.8)$$

caracterizando toda a dinâmica do sistema. Uma vez definido estes conceitos fundamentais, o restante deste capítulo é dedicado à aplicação deste formalismo no contexto de observáveis de momento angular que posteriormente será empregado no conceito de *spin squeezing*, um dos pontos centrais deste trabalho.

2.2 OPERADORES DE MOMENTO ANGULAR

O momento angular é uma grandeza física de extrema importância, tanto em Mecânica Clássica quanto em Mecânica Quântica, uma vez que é gerador de rotações em sistemas físicos e uma quantidade conservada em sistemas rotacionalmente simétricos (24, 27, 28). Em Mecânica Clássica, momento angular é uma grandeza física vetorial associada à rotações em torno de um ponto específico, definida matematicamente como o produto vetorial entre os vetores posição e momentum linear de um corpo num dado referencial (28)

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad (2.9)$$

sendo conservado sempre que torques externos não atuem sobre o sistema. Já em Mecânica Quântica, momento angular é definido de maneira mais geral, com foco em sua relação com rotações (25). Neste contexto, a grandeza momento angular é associada a um operador vetorial geralmente expresso em coordenadas cartesianas como

$$\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z), \quad (2.10)$$

cujas componentes \hat{J}_k são operadores que geram rotações em torno dos eixos $k = x, y, z$. O termo gerador de rotações é proveniente do fato de que estes operadores são empregados na construção de operadores de rotação da forma

$$\hat{R}_{\mathbf{n}}(\varphi) = e^{-i(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n})\varphi}, \quad (2.11)$$

equivalente quântico de uma rotação do sistema por um ângulo φ em torno do eixo estabelecido pelo vetor unitário \mathbf{n} . Uma imposição razoável na construção destes operadores é que valores esperados de observáveis físicos calculados através dos estados quânticos rotacionados sejam iguais aos valores calculados através da rotação do valor esperado através de matrizes de rotação usuais $R_{\mathbf{n}}(\varphi)$ (28), ou seja

$$\langle \psi | \hat{R}_{\mathbf{n}}^\dagger(\varphi) \hat{A} \hat{R}_{\mathbf{n}}(\varphi) | \psi \rangle = R_{\mathbf{n}}(\varphi) \langle \hat{A} \rangle. \quad (2.12)$$

Esta imposição resulta em relações de comutação específicas para os geradores (24–26):

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hat{J}_x. \quad (2.13)$$

Estas relações de comutação fundamentais caracterizam todo o tratamento quântico de momento angular e rotações em Mecânica Quântica. Um resultado direto destes comutadores são as relações de Incerteza para operadores de momento angular, que de acordo com (2.2) são

$$\begin{aligned} (\Delta J_x)^2 (\Delta J_y)^2 &\geq \frac{1}{4} \langle \hat{J}_z \rangle^2 \\ (\Delta J_z)^2 (\Delta J_x)^2 &\geq \frac{1}{4} \langle \hat{J}_y \rangle^2 \\ (\Delta J_z)^2 (\Delta J_y)^2 &\geq \frac{1}{4} \langle \hat{J}_x \rangle^2. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Estas expressões serão importantes na definição do conceito de *spin squeezing* no Capítulo 3 deste trabalho. Para se trabalhar com problemas de momento angular em Mecânica Quântica, um passo fundamental é estabelecer uma base adequada. A base geralmente (25, 29) empregada neste contexto é a base de autokets simultâneos do operador \hat{J}_z e do operador quadrático

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2, \quad (2.15)$$

sendo os elementos desta base expressos por $|J, m\rangle$ devido aos autovalores definidos por

$$\hat{J}_z |J, m\rangle = m |J, m\rangle \quad (2.16)$$

e

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |J, m\rangle = J(J+1) |J, m\rangle \quad (2.17)$$

onde os números quânticos

$$J = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

e

$$m = -J, -J+1, \dots, J-1, J$$

caracterizam estes autovalores. Dois outros operadores importantes no contexto de momento angular são os chamados operadores de levantamento e abaixamento, nomeados de tal forma devido aos efeitos produzidos pela aplicação destes operadores em estados da base $|J, m\rangle$:

$$\hat{J}_+ |J, m\rangle = \sqrt{(J-m)(J+m+1)} |J, m+1\rangle \quad (2.18)$$

$$\hat{J}_- |J, m\rangle = \sqrt{(J+m)(J-m+1)} |J, m-1\rangle, \quad (2.19)$$

respeitando

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_z \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm \quad (2.20)$$

como regras de comutação. Outra forma de definir estes operadores é através de suas relações com os operadores \hat{J}_x e \hat{J}_y :

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad (2.21)$$

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y, \quad (2.22)$$

expressões que podem ser invertidas resultando em

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \quad (2.23)$$

$$\hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-), \quad (2.24)$$

expressões úteis na computação dos efeitos dos operadores \hat{J}_x e \hat{J}_y na base $|J, m\rangle$.

Uma questão natural em relação ao momento angular é a diferença entre a definição clássica desta grandeza e sua definição quântica. Esta discrepância surge devido ao fato de que partículas quânticas podem apresentar valores intrínsecos de momento angular referidos pelo termo *spin*, quantidades que não possuem equivalentes clássicos, apresentando uma contribuição puramente quântica no momento angular de sistemas. A definição de operadores de momento angular como geradores de rotação em Mecânica Quântica engloba de maneira natural estas propriedades intrínsecas de sistemas quânticos. O equivalente quântico da expressão (2.9) é chamado momento angular orbital, sendo dependente de operadores de posição e momento de partículas e representado por \hat{L} , operador que também respeita todas as propriedades de momento angular apresentadas anteriormente.

2.3 SISTEMAS DE SPIN-1/2

Um modelo de grande importância em diversas áreas da Mecânica Quântica são os chamados sistemas de spin-1/2, sistemas onde o número quântico J possui valor igual à 1/2, sendo um exemplo típico de momento angular intrínseco citado no final da seção anterior. Nestes casos é usual substituir J por S , reescrevendo os operadores como \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z e \hat{S}^2 , chamados usualmente de operadores de *spin*, que atuam no espaço de Hilbert de dimensão 2 referente ao sistema. Como no caso de J geral, a base empregada é a base de autokets simultâneos de \hat{S}_z e \hat{S}^2 , cujos elementos serão representados como $|\uparrow\rangle$ para $m = 1/2$ e $|\downarrow\rangle$ para $m = -1/2$. Outra prática frequente é representar os operadores matricialmente através das chamadas matrizes de Pauli:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

onde os operadores de momento angular de spin são compostos por

$$\hat{S}_\alpha = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_\alpha \quad \alpha = x, y, z. \quad (2.26)$$

Nesta representação matricial, os estados da base ficam na forma

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

sendo referida como representação de *spinors*. Estados gerais de sistemas deste tipo na base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ são compostos por superposições da forma

$$|\psi\rangle = \alpha |\downarrow\rangle + \beta |\uparrow\rangle, \quad (2.28)$$

onde os coeficientes complexos α e β , amplitudes de probabilidade dos estados da base, estão sujeitos à condição de normalização

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (2.29)$$

Outro modo de representar estes estados gerais é pela parametrização das amplitudes de probabilidade através dos ângulos $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi \leq 2\pi$:

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |\downarrow\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2) |\uparrow\rangle. \quad (2.30)$$

Tal parametrização tem a vantagem de possibilitar uma interpretação geométrica vetorial simples para o *spin*, sendo a direção esperada de *spin*

$$\mathbf{n}_m = \frac{\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle}{|\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle|} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad (2.31)$$

especificada pelos valores médios das componentes, uma vez que

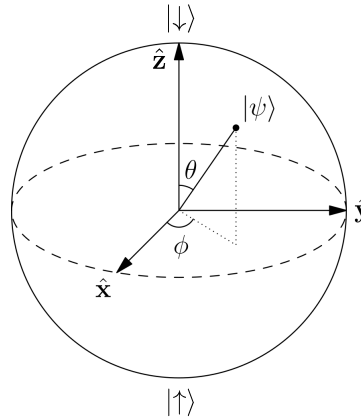
$$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle = (\langle \hat{S}_x \rangle, \langle \hat{S}_y \rangle, \langle \hat{S}_z \rangle) \quad (2.32)$$

e

$$|\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle| = \sqrt{\langle \hat{S}_x \rangle^2 + \langle \hat{S}_y \rangle^2 + \langle \hat{S}_z \rangle^2}. \quad (2.33)$$

Também é possível visualizar graficamente estados quânticos com esta parametrização através da chamada esfera de Bloch (4), onde os estados quânticos são representados como pontos na superfície de uma esfera de raio unitário especificados pelas coordenadas esféricas (θ, ϕ) .

Figura 1 – Representação de estados quânticos para sistemas de $spin-1/2$ na esfera de Bloch. Estados quânticos são representados por pontos (θ, ϕ) na superfície de uma esfera unitária. Fonte: adaptado de Wikipedia¹.



A representação de estados quânticos na esfera de Bloch pode ser generalizada para qualquer sistema de dois níveis, ou seja, sistemas quânticos cujo espaço de Hilbert possuem dimensão igual à dois.

2.4 ADIÇÃO DE MOMENTO ANGULAR E COEFICIENTES DE CLEBSCH-GORDAN

Em diversos casos, o operador de momento angular definido anteriormente representa um momento angular total proveniente da composição de diversas contribuições, sejam elas de *spin*, de momento angular orbital ou devidas à presença de muitas partículas com momentos magnéticos não-nulos (24, 25, 29). Supondo um sistema composto por duas contribuições de momento angular \mathbf{J}_1 e \mathbf{J}_2 , o operador momento angular total ou momento angular coletivo deste sistema é construído pela soma

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{\mathbf{J}}_2, \quad (2.34)$$

sendo $\hat{1}$ operadores identidade para cada subespaço e \otimes representando o produto tensorial entre operadores em subespaços distintos. Com esta definição de momento angular total, as componentes cartesianas deste operador são obtidas através de somas da forma

$$\hat{J}_\alpha = \hat{J}_\alpha^{(1)} \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{J}_\alpha^{(2)} \quad \alpha = x, y, z, \quad (2.35)$$

sendo estas adições comumente expressas de modo simplificado por $\hat{J}_\alpha = \hat{J}_\alpha^{(1)} + \hat{J}_\alpha^{(2)}$. Uma vez estabelecidos os operadores, é necessário adotar uma base conveniente no tratamento quântico de momento angular total. Uma das alternativas consiste em compor as bases usuais de momento angular de cada subsistema através de produtos da forma

$$|J_1, m_1\rangle \otimes |J_2, m_2\rangle = |J_1, J_2; m_1, m_2\rangle, \quad (2.36)$$

¹ <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Bloch_Sphere.svg>.

obtendo uma base que diagonaliza os operadores locais $\hat{\mathbf{J}}_1^2$, $\hat{\mathbf{J}}_2^2$, \hat{J}_{z_1} e \hat{J}_{z_2} simultaneamente, embora não diagonalizando $\hat{\mathbf{J}}^2$. Outra alternativa consiste em empregar uma base que diagonaliza operadores do sistema total, ou seja, $\hat{\mathbf{J}}^2$ e \hat{J}_z . A base que realiza esta diagonalização é conhecida como base de Dicke, representada por $\{|J, m\rangle\}$, que além de base de autovetores simultâneos de $\hat{\mathbf{J}}^2$ e \hat{J}_z , também diagonaliza $\hat{\mathbf{J}}_1^2$ e $\hat{\mathbf{J}}_2^2$. A ligação entre as duas bases pode ser estabelecida fazendo uso da relação de completeza

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} |J_1, J_2; m_1, m_2\rangle \langle J_1, J_2; m_1, m_2| = \hat{1} \quad (2.37)$$

aplicada sobre $|J, m\rangle$:

$$|J, m\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{J_1, J_2; m_1, m_2}^{J, m} |J_1, J_2; m_1, m_2\rangle \quad (2.38)$$

onde os coeficientes

$$C_{J_1, J_2; m_1, m_2}^{J, m} = \langle J_1, J_2; m_1, m_2 | J, m \rangle = \langle J, m | J_1, J_2; m_1, m_2 \rangle \quad (2.39)$$

são os chamados coeficientes de Clebsch-Gordan, não-nulos apenas nos casos onde

$$m = m_1 + m_2$$

e

$$|J_1 - J_2| \leq J \leq J_1 + J_2.$$

Para detalhes do cálculo dos coeficientes de Clebsch-Gordan, recomenda-se a referência (29), que apresenta diversas expressões numéricas para o cálculo dos coeficientes assim como tabelas para diversos valores de J_1 e J_2 . Como exemplo de aplicação destes conceitos, será realizada aqui a adição de momento angular para um sistema composto por três partículas *spin*-1/2, sendo as componentes dos operadores de momento angular total dadas por:

$$\hat{J}_\alpha = \sum_{i=1}^3 \hat{S}_\alpha^{(i)}. \quad (2.40)$$

Como apresentado anteriormente, a adição de momento angular deve ser realizada entre pares, portanto o primeiro passo deve ser adicionar dois *spins*-1/2, o que resulta em dois valores possíveis para o momento angular total, expresso por J_{12} :

$$J_{12} = |S_1 - S_2| = 0 \quad \text{e} \quad J_{12} = S_1 + S_2 = 1. \quad (2.41)$$

O valor $J_{12} = 0$ implica em $m_{12} = m_1 + m_2 = 0$, com duas possibilidades:

$$m_1 = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad m_2 = -\frac{1}{2} \quad \text{ou} \quad m_1 = -\frac{1}{2} \quad \text{e} \quad m_2 = \frac{1}{2},$$

com elementos de base $|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$ e $|\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$, respectivamente. O elemento da base de Dicke correspondente à essas possibilidades é obtido através dos coeficientes de Clebsch-Gordan

$$C_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad C_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{0,0} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (2.42)$$

resultando no chamado estado de *singlete* (3) da base de momento angular para J_{12} :

$$|J_{12} = 0, m_{12} = 0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (2.43)$$

Para $J_{12} = 1$, três estados são possíveis, uma vez que $m_{12} = -1, 0, 1$. O estado onde $m_{12} = 1$ implica em $m_1 = m_2 = 1/2$, de modo que

$$|J_{12} = 1, m_{12} = 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (2.44)$$

e de modo similar:

$$|J_{12} = 1, m_{12} = -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (2.45)$$

O estado restante ($m_{12} = 0$) na base de Dicke depende dos coeficientes de Clebsch-Gordan

$$C_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{1,0} = C_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (2.46)$$

resultando no elemento

$$|J_{12} = 1, m_{12} = 0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (2.47)$$

Estes três estados são chamados estados de *triplete* (3). Deste modo, a base de Dicke resultante da adição de dois *spins*-1/2 é

$$\{|\uparrow\uparrow\rangle, (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}, (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}, |\downarrow\downarrow\rangle\}, \quad (2.48)$$

sendo esta base usualmente chamada base de *singlete-triplete*(26, 30). Agora resta adicionar os dois possíveis valores de J_{12} à S_3 . Para $J_{12} = 1$, outros dois valores de J são possíveis, sendo eles

$$J = |J_{12} - S_3| = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad J = J_{12} + S_3 = 3/2. \quad (2.49)$$

O estado $|J = 3/2, m = 3/2\rangle$ é expresso facilmente em termos dos estados de uma partícula:

$$|J = 3/2, m = 3/2\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle. \quad (2.50)$$

Os estados restantes onde $J = 3/2$ podem ser obtidos através do operador de abaixamento (2.22), notando que este operador total é composto pela soma

$$\hat{J}_- = \hat{S}_- \otimes \hat{I} \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{S}_- \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{S}_-. \quad (2.51)$$

Aplicando sucessivamente este operador sobre o estado (2.50) encontra-se

$$\begin{aligned} |J = 3/2, m = 1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ |J = 3/2, m = -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle) \\ |J = 3/2, m = -3/2\rangle &= |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Os demais estados da base de Dicke para J se dividem em $J = 1/2$ devido aos estados de triplete e singlete, sendo eles:

$$\begin{aligned} |J = 1/2, m = 1/2\rangle_{\text{triplete}} &= \frac{1}{\sqrt{6}} (-|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + 2|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ |J = 1/2, m = -1/2\rangle_{\text{triplete}} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - 2|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned} \quad (2.53)$$

e

$$\begin{aligned} |J = 1/2, m = 1/2\rangle_{\text{singlete}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) \\ |J = 1/2, m = -1/2\rangle_{\text{singlete}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle), \end{aligned} \quad (2.54)$$

formando um espaço de Hilbert de dimensão 8. Uma observação de grande importância na realização da adição de momento angular é a distinguibilidade das partículas que compõem o sistema. Como será discutido em mais detalhes no próximo capítulo, partículas de $spin-1/2$ são *férmions*, possuindo função de onda total antissimétrica em relação à permutação de partículas indistinguíveis. A anti-simetria da função de onda total para um sistema de muitos $spins-1/2$, composta pelo produto entre a função de onda espacial e a função de onda de $spin$, pode se apresentar de duas maneiras (3), uma delas sendo a função de onda espacial antissimétrica com função de onda de $spin$ simétrica, ou o contrário, função de onda espacial simétrica com função de onda de $spin$ antissimétrica. Para o caso onde os três spins tratados acima são indistinguíveis e com função de onda espacial antissimétrica, a base de momento angular total é reduzida, contendo apenas os termos onde $J = 3/2$, uma vez que são simétricos em relação a permutação de partículas.

2.5 SISTEMAS DE N SPINS-1/2 E ESTADOS COERENTES DE SPIN

O processo de adição de momento angular apresentado na seção anterior para um sistema de 3 $spins-1/2$ pode ser estendido para sistemas mais complexos, aumentando a dimensão do espaço de Hilbert e os possíveis valores de J para o momento angular total. Um modelo elementar no desenvolvimento deste trabalho, frequentemente empregado na introdução do conceito de *spin squeezing*, consiste num sistema de N $spins-1/2$ idênticos com estados simétricos de momento angular, implicando em funções de ondas espaciais antissimétricas em relação à permutação de partículas. Analogamente ao caso de 3 $spins$, as componentes coletivas de momento angular são construídas através da soma dos operadores de $spin$ para cada partícula:

$$\hat{J}_x = \sum_{i=1}^N \hat{S}_x^{(i)} \quad \hat{J}_y = \sum_{i=1}^N \hat{S}_y^{(i)} \quad \hat{J}_z = \sum_{i=1}^N \hat{S}_z^{(i)}, \quad (2.55)$$

sendo o comprimento de $spin$ $J = N/2$, uma vez que garante estados simétricos de momento angular total. Um estado geral deste sistema pode ser construído pelo produto tensorial do estado de cada partícula que compõe o sistema

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\psi^{(i)}\rangle, \quad (2.56)$$

onde $|\psi^{(i)}\rangle$ representa estados gerais da forma (2.30) com valores específicos de θ_i e ϕ_i para cada $spin$. Uma classe importante de estados deste sistema são os chamados Estados Coerentes de Spin (ECS) (31–33), definidos por produtos tensoriais entre estados de uma única partícula todos parametrizados por valores iguais de θ e ϕ :

$$|\theta, \phi\rangle = \bigotimes_{i=1}^N [\cos(\theta/2) |\downarrow\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2) |\uparrow\rangle], \quad (2.57)$$

resultando em coerência na direção ou alinhamento médio de *spin*, sendo ele especificado pelo vetor unitário²

$$\mathbf{n}_m = \frac{\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle}{|\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle|} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad (2.58)$$

sugerindo uma interpretação geométrica similar ao caso de um *spin*-1/2. Outra representação útil no tratamento de ECSs é realizada através da base de Dicke, introduzida na seção anterior. Nesta base os ECSs são compostos por combinações lineares de $|J, m\rangle$ com coeficientes dependentes dos ângulos de alinhamento do estado coerente a ser expandido:

$$|\theta, \phi\rangle = \sum_{m=-J}^J c_m(\theta) e^{-i(J+m)\phi} |J, m\rangle, \quad (2.59)$$

com função $c_m(\theta)$, uma distribuição binomial (34) definida por:

$$c_m(\theta) = \binom{2J}{J+m}^{\frac{1}{2}} \cos^{J-m}(\theta/2) \sin^{J+m}(\theta/2), \quad (2.60)$$

sendo o termo em parênteses um coeficiente binomial, objeto frequentemente encontrado em análise combinatória definido pela expressão

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}. \quad (2.61)$$

Dentre a gama de estados coerentes de *spin*, dois estados devem ser destacados: primeiramente o estado no qual todos os *spins* que compõe o sistema encontram-se no estado $|\downarrow\rangle$, dando origem ao estado coerente

$$|\theta = 0, \phi = 0\rangle = |J, -J\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\downarrow\rangle \quad (2.62)$$

seguido pelo estado onde todos os *spins* encontram-se no estado $|\uparrow\rangle$

$$|\theta = \pi, \phi = 0\rangle = |J, J\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\uparrow\rangle, \quad (2.63)$$

estados que além de ECSs, são auto-estados do operador \hat{J}_z . A partir destes estados, todos os outros estados coerentes de *spin* podem ser obtidos através de rotações da forma:

$$|\theta, \phi\rangle = (1 + |z|^2)^{-J} e^{z\hat{J}_+} |J, -J\rangle \quad (2.64)$$

onde

$$z = e^{-i\phi} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2}. \quad (2.65)$$

Como já citado, o vetor unitário \mathbf{n}_m de alinhamento médio de *spin* permite uma interpretação geométrica vetorial para ECSs semelhante ao caso de apenas um *spin*-1/2, o que sugere a existência de uma generalização do conceito de esfera de Bloch para N *spins*. Esta

² Compatível com as argumentações da Eq. (2.31) para uma única partícula de *spin*-1/2;

generalização é frequentemente realizada através de distribuições de quasiprobabilidade, as quais permitem uma representação em espaço de fase dos estados coerentes de *spin*. O método geral para construir estas distribuições para momento angular é apresentado na referência (35), aqui sendo apresentadas apenas as ferramentas básicas utilizadas na construção destas distribuições. Para formular distribuições de quasiprobabilidade para sistemas de momento angular J fixo, a base empregada é a base de tensores esféricos irredutíveis ou operadores de estado multipolar, na qual o estado do sistema, expresso através da matriz densidade $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, é expandido como

$$\hat{\rho} = \sum_{K=0}^{2J} \sum_{q=-K}^K \rho_{Kq} \hat{T}_K^q, \quad (2.66)$$

onde os tensores esféricos são explicitamente expressos por (35, 36)

$$\hat{T}_K^q = \sqrt{\frac{2K+1}{2J+1}} \sum_{m=-J}^J \sum_{m'=-J}^J C_{J,K;m,q}^{J,m'} |J, m'\rangle \langle J, m|, \quad (2.67)$$

sendo K inteiro e $C_{J,K;m,q}^{J,m'}$ os coeficientes de Clebsch-Gordan referentes ao acoplamento de um momento angular J com um momento angular K em um momento angular coletivo J . Os coeficientes da expansão em (2.66) são dados por

$$\rho_{Kq} = \text{Tr} \left[\hat{\rho} (\hat{T}_K^q)^\dagger \right], \quad (2.68)$$

referidos como funções características. Com estes ingredientes, diversas funções de distribuição de quasiprobabilidade podem ser construídas no contexto de operadores de momento angular (35). Uma destas distribuições é a função distribuição de quasiprobabilidade de Wigner $W(\theta, \phi)$ (37), definida como

$$W(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2J+1}{4\pi}} \sum_{K=0}^{2J} \sum_{q=-K}^K \rho_{Kq} Y_{Kq}(\theta, \phi), \quad (2.69)$$

onde $Y_{Kq}(\theta, \phi)$ são funções especiais chamadas de harmônicos esféricos (25, 29). É importante notar que substituindo ρ_{Kq} em (2.69) por $A_{Kq} = \text{Tr} \left[\hat{A} (\hat{T}_K^q)^\dagger \right]$, obtém-se uma distribuição $A_W(\theta, \phi)$ para o operador \hat{A} . A partir desta distribuição e junto à definição de distribuição de Wigner (2.69), a média de um operador pode ser obtida:

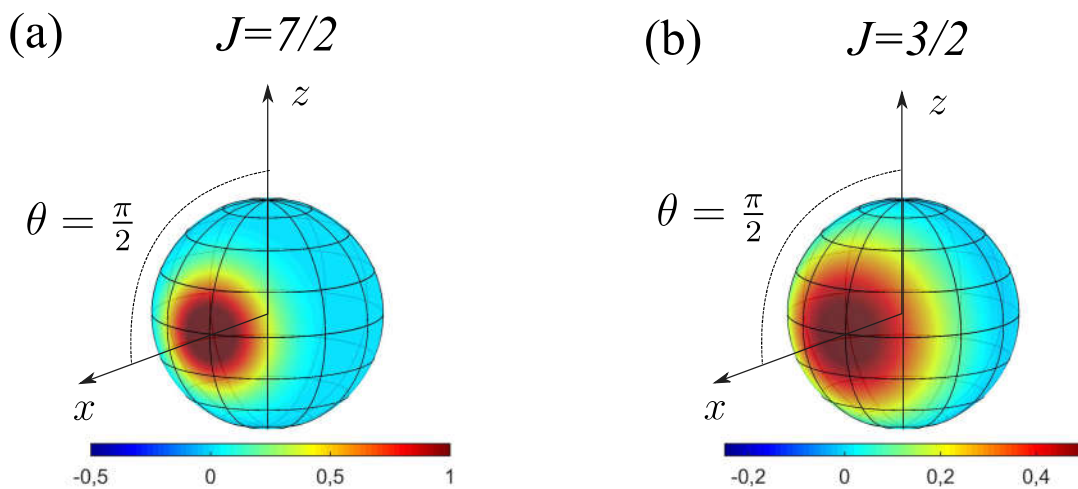
$$\langle \hat{A} \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{2J+1}} \int W(\theta, \phi) A_W(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi. \quad (2.70)$$

Esta média é obtida de maneira semelhante ao valor esperado de um observável clássico no espaço de fase, com $W(\theta, \phi)$ agindo de maneira análoga a uma distribuição de probabilidade neste espaço. Mas é preciso ter cuidado nesta analogia, uma vez que $W(\theta, \phi)$ não representa uma distribuição de probabilidade no sentido clássico usual, podendo até mesmo assumir valores negativos. Devido à isso, é referida como função de distribuição de *quasiprobabilidade*.

A função de distribuição de Wigner pode ser empregada na visualização de estados quânticos de momento angular com o uso de espaços de fase esféricos, uma vez que esta

distribuição possui dependência nas variáveis angulares θ e ϕ . Esta representação em espaço de fase representa uma generalização do conceito de esfera de Bloch para sistemas de N spins, sendo uma ferramenta conveniente na visualização de ECSs. A figura 2 apresenta a distribuição $W(\theta, \phi)$ no espaço de fase esférico para o estado coerente $|\pi/2, 0\rangle$ para $J = 7/2$ ($N = 7$ spins), e para $J = 3/2$ ($N = 3$).

Figura 2 – Distribuição de quasiprobabilidade de Wigner $W(\theta, \phi)$ do estado coerente de spin $|\pi/2, 0\rangle$ no espaço de fase calculada para um sistema que representa $N = 7$ partículas (a) e $N = 3$ partículas (b). A forma esférica das distribuições ilustra o fato de que as variâncias em qualquer direção ortogonal ao alinhamento médio em x é a mesma, tendo valor $J/2 = N/4$. Fonte: o autor.



Pela figura, duas vantagens desta representação ficam evidentes: as distribuições são centradas na direção de alinhamento médio de *spin*, neste caso na direção- x , e a forma circular destas distribuições para ECSs, o que indica a isotropia das variâncias de componentes de momento angular em qualquer direção perpendicular à direção de alinhamento médio de *spin*. Esta isotropia é uma característica dos estados coerentes de spin, uma vez que estes estados possuem variância $(\Delta J_{\perp})^2 = J/2$ em qualquer direção perpendicular ao alinhamento médio. Uma consequência do valor destas variâncias é a minimização da relação de Incerteza em direções perpendiculares a este alinhamento, resultando em relações da forma

$$(\Delta J_{\perp_1})^2 (\Delta J_{\perp_2})^2 = \frac{1}{4} \langle \hat{J}_{\mathbf{n}_m} \rangle^2 = \frac{1}{4} J^2, \quad (2.71)$$

Sendo \perp_1 e \perp_2 também perpendiculares entre si. Como será explicado no capítulo 3, o fenômeno de *spin squeezing* consiste na redução de uma destas variâncias em direção perpendicular, resultando em quebra de isotropia na distribuição de Wigner, achatando a forma esférica da distribuição. Deste modo, a representação em espaço de fase também se apresenta como uma ferramenta de visualização de estados *spin squeezed*.

3 CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN EM POÇOS-DUPLOS E REPRESENTAÇÃO DE SCHWINGER

Condensados de Bose-Einstein são sistemas atômicos de muitas partículas de grande interesse teórico e experimental, sendo aplicados como realização de diversos problemas físicos devido ao controle de parâmetros regulados pela geometria das armadilhas e interação entre partículas (18, 38–40). Dentre as possíveis geometrias de armadilhas, uma das mais importantes são armadilhas em poço-duplo, que possibilitam, em regimes específicos, a formação de dois condensados em modos espaciais distintos (41, 42). Um dos aspectos mais interessantes desta descrição de condensados em dois modos é a possibilidade de mapear todo o formalismo quântico de momento angular tratado no capítulo anterior em termos de operadores bosônicos através da chamada Representação de Schwinger (22, 25), que se apresenta como uma ponte entre as descrições destes sistemas a princípio tão distintos.

Este capítulo é destinado a definir este mapeamento entre as duas descrições, apresentando primeiramente a linguagem de Segunda Quantização bosônica, que é então empregada na obtenção do Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios para o Condensado em armadilhas de poço-duplo através da aproximação de dois modos para os operadores de campo do sistema. Em seguida, a representação de Schwinger é abordada, permitindo definir objetos da teoria de momento angular como operadores de momento angular e estados coerentes de spin em termos de operadores de criação e aniquilação bosônicas. O Hamiltoniano de Bose-Hubbard em termos de operadores de momento angular será empregado no capítulo 3, sendo um exemplo de realização de Hamiltonianos de *One-Axis Twisting*, empregados na produção de estados *spin squeezed*.

3.1 BÓSONS, FÉRMIONS E CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN

A Mecânica Estatística Quântica divide partículas quânticas em duas categorias (2): partículas com *spin* total nulo ou inteiro (unidades de \hbar) são chamadas *bósons*, enquanto partículas de *spin* semi-inteiro, *férmions*. No entanto essa divisão não tem origem devido ao valor de *spin*, mas às possibilidades de ocupação de estados quânticos em sistemas de partículas indistinguíveis (43). Bósons não apresentam restrições no número de ocupação de estados quânticos de uma partícula, obedecendo à chamada Estatística de Bose-Einstein, possuindo função de onda de muitos corpos simétrica em relação à permutação de duas partículas indistinguíveis. Em contraste, férmions obedecem à Estatística de Fermi-Dirac, onde duas partículas idênticas não podem ocupar um mesmo estado quântico (restrição conhecida como Princípio de Exclusão de Pauli (2)), com função de onda de muitos corpos anti-simétrica em relação à permutação. Estas propriedades de simetria desempenham um papel fundamental na área de átomos ultra-frios, átomos em armadilhas magneto-ópticas resfriados à temperaturas próximas do zero absoluto, tipicamente abaixo de décimos de micro-kelvins. As baixíssimas temperaturas são obtidas através da combinação de

técnicas de resfriamento a laser e por evaporação (44, 45). Experimentos com átomos ultra-frios são muito importantes em diversas áreas da Física como Ótica Atômica (46, 47), Simulação Quântica (48) e Física da Matéria Condensada, como por exemplo, na realização e manipulação de **Condensados de Bose-Einstein**.

O fenômeno de Condensação de Bose-Einstein ou BEC (do inglês *Bose-Einstein Condensation*) é proveniente da ocupação em escala macroscópica de bósons em um mesmo estado quântico, ocorrendo abaixo de uma determinada temperatura crítica (18–20). As primeiras noções deste fenômeno foram estabelecidas por A. Einstein em 1925, generalizando para partículas não-interagentes de massa não-nula o trabalho do físico indiano S.N. Bose a respeito da descrição quântica estatística para fótons. Após quase 70 anos, Cornell e Wieman (49) em 1995 obtiveram a primeira realização experimental de BECs, utilizando técnicas de resfriamento e armadilhamento magneto-ópticas aplicadas a um gás de átomos de Rubídio, expandindo o interesse nas propriedades teóricas e experimentais de condensados.

3.2 FORMALISMO DE SEGUNDA QUANTIZAÇÃO

A linguagem usual utilizada no tratamento de sistemas quânticos de partículas indistinguíveis é o formalismo de Segunda Quantização (43, 50), cujos objetos fundamentais são os operadores de criação e aniquilação, com relações de comutação ditadas pela espécie de partículas que compõem o sistema (bósons ou férmions). Neste trabalho o tratamento é restrito apenas à sistemas bosônicos. Assumindo a estrutura formal dos postulados da Mecânica Quântica (24), é feita referência ao conceito de *estados de ocupação*, simbolizados por

$$|n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots\rangle,$$

que representam n_{α_1} partículas no modo (ou nível) α_1 , n_{α_2} partículas no modo α_2 e assim por diante, formam uma base ortonormal de um espaço de Fock \mathcal{B} (43) associado ao sistema, chamada base de Fock. Além da definição de estado, os postulados da Mecânica Quântica abordam também o conceito de operadores, relacionados aos observáveis do sistema quântico. Como já citado, os operadores fundamentais do formalismo de Segunda Quantização são os operadores de criação e aniquilação definidos respectivamente por (50):

$$\hat{a}_k^\dagger |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_k}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha_k} + 1} |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, (n_{\alpha_k} + 1), \dots\rangle \quad (3.1)$$

e

$$\hat{a}_k |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_k}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha_k}} |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, (n_{\alpha_k} - 1), \dots\rangle \quad (3.2)$$

com $(\hat{a}_k^\dagger)^\dagger = \hat{a}_k$. O efeito destes operadores é adicionar ou remover partículas de um determinado modo de uma partícula α_k . As propriedades de simetria de estados bosônicos estão contidas nas relações de comutação destes operadores:

$$[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_l] = 0, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger] = \delta_{kl}. \quad (3.3)$$

Operadores de criação e aniquilação particularmente importantes em matéria condensada são os chamados operadores de campo $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$ e $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$, operadores que inserem e removem partículas na posição \mathbf{r} , seguindo as relações de comutação usuais para operadores bosônicos. Dada uma base $\{|\alpha_i\rangle\}$ de uma partícula, os operadores de campo podem ser expandidos nesta base:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_k \langle \mathbf{r} | \alpha_k \rangle \hat{a}_k = \sum_k \phi_{\alpha_k}(\mathbf{r}) \hat{a}_k, \quad (3.4)$$

onde $\phi_{\alpha_k}(\mathbf{r})$ é a representação em coordenadas espaciais da função de onda para o modo α_k de uma partícula. Os elementos da base de Fock podem ser construídos através da aplicação sucessiva de operadores de criação sobre o chamado estado de vácuo $|\emptyset\rangle$, elemento da base de Fock cujo o número de ocupação de todos os modos é nulo:

$$|n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots\rangle = \prod_k \frac{(\hat{a}_k^\dagger)^{n_{\alpha_k}}}{\sqrt{n_{\alpha_k}!}} |\emptyset\rangle. \quad (3.5)$$

A base de Fock é a base de autovetores dos chamados operadores de número

$$\hat{n}_{\alpha_k} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad (3.6)$$

cujos autovalores são os números de ocupação do modo α_k .

Tendo definido o espaço de Fock e seus elementos, é preciso construir operadores em Segunda Quantização que representem os observáveis na teoria quântica de muitos corpos. Uma classe importante de operadores são os chamados *operadores de um corpo*, obtidos pela soma da ação de um operador de uma única partícula aplicado sobre cada partícula do sistema. Em termos matemáticos, sendo $\hat{\lambda}$ um operador que atua no espaço de Hilbert \mathbb{H} de um sistema de uma única partícula, o operador de um corpo $\hat{\Lambda}$ correspondente para um sistema de N partículas é da forma:

$$\hat{\Lambda} = \sum_{i=0}^N \hat{\lambda}_i, \quad (3.7)$$

onde $\hat{\lambda}_i$ deve ser entendido como

$$\hat{\lambda}_i = \underbrace{\hat{1} \otimes \dots \otimes \hat{1}}_{(i-1) \text{ vezes}} \otimes \hat{\lambda} \otimes \hat{1} \otimes \dots \otimes \hat{1},$$

sendo $\hat{1}$ o operador identidade do espaço \mathbb{H} de uma partícula. Um exemplo importante de operador de um corpo é o operador energia cinética \hat{K} para um sistema de muitas partículas de massa m

$$\hat{K} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}_i^2, \quad (3.8)$$

já que a energia cinética total é obtida pela soma da energia cinética de cada partícula que compõe o sistema. Para sistemas de partículas indistinguíveis no formalismo de Segunda Quantização operadores de um corpo são expressos através dos elementos de matriz $\lambda_{kl} = \langle \alpha_k | \hat{\lambda} | \alpha_l \rangle$ e dos operadores de criação e aniquilação (50):

$$\hat{\Lambda} = \sum_{k,l} \lambda_{kl} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l. \quad (3.9)$$

Dois operadores de um corpo frequentemente necessários à descrição de BECs são o já citado operador de energia cinética, e operadores relativos à potenciais de armadilhamento $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$. Em termos de operadores de campo (base de posição), estes operadores são expandidos em:

$$\hat{K} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \quad (3.10)$$

e

$$\hat{V}_{\text{ext}} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) V_{\text{ext}} \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (3.11)$$

onde na expressão (3.10) foram utilizados os elementos de matriz do operador de momento linear para uma partícula na base de posição

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r} \rangle = -i \delta_{\mathbf{r}', \mathbf{r}} \nabla.$$

Estes dois operadores compõem Hamiltonianos utilizados na descrição de BECs armadilhados onde interações entre partículas podem ser desprezadas (BECs não-interagentes)(18).

Frequentemente em sistemas de muitos corpos, interações entre partículas representam um papel importante na descrição do sistema, principalmente interações que envolvam duas partículas por vez. Na teoria quântica, estas interações em pares são representadas por operadores atuando no espaço de Hilbert do sistema de duas partículas. Semelhantemente ao caso de operadores de um corpo, podemos definir *operadores de dois corpos* para N partículas, construídos pela soma das interações entre cada possível par que compõe o sistema:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{v}_{ij}, \quad (3.12)$$

onde \hat{v}_{ij} atua em elementos do espaço de Hilbert $\mathbb{H}_{ij} = \mathbb{H}_i \otimes \mathbb{H}_j$. A versão destes operadores em Segunda Quantização novamente envolve elementos de matriz dos operadores $[\hat{v}_{ij}]_{kmlq} = \langle k m | \hat{v}_{ij} | l q \rangle$ e operadores de criação e aniquilação:

$$\hat{V} = \sum_{k,l,m,q} [\hat{v}_{ij}]_{kmlq} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_q. \quad (3.13)$$

Operadores de dois corpos são empregados na teoria de Condensação de Bose-Einstein na descrição de potenciais de interação interatômicas no condensado, principalmente espalhamentos de baixa energia através de *pseudopotenciais* (18). Utilizando (3.13), potenciais de interação são expressos através de operadores de campo como:

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'). \quad (3.14)$$

O potencial de interação frequentemente utilizado é o pseudopotencial de contato

$$V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \approx g \delta(\mathbf{r}), \quad (3.15)$$

onde $g = 4\pi \hbar^2 a_s / m$, onde a_s é comprimento de espalhamento de onda-s (2). Em Segunda Quantização este potencial é expresso por:

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}). \quad (3.16)$$

Esta aproximação é válida quando a distância média entre partículas é muito maior que a distância de interação interatômica, o que ocorre em gases diluídos.

Tendo definido o formalismo geral de Segunda Quantização, Hamiltonianos para BECs podem ser analisados utilizando este ferramental. Estes Hamiltonianos geralmente são divididos em duas partes, sendo uma relativa aos operadores de um corpo como energia cinética e potencial externo, e a outra relativa à potenciais de interação entre átomos:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (3.17)$$

$$\hat{H}_0 = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (3.18)$$

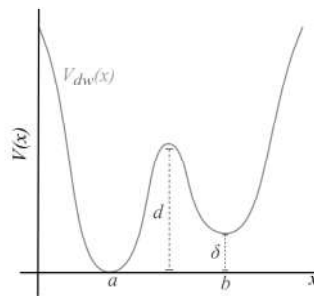
$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (3.19)$$

onde o potencial de interação utilizado foi o pseudopotencial de contato (expressão (3.15)). Tendo a descrição, é preciso especificar o sistema bosônico de interesse, definindo os termos de potencial (potencial de armadilhamento, interação entre partículas) do Hamiltoniano e os regimes de interesse (sistemas interagentes, não-interagente). No presente trabalho, o sistema abordado são os chamados **BECs em poço duplo**.

3.3 BECS EM POTENCIAIS DE POÇO DUPLO E HAMILTONIANO DE BOSE-HUBBARD

Um dos sistemas mais importantes e discutidos na área de Condensação de Bose-Einstein consiste em BECs armadilhados em potenciais de poço duplo (38, 39, 41, 42, 51–55). O termo potencial de poço duplo é empregado aqui para potenciais gerais que possuam dois pontos de mínimo (poços) e um ponto de máximo (barreira) alinhados num mesmo eixo, conforme a figura 3. O Hamiltoniano em termos dos operadores de campo para BECs em poços duplos possui a

Figura 3 – Forma genérica de um potencial de poço duplo com mínimos em a e b , barreira de altura d e assimetria entre os poços caracterizada pelo parâmetro δ .



forma geral de Hamiltoniano (3.17), onde o potencial a ser inserido em \hat{H}_0 deve ser o potencial de poço duplo $V_{dw}(\mathbf{r})$ utilizado no armadilhamento.

3.3.1 APROXIMAÇÃO DE DOIS MODOS

Para potenciais onde a barreira de potencial (parâmetro d na figura 3) é alta em relação à escala de energia das partículas armadilhadas, o sistema é comumente descrito através do chamado *modelo de dois modos* (41, 42, 51, 56). Este modelo consiste em considerar que as partículas que compõem o sistema podem ocupar apenas o estado fundamental de uma partícula $\phi_g(\mathbf{r})$ e o primeiro estado excitado $\phi_e(\mathbf{r})$ de Bogoliubov (18), proveniente do termo de interações interatômicas no condensado. Matematicamente, isto significa expandir o operador de campo $\hat{\Psi}$ em

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \phi_g(\mathbf{r}) \hat{a}_g + \phi_e(\mathbf{r}) \hat{a}_e, \quad (3.20)$$

onde $\hat{a}_{(g,e)}$ são os operadores bosônicos de aniquilação de partículas nos modos $\phi_{(g,e)}$. Como em (56), assume-se que as funções de onda sejam reais e que $\phi_g(\mathbf{r})$ seja simétrica e $\phi_e(\mathbf{r})$ assimétrica no intervalo que define o potencial. Uma maneira mais conveniente de interpretar o sistema é através do número de partículas em cada poço, ou seja, utilizar a base de Fock de ocupação dos poços, que serão referidos como poços a e b . Nesta base de Fock, os operadores \hat{a}_g e \hat{a}_e são expandidos em termos de operadores de aniquilação de partículas em cada poço, expressos por \hat{a} e \hat{b} , na forma:

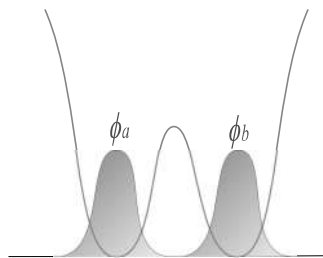
$$\hat{a}_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{b}) \quad (3.21)$$

e

$$\hat{a}_e = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{b}), \quad (3.22)$$

ou seja, superposições dos modos de ocupação em cada poço. Nesta base, o modelo de dois modos pode ser visto sobre outro ângulo: se a barreira entre os poços for alta o suficiente, cada poço pode ser visto como um modo espacial localizado, com funções de onda distintas formadas por superposições do estado fundamental e excitado de uma partícula (figura 4). Reescrevendo o

Figura 4 – **Modos espaciais** a e b . No modelo de dois modos cada poço representa um modo espacial localizado.



operador de campo (3.20) na base de Fock:

$$\hat{\Psi} = \frac{\phi_g + \phi_e}{\sqrt{2}} \hat{a} + \frac{\phi_g - \phi_e}{\sqrt{2}} \hat{b}. \quad (3.23)$$

Aplicando (3.23) no Hamiltoniano (3.17) e ignorando os termos cruzados em $\phi_g\phi_e$ (sobreposições desprezíveis devido à altura da barreira), podemos reescrevê-lo como

$$\hat{H} = \frac{(\epsilon_e + \epsilon_g)}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b}) - \frac{\Delta}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{b}^\dagger\hat{b}) - \frac{\Omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{a}) + \frac{\chi}{4}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{b}^\dagger\hat{b})^2, \quad (3.24)$$

onde os coeficientes são

$$\begin{aligned} \epsilon_{(g,e)} &= \int d\mathbf{r} \phi_{(g,e)}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{dw}(\mathbf{r}) \right) \phi_{(g,e)}(\mathbf{r}), \\ \Omega &= (\epsilon_e - \epsilon_g), \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\Delta = 2 \int d\mathbf{r} \phi_g(\mathbf{r}) V_{dw}(\mathbf{r}) \phi_e(\mathbf{r}),$$

$$\chi = 2g \int d\mathbf{r} [\phi_g(\mathbf{r})]^4,$$

integrais espaciais dependentes das funções de onda $\phi_{(g,e)}(\mathbf{r})$.

3.3.2 HAMILTONIANO DE BOSE-HUBBARD DE DOIS SÍTIOS

Modificando o Hamiltoniano (3.24) através da subtração do primeiro termo à direita da igualdade (o qual depende apenas do número total de partículas), equivalente a um deslocamento na energia fundamental, o Hamiltoniano obtido é o chamado Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios:

$$\hat{H}_{BH} = \frac{\chi}{4}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{b}^\dagger\hat{b})^2 - \frac{\Delta}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{b}^\dagger\hat{b}) - \frac{\Omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{a}), \quad (3.26)$$

um Hamiltoniano de grande importância em Física da Matéria Condensada (57, 58). O Hamiltoniano \hat{H}_{BH} possui três contribuições, cada uma associada às constantes Δ , Ω e χ . O termo de coeficiente Δ depende da forma do potencial de armadilhamento, conforme (3.25). Para o caso onde os poços são simétricos, a integral Δ é nula, uma vez que o integrando é ímpar. Em casos $\Delta \neq 0$, ou seja, poços assimétricos, este termo insere uma quebra de degenerescência no estado fundamental (19). O termo de coeficiente Ω é uma superposição das possibilidades de uma partícula "pular" de um poço para outro, ou seja, é o termo relacionado ao tunelamento de partículas entre os modos. Já o termo quadrático de coeficiente χ se refere às interações entre as partículas que compõem o condensado. Dois casos são possíveis conforme a espécie de partículas que compõem o condensado: interações repulsivas $\chi > 0$, ou interações atrativas $\chi < 0$. Fisicamente, a interação é definida como atrativa ou repulsiva dependendo de qual das duas interações interatômicas principais é dominante: a repulsão coulombiana ou forças atrativas de van der Waals (18). No regime onde Ω e Δ são desprezíveis, equivalente a poços simétricos com barreira de potencial muito acima da escala de energia das partículas, apenas as interações interatômicas são relevantes:

$$\hat{H}_{BH} \rightarrow \frac{\chi}{4}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{b}^\dagger\hat{b})^2.$$

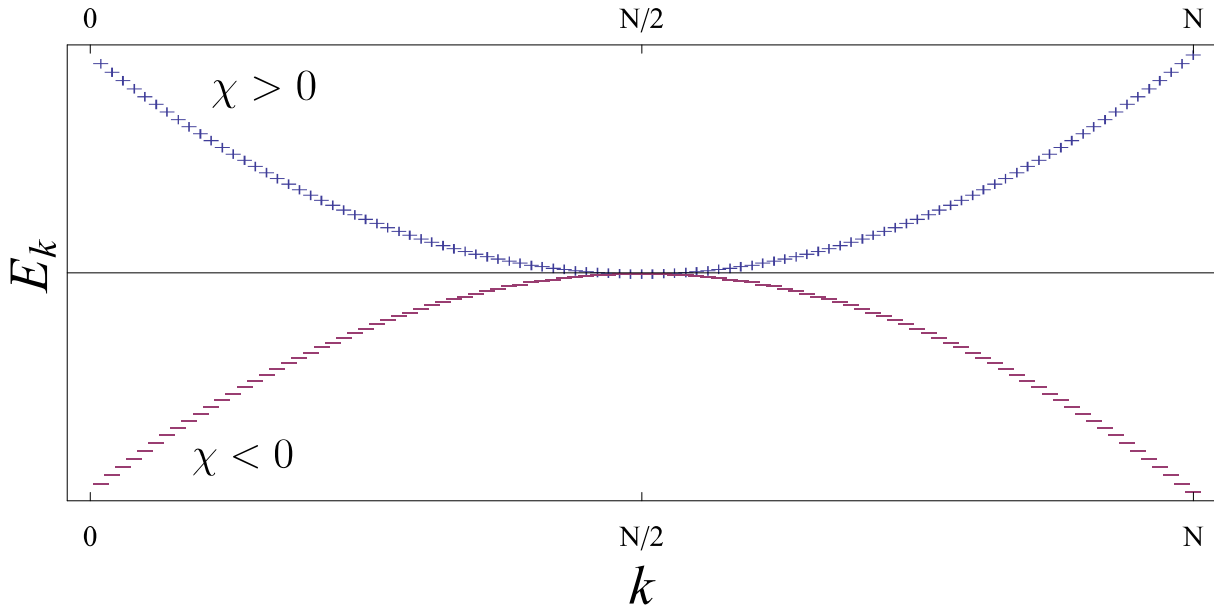
Neste caso, o sinal de χ impõe duas possibilidades para o estado fundamental do sistema de poço duplo. Neste regime \hat{H}_{BH} é diagonal na base de Fock

$$\{|n_a, n_b\rangle\} = \{|k, N - k\rangle\}$$

para $N = n_a + n_b$ fixo, com espectro dado por

$$E_k = \frac{\chi}{4}(2k - N)^2. \quad (3.27)$$

Figura 5 – Energia E_k em função de k para $N = 100$.



Para $\chi > 0$, (3.27) é minimizada para $k = N/2$, ou seja, o estado fundamental é o estado de Fock $|N/2, N/2\rangle$, com metade das partículas ocupando o poço a e a outra metade ocupando b . Já no caso $\chi < 0$ os mínimos são em $k = 0$ e $k = N$, sendo o estado fundamental a superposição

$$\frac{|N, 0\rangle + |0, N\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.28)$$

frequentemente chamada de estados de gato de Schroedinger (*Schroedinger cat-states*).

3.4 REPRESENTAÇÃO DE SCHWINGER

Uma das conexões entre sistemas de momento angular e sistemas bosônicos é a representação de Schwinger, que consiste no mapeamento de operadores de momento angular em operadores de criação e aniquilação bosônicos de dois modos distintos (22, 25). Como discutido no item anterior, BECs em poços-duplos podem ser analisados em termos de dois modos espaciais, apresentando-se como uma excelente aplicação de sistemas bosônicos de muitas partículas indistinguíveis simulando sistemas de momento angular. Uma das maneiras de construir a representação de Schwinger é através de operadores de um corpo em Segunda Quantização. Como discutido no primeiro capítulo, os operadores das componentes de momento angular coletivo para um sistema de N spins-1/2 são construídos pela soma dos operadores de spin de cada partícula, do mesmo modo que operadores de um corpo no contexto de bósons indistinguíveis. Isto indica que, dado um sistema onde um bóson pode ocupar dois modos distintos é possível construir

operadores que simulam o efeito dos operadores cartesianos de spin $\hat{S}_\alpha = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_\alpha$ ($\alpha = x, y, z$) em estados de spin. Na base dos modos $|a\rangle$ e $|b\rangle$ de uma partícula, tais operadores bosônicos de uma partícula possuem mesma representação matricial que seus análogos de spin ($\hbar = 1$):

$$(\hat{S}_x)_{\text{boson}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\hat{S}_y)_{\text{boson}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (\hat{S}_z)_{\text{boson}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Em um sistema de N partículas indistinguíveis podendo ocupar estes dois modos, estes operadores se combinam, formando um operador de um corpo:

$$\hat{J}_\alpha = \sum_{k,l=a,b} \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_\alpha)_{kl} \hat{k}^\dagger \hat{l}, \quad (3.30)$$

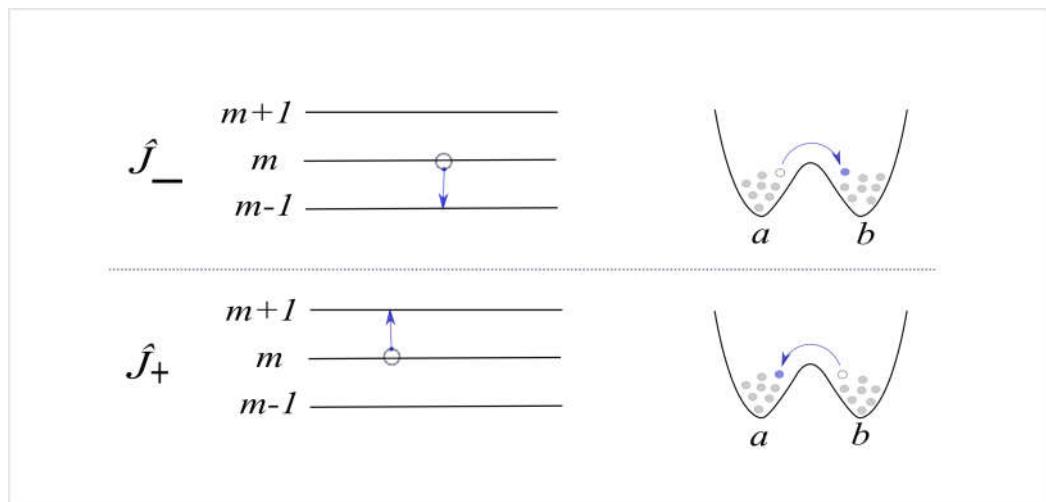
conforme (3.9). Estes operadores \hat{J}_α de um corpo são os análogos bosônicos dos operadores de componentes de momento angular para $J = N/2$, respeitando as mesmas relações de comutação (2.13). A forma explícita destes operadores em termos dos operadores bosônicos é

$$\hat{J}_z = \frac{1}{2}(\hat{n}_a - \hat{n}_b) \quad \hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a}) \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{a}^\dagger \hat{b} - \hat{b}^\dagger \hat{a}) \quad (3.31)$$

com análogos de operadores de levantamento e abaixamento

$$\hat{J}_+ = \hat{a}^\dagger \hat{b} \quad \hat{J}_- = \hat{b}^\dagger \hat{a}. \quad (3.32)$$

Figura 6 – Ilustração do efeito dos operadores \hat{J}_\pm em estados de Dicke e em BECs em poço duplo. Em sistemas bosônicos estes operadores retiram uma partícula de um modo e inserem em outro, equivalente a diminuir ou aumentar o autovalor m em sistemas de spin.



Sendo o operador \hat{J}_z diagonal na base de Fock, sendo seus autovalores dependentes da diferença entre o número de ocupação dos modos, variando de $-N/2$ a $N/2$, fica clara a relação destes autovalores com os autovalores m do operador análogo em momento angular:

$$m = \frac{1}{2}(n_a - n_b) \quad -J \leq m \leq J \quad J = \frac{1}{2}(n_a + n_b), \quad (3.33)$$

com estas expressões fica clara a relação entre as bases de Fock e de Dicke $\{|J, m\rangle\}$, cujos elementos podem ser escritos em termos de operadores bosônicos como

$$|J, m\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^{J+m}(\hat{b}^\dagger)^{J-m}}{\sqrt{(J+m)!(J-m)!}} |\emptyset\rangle, \quad (3.34)$$

através da expressão (3.5). Estados coerentes de spin podem ser expressos em termos de operadores bosônicos através da representação na base de Dicke, ou seja, através da expressão

$$|\theta, \phi\rangle = \sum_{m=-J}^J \binom{2J}{J+m}^{\frac{1}{2}} \cos^{J-m}(\theta/2) \sin^{J+m}(\theta/2) e^{-i(J+m)\phi} |J, m\rangle \quad (3.35)$$

em conjunto com (3.34):

$$|\theta, \phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^J}} \sum_{m=-J}^J \binom{2J}{J+m} (\hat{a}^\dagger \cos \theta/2)^{J+m} (\hat{b}^\dagger \sin(\theta/2))^{J-m} e^{-i(J+m)\phi} |\emptyset\rangle \quad (3.36)$$

reescrevendo esta expressão utilizando $n_a = J + m$ e $n_b = N - n_a = J - m$ derivada de (3.33):

$$|\theta, \phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{n_a=0}^N \binom{N}{n_a} (\hat{a}^\dagger \cos \theta/2)^{n_a} (\hat{b}^\dagger \sin(\theta/2))^{(N-n_a)} e^{-in_a\phi} |\emptyset\rangle. \quad (3.37)$$

Multiplicando pela fase global $e^{iN\phi/2}$, de acordo com a expansão binomial

$$(x + y)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k y^{n-k} \quad (3.38)$$

o estado coerente de spin em termos de operadores bosônicos é dado por

$$|\theta, \phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\hat{a}^\dagger e^{-i\phi/2} \sin \theta/2 + \hat{b}^\dagger e^{i\phi/2} \cos \theta/2 \right)^N |\emptyset\rangle. \quad (3.39)$$

Os estados onde $|m| = J$ são equivalentes a todas as partículas ocupando um único modo:

$$|0, \phi\rangle = |J, -J\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{a}^\dagger)^N |\emptyset\rangle = |N, 0\rangle \quad (3.40)$$

$$|\pi, \phi\rangle = |J, J\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{b}^\dagger)^N |\emptyset\rangle = |0, N\rangle. \quad (3.41)$$

Com a Representação de Schwinger, o Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios (3.26) pode ser representado em termos de operadores de momento angular:

$$\hat{H}_{BH} = \chi \hat{J}_z^2 - \Delta \hat{J}_z - \Omega \hat{J}_x, \quad (3.42)$$

onde as interações entre partículas são representadas pelo termo não-linear em \hat{J}_z^2 , a assimetria dos poços pelo termo em \hat{J}_z e o tunelamento por \hat{J}_x . Esta representação do Hamiltoniano de Bose-Hubbard será empregada no próximo capítulo, onde se mostra uma ferramenta importante na realização de estados *spin squeezed*.

4 ESTADOS *SPIN SQUEEZED*

Correlações quânticas e emaranhamento (6) representam recursos importantes em áreas como Computação e Informação Quântica (4, 59), áreas de intensa pesquisa recente, além de se apresentarem como conceitos importantes no estudo dos fundamentos da Mecânica Quântica. Portanto, ferramentas que indiquem ou quantifiquem a presença de tais correlações recebem grande interesse teórico e experimental. Em sistemas de momento angular, uma destas ferramentas é o chamado fenômeno de *spin squeezing*, uma estratégia quântica inicialmente idealizada por Kitagawa e Ueda (11) em 1993, inspirados pelo conceito de *squeezing* no contexto de Ótica Quântica (60). A noção geral introduzida por Kitagawa e Ueda envolve redistribuições de flutuações em direções ortogonais de momento angular coletivo devido à introdução de correlações quânticas entre os componentes do sistema. No ano seguinte, em 1994, Wineland, *et al.* (13) apontaram outro uso do conceito de *spin squeezing*: melhoria na precisão de medidas interferométricas, como por exemplo, em espectroscopia Ramsey, além de aplicações em relógios atômicos (61). Posteriormente, diversos autores generalizaram a noção de *spin squeezing* de modo a conectar este conceito com emaranhamento quântico (7, 14–16, 62), como já citado, um recurso de grande interesse em áreas contemporâneas da Mecânica Quântica.

Experimentalmente, diversos sistemas quânticos distintos são empregados na produção de *spin squeezing*, dentre eles *ensembles* atômicos que fazem uso de interações átomo-campo (63), interação dipolar entre amostras atômicas (64), núcleos quadrupolares em sistemas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) (21) e através de Condensados de Bose-Einstein (38). O modo usual de produção de estados *spin squeezed* (ESSs) é através de evoluções de estados coerentes devidas a Hamiltonianos não-lineares, que introduzem as correlações necessárias na redução de flutuações em uma direção ortogonal ao alinhamento médio de momento angular. Dentre a classe de Hamiltonianos não-lineares, o mais simples e frequentemente empregado é o Hamiltoniano de *One-Axis Twisting* (OAT), explicado em mais detalhes no decorrer do capítulo. Como um dos objetivos deste trabalho é explorar a conexão entre sistemas de *spin* e sistemas atômicos de muitas partículas indistinguíveis, foco será dado para a implementação de Hamiltonianos de OAT em BECs em poço-duplo e núcleos quadrupolares em RMN (tema abordado no capítulo seguinte), sendo *spin squeezed* um exemplo adequado de realização de sistemas de momento angular em sistemas bosônicos.

Este capítulo introduz os conceitos fundamentais e propriedades de ESSs conforme definidos nas referências (11, 13), discutindo os Hamiltonianos não-lineares utilizados para gerar *spin squeezing*, focando em Hamiltonianos de *one-axis twisting*, utilizados para obter *spin squeezing* em Condensados de Bose-Einstein e amostras de núcleos quadrupolares em RMN.

4.1 SQUEEZING NO CONTEXTO DE ÓTICA QUÂNTICA

Antes de abordar o conceito de *spin squeezing* conforme idealizado por Kitagawa e Ueda, é instrutivo abordar primeiramente a noção de *squeezing* num contexto de Ótica Quântica (17,60), uma vez que as definições básicas no contexto de momento angular foram inspiradas pelo *squeezing* fotônico (em alguns casos referido como *squeezing* bosônico (17)). O primeiro passo na construção da noção de *squeezing* é considerar a relação de comutação entre os operadores \hat{X} e \hat{P} , amplitudes de posição e momento linear (adimensionais), respectivamente. Em termos de operadores bosônicos de criação e aniquilação de fótons estes operadores podem ser expandidos em

$$\hat{X} = \hat{a} + \hat{a}^\dagger \quad \text{e} \quad \hat{P} = i(\hat{a}^\dagger - \hat{a}), \quad (4.1)$$

deixando evidente a relação de comutação

$$[\hat{X}, \hat{P}] = 2i. \quad (4.2)$$

De acordo com a expressão (2.2), este comutador resulta na relação de Incerteza

$$(\Delta X)^2 (\Delta P)^2 \geq 1, \quad (4.3)$$

para as amplitudes de posição e momento. A classe de estados que minimiza a relação de Incerteza entre estes dois observáveis é composta pelos chamados Estados Coerentes $|\alpha\rangle$ (65–67), que podem ser definidos como *autokets* do operador de aniquilação de fótons:

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle, \quad (4.4)$$

sendo α um número complexo. Com esta definição encontra-se de maneira direta as variâncias para as amplitudes de posição $(\Delta X)^2 = 1$, e momento $(\Delta P)^2 = 1$, para estes estados. Devido ao fato de minimizarem a relação de Incerteza, estados coerentes são os estados quânticos considerados mais próximos de estados clássicos (68).

A estratégia de *squeezing* neste contexto consiste em obter estados quânticos, chamados estados *squeezed*, cuja variância em uma das amplitudes seja menor do que a variância obtida para estados coerentes, embora acarretando em aumento de flutuações na amplitude conjugada. Ou seja, estados *squeezed* são aqueles onde $(\Delta X)^2 < 1$ ou $(\Delta P)^2 < 1$, embora respeitando a relação de Incerteza (4.3) (17, 60, 68, 69). Um método geral de produção de estados *squeezed* consiste na aplicação dos chamados operadores de *squeezing* $\hat{S}(\eta)$ em estados coerentes iniciais. Tais operadores de *squeezing* são operadores unitários de evolução temporal construídos através de Hamiltonianos não-lineares em termos dos operadores de criação e aniquilação bosônicos, ou seja $\hat{S}(\eta) = \exp(-i\hat{H}t)$. Dois casos específicos de tais operadores (17) são aqueles construídos através dos Hamiltonianos

$$\hat{H} = i(g(\hat{a}^\dagger)^2 - g^* \hat{a}^2), \quad (4.5)$$

que dá origem ao operador de *squeezing*

$$\hat{S}(\eta) = \exp\left(-\frac{1}{2}\eta(\hat{a}^\dagger)^2 + \frac{1}{2}\eta^* \hat{a}^2\right) \quad (4.6)$$

com parâmetro complexo η definido por $|\eta| = 2|g|t$, e através do Hamiltoniano de interação de Kerr (70)

$$\hat{H} = \kappa(\hat{a}^\dagger \hat{a})^2, \quad (4.7)$$

com

$$\hat{S}(\eta) = \exp\left(-\frac{1}{2}\eta(\hat{a}^\dagger \hat{a})^2\right), \quad (4.8)$$

com parâmetro temporal $\eta = 2\kappa t$. Estes conceitos fundamentais de *squeezing* fotônico assim como a produção destes estados através de Hamiltonianos não-lineares foram generalizados por Kitagawa e Ueda no contexto de momento angular, como será abordado a seguir. Dentre as aplicações de *squeezing* em Ótica Quântica estão o aumento de precisão interferométrica em espectroscopia (71), além de seu uso em processos de computação e informação quântica com variáveis contínuas (72, 73).

4.2 DEFINIÇÃO DE *SPIN SQUEEZING* SEGUNDO KITAGAWA E UEDA

Com base nos conceitos apresentados na seção anterior, Kitagawa e Ueda (11) definiram a noção de *squeezing* no contexto de observáveis de momento angular, denominada *spin squeezing*, que consiste na diminuição de flutuações de uma componente de momento angular coletivo em direção perpendicular à direção de alinhamento médio. Para definir *spin squeezing* de maneira mais formal, considera-se um sistema de $N > 1$ *spins*-1/2 idênticos com estados simétricos de momento angular, como discutido na seção 2.5. Neste sistema, o momento angular total é caracterizado pelo número quântico $J = N/2$, com componentes de momento angular total construídas através de somas de operadores de *spin* individuais:

$$\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{k} = \hat{J}_k = \sum_{i=1}^N \hat{S}_k^{(i)}. \quad (4.9)$$

As regras de comutação (2.13), que podem ser generalizadas para qualquer conjunto de três direções ortogonais, resultam em relações de incerteza que podem ser expressas na forma geral

$$(\Delta J_\alpha)^2 (\Delta J_\beta)^2 \geq \frac{1}{4} \langle \hat{J}_\gamma \rangle^2, \quad (4.10)$$

com (α, β, γ) representando as três direções mutuamente ortogonais referidas anteriormente. De maneira similar ao caso de estados coerentes no contexto de fótons, o estado coerente de *spin* com alinhamento na direção da componente \hat{J}_γ minimiza a relação de incerteza (4.10), resultando em variâncias $(\Delta J_\alpha)^2 = (\Delta J_\beta)^2 = J/2$ para todo o conjunto de direções ortogonais à direção de alinhamento. Considerando, por exemplo, um estado coerente cujo alinhamento médio se encontra na direção- x do sistema de coordenadas adotado, a relação de incerteza entre as variâncias de \hat{J}_y e \hat{J}_z é dada por

$$(\Delta J_z)^2 (\Delta J_y)^2 = J^2/4, \quad (4.11)$$

com $(\Delta J_z)^2 = (\Delta J_y)^2 = J/2$.

Como uma extensão direta do conceito de *squeezing* fotônico, Kitagawa e Ueda definiram ESSs como estados que garantem variância abaixo do valor estabelecido por ECS em alguma direção perpendicular ao alinhamento médio $\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle$, ou seja, $(\Delta J_\alpha)^2 < J/2$ ou $(\Delta J_\beta)^2 < J/2$. Outra maneira conveniente de definir estados *spin squeezed* consiste em empregar um *parâmetro de spin squeezing*, definido pelos autores como

$$\xi_S^2 = \frac{\min [(\Delta J_\perp)^2]}{J/2}, \quad (4.12)$$

onde $\min [(\Delta J_\perp)^2]$ representa a menor das variâncias em direção perpendicular. Através deste parâmetro, ESSs são definidos como todos os estados onde $\xi_S^2 < 1$, enquanto estados coerentes apresentam $\xi_S^2 = 1$.

4.2.1 CÁLCULO DO PARÂMETRO ξ_S^2

Como mostra a expressão (4.12), para o cálculo do parâmetro ξ_S^2 é necessário encontrar a menor variância em direção perpendicular. O método aqui empregado para encontrar esta variância mínima segue da referência (17). O primeiro passo na obtenção deste valor consiste em estabelecer a direção de alinhamento médio

$$\mathbf{n}_m = \frac{\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle}{|\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle|} = \frac{\langle \hat{J}_x \rangle \mathbf{n}_x + \langle \hat{J}_y \rangle \mathbf{n}_y + \langle \hat{J}_z \rangle \mathbf{n}_z}{\sqrt{\langle \hat{J}_x \rangle^2 + \langle \hat{J}_y \rangle^2 + \langle \hat{J}_z \rangle^2}}, \quad (4.13)$$

versor que pode ser escrito em coordenadas esféricas de maneira usual:

$$\mathbf{n}_m = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta). \quad (4.14)$$

Dado o alinhamento, é necessário estabelecer o plano no qual a direção de menor variância está contida. Este plano é expandido por versores perpendiculares a \mathbf{n}_m . Duas possibilidades de tais versores são

$$\mathbf{n}_1 = (-\sin \phi, \cos \phi, 0) \quad (4.15)$$

e

$$\mathbf{n}_2 = (\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, -\sin \theta). \quad (4.16)$$

Tendo o plano no qual a direção de menor variância está contido, o problema pode ser simplificado estabelecendo um subespaço vetorial bidimensional expandido pela base $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$, cujos elementos neste subespaço podem ser escritos como $\mathbf{n}_1 = (1, 0)$ e $\mathbf{n}_2 = (0, 1)$. Todos os outros elementos deste subespaço podem ser obtidos por rotações do tipo:

$$\mathbf{n}_\varphi = \mathbf{n}_1 R(\varphi)^T = \cos \varphi \mathbf{n}_1 + \sin \varphi \mathbf{n}_2, \quad (4.17)$$

com matrizes de rotação

$$R(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

O cálculo da variância de momento angular para estas direções contidas no plano resulta em

$$(\Delta J_{n_\varphi})^2 = \langle \hat{J}_{n_\varphi}^2 \rangle = (\Delta J_{n_1})^2 \cos^2 \varphi + (\Delta J_{n_2})^2 \sin^2 \varphi + \sin 2\varphi \text{Cov}(\hat{J}_{n_1}, \hat{J}_{n_2}), \quad (4.19)$$

sendo a covariância, dependente de um anticomutador, objeto definido por $\{\hat{X}, \hat{Y}\} = \hat{X}\hat{Y} + \hat{Y}\hat{X}$, dada por

$$\text{Cov}(\hat{J}_{n_1}, \hat{J}_{n_2}) = \frac{1}{2} \langle \{\hat{J}_{n_1}, \hat{J}_{n_2}\} \rangle - \langle \hat{J}_{n_1} \rangle \langle \hat{J}_{n_2} \rangle = \frac{1}{2} \langle \{\hat{J}_{n_1}, \hat{J}_{n_2}\} \rangle, \quad (4.20)$$

uma vez que médias de componentes de momento angular em direções perpendiculares ao alinhamento médio são nulas. Definindo a matriz

$$\Gamma = \begin{pmatrix} (\Delta J_{n_1})^2 & \text{Cov}(\hat{J}_{n_1}, \hat{J}_{n_2}) \\ \text{Cov}(\hat{J}_{n_1}, \hat{J}_{n_2}) & (\Delta J_{n_2})^2 \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

estas variâncias podem ser expressas de maneira conveniente como

$$(\Delta J_{n_\varphi})^2 = \mathbf{n}_\varphi \Gamma \mathbf{n}_\varphi^T = \mathbf{n}_1 R(\varphi) \Gamma R^T(\varphi) \mathbf{n}_1^T. \quad (4.22)$$

O problema restante no cálculo do parâmetro ξ_S^2 é encontrar o valor de φ que minimiza $(\Delta J_{n_\varphi})^2$. Este ângulo é aquele que resulta em matriz de rotação que diagonaliza a matriz Γ , deixando a na forma

$$R\Gamma R^T = \Gamma_d = \begin{pmatrix} \gamma_- & 0 \\ 0 & \gamma_+ \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

com autovalores dados por

$$\gamma_\pm = \frac{1}{2} \left[\langle \hat{J}_{n_1}^2 + \hat{J}_{n_2}^2 \rangle \pm \sqrt{\langle \hat{J}_{n_1}^2 - \hat{J}_{n_2}^2 \rangle^2 + 4 \text{Cov}^2(\hat{J}_{n_1}, \hat{J}_{n_2})} \right], \quad (4.24)$$

sendo γ_- o menor entre estes autovalores. O ângulo que realiza esta diagonalização é chamado de ângulo de *spin squeezing* ótimo, sendo dado por

$$\varphi_\perp = \begin{cases} \frac{1}{2} \arccos \left(\frac{-A}{\sqrt{A^2+B^2}} \right), & \text{se } B \leq 0 \\ \pi - \frac{1}{2} \arccos \left(\frac{-A}{\sqrt{A^2+B^2}} \right), & \text{se } B > 0 \end{cases}, \quad (4.25)$$

onde $A = \langle \hat{J}_{n_1}^2 - \hat{J}_{n_2}^2 \rangle$ e $B = 2 \text{Cov}(\hat{J}_{n_1}, \hat{J}_{n_2})$ são definidos de modo a simplificar esta expressão. Portanto, a menor variância entre as direções encontradas no plano é

$$\min [(\Delta J_\perp)^2] = \mathbf{n}_1 \Gamma_d \mathbf{n}_1^T = \gamma_-, \quad (4.26)$$

de modo que o parâmetro de *spin squeezing* de Kitagawa e Ueda é dado explicitamente por

$$\xi_S^2 = \frac{1}{J} \left[\langle \hat{J}_{n_1}^2 + \hat{J}_{n_2}^2 \rangle - \sqrt{\langle \hat{J}_{n_1}^2 - \hat{J}_{n_2}^2 \rangle^2 + 4 \text{Cov}^2(\hat{J}_{n_1}, \hat{J}_{n_2})} \right], \quad (4.27)$$

bastando então conhecer valores esperados de quantidades envolvendo duas direções mutuamente ortogonais contidas no plano perpendicular ao alinhamento médio. Por exemplo, no caso de alinhamento médio na direção- x , o parâmetro ξ_S^2 pode ser calculado através do conhecimento das médias de \hat{J}_y^2 e \hat{J}_z^2 , assim como da covariância entre \hat{J}_y e \hat{J}_z .

4.3 SPIN SQUEEZING DEFINIDO PARA APLICAÇÕES EM INTERFEROMETRIA

Além da relação de estados *spin squeezed* com correlações quânticas, *spin squeezing* também se apresenta como um recurso útil em metrologia, possibilitando medidas mais precisas em sistemas interferométricos. Aqui, o parâmetro de *squeezing* definido por Wineland, *et al.* (13) será apresentado de uma maneira mais geral, em termos da sensibilidade à rotações de um estado de momento angular, conforme a referência (17). Supondo um estado de momento angular que, por praticidade, possui alinhamento médio na direção- z , de modo que $\langle \hat{J}_y \rangle = \langle \hat{J}_x \rangle = 0$. Realizando uma rotação por um ângulo φ em torno do eixo- x no sistema, busca-se obter o desvio $\Delta\varphi$, chamado sensibilidade de fase, que permite estabelecer qual a sensibilidade de medição dos estados do sistema quando sujeitos à rotação. Para obter a sensibilidade de fase, no quadro de Heisenberg, ou seja, onde os estados do sistema estão fixos e os operadores rotacionados, calcula-se a expressão para o operador rotacionado \hat{J}_{yR} :

$$\hat{J}_{yR} = e^{i\varphi\hat{J}_x} \hat{J}_y e^{-i\varphi\hat{J}_x} = \cos \varphi \hat{J}_y - \text{sen } \varphi \hat{J}_z. \quad (4.28)$$

Através da expressão anterior, lembrando que o estado é fixo e com alinhamento em z , estabelece-se que

$$\langle \hat{J}_{yR} \rangle = -\text{sen } \varphi \langle \hat{J}_z \rangle, \quad (4.29)$$

e

$$\langle J_{yR}^2 \rangle = \cos^2 \varphi \langle J_y^2 \rangle + \text{sen}^2 \varphi \langle J_z^2 \rangle - \frac{1}{2} \text{sen } 2\varphi \langle \{\hat{J}_y, \hat{J}_z\} \rangle, \quad (4.30)$$

de modo que a variância deste operador é

$$(\Delta J_{yR})^2 = \cos^2 \varphi (\Delta J_y)^2 + \text{sen}^2 \varphi (\Delta J_z)^2 - \text{sen } 2\varphi \text{Cov}(\hat{J}_y, \hat{J}_z). \quad (4.31)$$

Tendo em mãos a expressão (4.29) e a variância $(\Delta J_{yR})^2$, a sensibilidade de fase pode ser obtida através da fórmula de propagação de erro $\Delta x = \Delta f(x) / |\partial \langle f(x) \rangle / \partial x|$, resultando em

$$\Delta\varphi = \frac{\Delta J_{yR}}{|\cos \varphi \langle \hat{J}_z \rangle|}, \quad (4.32)$$

que no caso onde $\varphi \rightarrow 0$ é simplificada para

$$\Delta\varphi = \frac{\Delta J_y}{|\langle \hat{J}_z \rangle|}. \quad (4.33)$$

Levantando a suposição de alinhamento médio em z em razão de um alinhamento geral $\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle$, a sensibilidade de fase é

$$\Delta\varphi_{\perp} = \frac{\Delta J_{\perp}}{|\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle|}, \quad (4.34)$$

onde \hat{J}_{\perp} representa um operador de momento angular na direção perpendicular ao alinhamento médio. A definição de *spin squeezing* novamente é relacionada à estados coerentes de *spin* através da sensibilidade de fase para ECSs

$$\Delta\varphi = \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (4.35)$$

para qualquer direção perpendicular ao alinhamento, valor chamado em inglês de *standard quantum limit* (SQL) ou *shot-noise limit*, que estabelece um limite teórico de precisão em medidas de momento angular utilizando estados mais próximos de estados clássicos. O parâmetro de *squeezing* de Wineland, *et al.* é definido como a razão entre o quadrado da sensibilidade de fase de um estado quântico genérico na direção de menor variância e o quadrado do valor de *shot-noise limit*:

$$\xi_R^2 = \frac{(\Delta\varphi_{\min})^2}{1/N} = N \frac{\min [(\Delta J_{\perp})^2]}{|\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle|^2}. \quad (4.36)$$

Este parâmetro define estados *spin squeezed* como estados quânticos cuja a sensibilidade de fase é menor do que o valor estabelecido pelo SQL, ou seja, onde $\xi_R^2 < 1$. Desta forma, ESSs tornam-se um recurso de aumento de precisão interferométrica em relação à estados que não apresentam correlações quânticas. Os dois parâmetros de *spin squeezing* apresentados estão relacionados pela expressão

$$\xi_R^2 = \left(\frac{J}{|\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle|} \right)^2 \xi_S^2 \quad (4.37)$$

estabelecendo uma hierarquia entre os parâmetros

$$\xi_S^2 \leq \xi_R^2, \quad (4.38)$$

Vencido o *shot-noise limit* é cabível a questão: existe um limite de sensibilidade de fase estabelecido pela Mecânica Quântica? A resposta é sim, devido à relação de Incerteza de Heisenberg. No caso de alinhamento médio em z , as desigualdades

$$(\Delta J_x)^2 (\Delta J_y)^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \hat{J}_z \rangle| \quad (4.39)$$

e

$$J^2 = N^2/4 \geq \langle \hat{J}_x^2 \rangle \geq (\Delta J_x)^2, \quad (4.40)$$

juntamente com a definição de ξ_R^2 definem este limite:

$$\xi_R^2 \geq \frac{1}{N}, \quad (4.41)$$

chamado de limite de Heisenberg.

4.4 SPIN SQUEEZING E SEPARABILIDADE

Sendo correlações quânticas um recurso fundamental em diversas áreas da Mecânica Quântica, ferramentas que permitam afirmar se um estado produzido em um experimento produz ou não correlações de interesse são de grande importância. Kitagawa e Ueda (11), na definição do conceito de *spin squeezing* já destacavam o papel de correlações quânticas na redução das variâncias em comparação aos casos onde correlações quânticas não estão presentes. Emaranhamento *multipartite*, aquele que envolve correlações entre mais de dois subsistemas,

é relacionado diretamente com a não-separabilidade de um estado quântico (6). Se um estado quântico pode ser escrito como

$$\hat{\rho} = \sum_k p_k \hat{\rho}_k^{(1)} \otimes \hat{\rho}_k^{(2)} \otimes \cdots \otimes \hat{\rho}_k^{(N)}, \quad (4.42)$$

ou seja, como uma soma de produtos de estados individuais dos N subsistemas que compõe o sistema total ele é dito *separável*. Estados que não podem ser decompostos na forma (4.42) são ditos não-separáveis em relação à esta escolha de subsistemas. Diversas abordagens foram introduzidas para identificar a relação de *spin squeezing* e separabilidade (? , 14, 16, 17). Em (?) *spin squeezing* é conectado com a não-separabilidade de estados quânticos através do parâmetro

$$\xi_{R'}^2 = \frac{N(\Delta J_\alpha)^2}{\langle J_\beta \rangle^2 + \langle J_\gamma \rangle^2}, \quad (4.43)$$

onde α , β e γ representam direções ortogonais arbitrárias. Como é demonstrado pelos autores, estados onde este parâmetro é menor do que um são estados quânticos não-separáveis, não podendo ser escrito na forma (4.42). Nas referências (15, 16), os autores generalizam o conceito de *spin squeezing* conectando-o com separabilidade através de oito desigualdades baseadas apenas no conhecimento das médias e variâncias das componentes de momento angular coletivo do sistema de spins. Estas desigualdades são:

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle + \langle \hat{J}_y^2 \rangle + \langle \hat{J}_z^2 \rangle \leq N(N+2)/4, \quad (4.44)$$

$$(\Delta J_x)^2 + (\Delta J_y)^2 + (\Delta J_z)^2 \geq N/2, \quad (4.45)$$

$$\langle \hat{J}_i^2 \rangle + \langle \hat{J}_j^2 \rangle - N/2 \leq (N-1)(\Delta J_k)^2, \quad (4.46)$$

$$(N-1)((\Delta J_i)^2 + (\Delta J_j)^2) \geq \langle \hat{J}_k^2 \rangle + N(N-2)/4, \quad (4.47)$$

onde i , j e k representam todas as permutações possíveis de (x, y, z) . A violação de qualquer uma das desigualdades por um estado quântico, acusa que este estado não é separável. É possível relacionar estas desigualdades com as demais definições de *spin squeezing* conectadas com emaranhamento.

4.5 O HAMILTONIANO DE ONE-AXIS TWISTING

Conforme apresentado na seção 4.1, uma das técnicas utilizadas na produção de *squeezing* fotônico é através da aplicação de operadores de *squeezing* em estados coerentes, operadores de evolução temporal com Hamiltonianos não-lineares nos operadores de criação e aniquilação, necessários na introdução de correlações que geram as características não-clássicas dos estados *squeezed*. Com base nesta técnica, Kitagawa e Ueda (11) propuseram um método análogo para

produzir *spin squeezing* em sistemas de momento angular, através dos Hamiltonianos de *One-Axis Twisting* (OAT) e *Two-Axis Countertwisting* (TAC). Este método, do mesmo modo que o caso fotônico, consiste na geração de estados *squeezed* através de transformações contínuas em um estado coerente (de *spin*) inicial. Novamente, estas transformações são realizadas através de operadores de evolução temporal empregando Hamiltonianos não-lineares, neste caso em operadores de momento angular coletivo, uma vez que estes termos não-lineares representam interações internas do sistema, gerando as correlações necessárias para quebrar a "classicalidade" dos estados coerentes de *spin*. Os Hamiltonianos não-lineares mais simples empregados (17) na produção de *spin squeezing* são os chamados Hamiltonianos de *One-Axis Twisting*, Hamiltonianos com dependência quadrática em um operador de momento angular coletivo em direção perpendicular à direção média de *spin* (11, 17, 74), inspirados no Hamiltoniano de Kerr (4.7). Mais especificamente, frequentemente são empregados ECSs com alinhamento na direção- x e Hamiltonianos com dependência quadrática no operador de momento angular coletivo \hat{J}_z :

$$\hat{H}_{\text{OAT}} = \chi \hat{J}_z^2 = \frac{\chi}{4} \sum_{i,j} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)}, \quad (4.48)$$

sendo χ o parâmetro de não-linearidade. Os termos entre pares $\hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)}$, descritos por operadores locais de cada subsistema, indicam a introdução de correlações entre pares, responsáveis pela quebra do caráter clássico dos ECS, onde não há correlações entre os subsistemas. O operador de evolução temporal construído a partir deste Hamiltoniano é

$$\hat{U}(\mu) = \exp\left(-\frac{1}{2}i\mu\hat{J}_z^2\right), \quad (4.49)$$

tendo papel análogo ao operador de *squeezing* (4.8), com parâmetro temporal $\mu = 2\chi t$, chamado de ângulo de *spin squeezing*. A evolução do sistema com ECS inicial $|\theta = \pi/2, \phi = 0\rangle$ a partir deste operador de evolução

$$|\psi_\mu\rangle = e^{-\frac{1}{2}i\mu\hat{J}_z^2} |\pi/2, 0\rangle, \quad (4.50)$$

produz uma dinâmica periódica, chamada ciclo de *spin squeezing*, que pode ser caracterizada pela variação de parâmetro de *spin squeezing* ξ_S^2 no intervalo de ângulo de OAT $0 \leq \mu \leq 2\pi$, conforme a figura 7. Nesta figura, os ciclos de *spin squeezing* representados são produzidos por Hamiltonianos de OAT em sistemas de baixa dimensionalidade, com $J = 3/2$ e $J = 7/2$, respectivamente. Em ambos os ciclos ocorre uma diminuição gradativa do parâmetro ξ_S^2 até um ponto de mínimo, com subsequente aumento do parâmetro e posteriormente ocorrem intervalos, em torno do meio do ciclo, onde *spin squeezing* não aparece no sistema ($\xi_S^2 = 1$). Após este intervalo, o sistema retorna a um regime de *squeezing* novamente alcançando um ponto de mínimo e retornando para $\xi_S^2 = 1$, reiniciando o ciclo.

Além de produzir *spin squeezing* como definido por Kitagawa e Ueda, o Hamiltoniano de OAT também produz estados que permitem medidas abaixo do *sub-shot noise*, ou seja, durante o ciclo existem intervalos onde $\xi_R^2 < 1$, embora com duração menor do que quando comparado com ξ_S^2 , como mostra a figura 8, novamente para sistemas $J = 3/2$ e $J = 7/2$. Após

o período onde $\xi_R^2 < 1$, este parâmetro rapidamente diverge, uma vez que durante a evolução o comprimento médio de momento angular $|\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle|$ é reduzido durante a dinâmica.

Figura 7 – Parâmetro de *spin squeezing* ξ_S^2 em função de μ para $J = 3/2$ em (a) e $J = 7/2$ em (b), através do Hamiltoniano de OAT. Fonte: o autor.

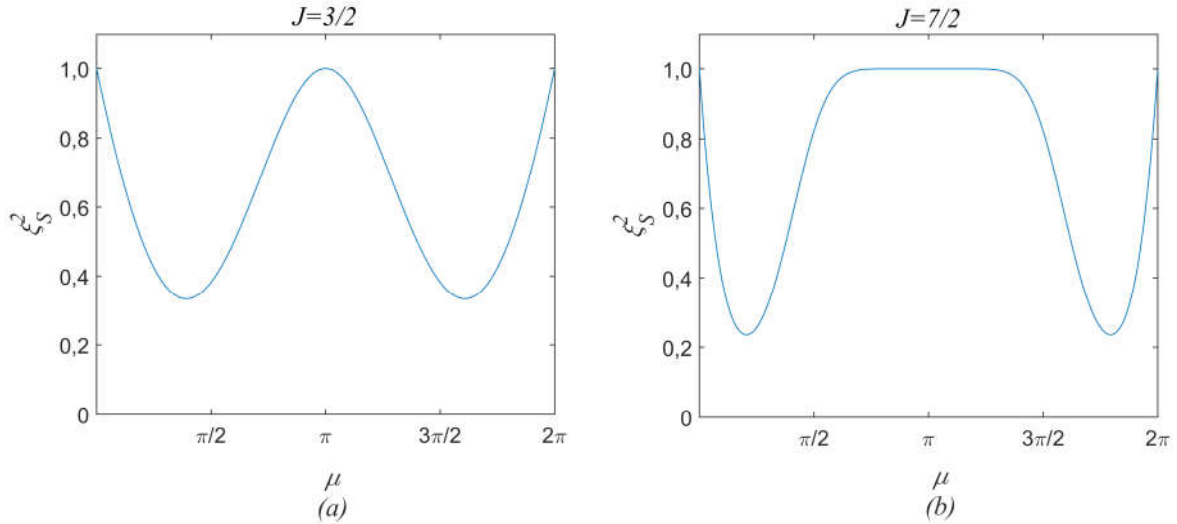
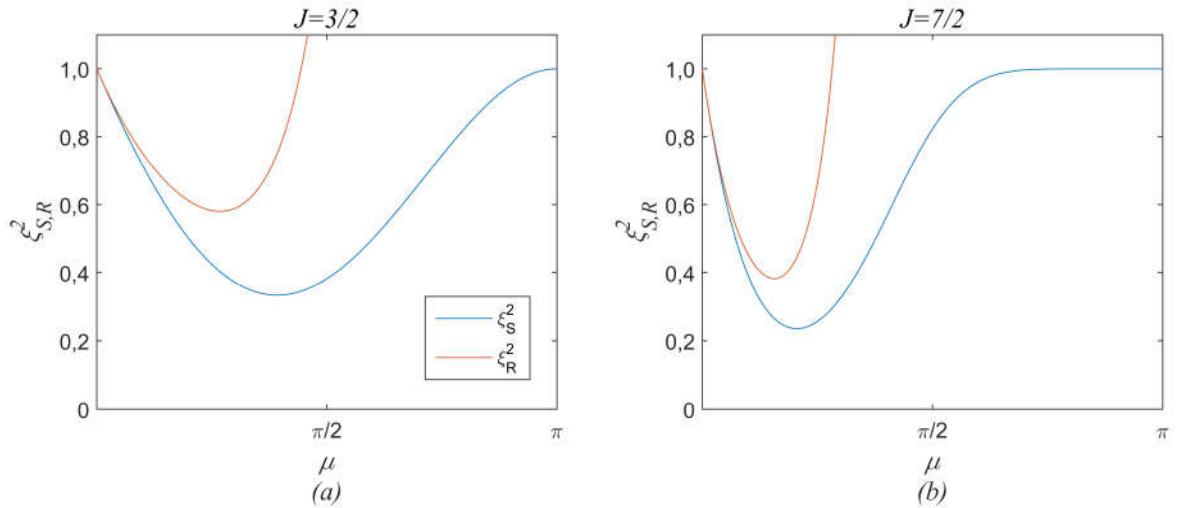


Figura 8 – Parâmetros de *spin squeezing* ξ_S^2 e ξ_R^2 em função de μ para $J = 3/2$ em (a) e $J = 7/2$ em (b), através do Hamiltoniano de OAT. Fonte: o autor.



Como já citado no capítulo 2, a função de distribuição de quasiprobabilidade de Wigner é uma ferramenta conveniente de visualização de estados quânticos em espaço de fase. No caso de ESSs, esta representação gráfica apresenta como característica distribuições elípticas, achatadas na direção de menor variância, diferente do caso discutido para ECSs, uma vez que *spin squeezing* envolve a redistribuição das flutuações em direções ortogonais ao alinhamento médio, quebrando a isotropia própria dos estados coerentes de *spin*. A figura 9 representa graficamente

a distribuição de quasiprobabilidade de Wigner para três ângulos de OAT calculada para um sistema de $N = 7$ spins, ou seja, $J = 7/2$. O primeiro ângulo é $\mu = 0$, ou seja, estado inicial do sistema $|\pi/2, 0\rangle$. A distribuição é centrada no eixo- x sendo circular, indicando que a variância em qualquer direção perpendicular ao alinhamento médio de spin é a mesma, tendo valor igual a $J/2$. O segundo ângulo é $\mu = 0.65$, ângulo no qual o estado é maximamente *squeezed*. Neste ângulo, o efeito de torção devido ao Hamiltoniano e o efeito de spin squeezing ficam evidentes na distribuição, que se torna uma elipse na superfície da esfera devido ao aumento e compressão das variâncias em direções perpendiculares. Além disso, nota-se que existe um ângulo de *squeezing* φ entre a direção de variância máxima e o eixo- x , sendo este ângulo dependente do tempo. Por fim, para $\mu = 1.1$ a distribuição começa a perder a forma elíptica, sendo consideravelmente torcida. A figura 10 apresenta as distribuições $W(\theta, \phi)$ variando em intervalos de $\pi/4$ para a evolução por Hamiltoniano de OAT para um sistema com $J = 3/2$, ilustrando a forma geral de um ciclo de *spin squeezing* no espaço de fase.

Uma das implementações dos Hamiltonianos de OAT é através de BECs em poços-duplos onde o Hamiltoniano de Bose-Hubbard (3.26) pode ser empregado. Como já explicado, através da representação de Schwinger o Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios é expresso em termos de operadores de momento angular por (equação (3.42)):

$$\hat{H}_{BH} = \chi \hat{J}_z^2 - \Delta \hat{J}_z - \Omega \hat{J}_x.$$

Casos onde os poços são simétricos ($\Delta = 0$) e onde a altura da barreira entre poços é alta em relação a energia das partículas, ou seja, probabilidade de tunelamento entre poços desprezível ($\Omega \rightarrow 0$), apenas o termo não-linear devido à interação entre partículas é relevante, de modo que o Hamiltoniano de Bose-Hubbard é simplificado para um Hamiltoniano de OAT. Toda a dinâmica para Hamiltonianos de OAT discutida acima pode ser realizada em sistemas de Condensados de Bose-Einstein através deste Hamiltoniano em conjunto com os estados coerentes de spin em termos de operadores bosônicos como expressos na equação (3.39), sendo este estado no caso abordado dado por

$$|\pi/2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^N (N!)}} \left(\hat{a}^\dagger + \hat{b}^\dagger \right)^N |\emptyset\rangle. \quad (4.51)$$

Deste modo, *spin squeezing* é um dos exemplos de conexão entre sistemas de momento angular, como RMN e sistemas de átomos excitados com sistemas bosônicos de dois níveis, como Condensados de Bose-Einstein em poço-duplo.

De modo a obter o maior grau de *squeezing*, outros Hamiltonianos podem ser empregados. Um deles consiste em utilizar o Hamiltoniano de OAT em conjunto com um termo de controle composto pelo operador coletivo de momento angular na direção de alinhamento médio (75), sendo no caso discutido acima o operador \hat{J}_x :

$$\hat{H} = \chi \hat{J}_z^2 + c \hat{J}_x. \quad (4.52)$$

Outro hamiltoniano empregado é o chamado Hamiltoniano de *Two-Axis Countertwisting* (TACT) introduzido por Kitagawa e Ueda inspirados no Hamiltoniano fotônico (4.5) (11, 17), onde a

torção é realizada simultaneamente nas duas direções ortogonais ao alinhamento médio de *spin*, sendo no caso onde o alinhamento é na direção-*z* dado por:

$$\hat{H} = \frac{\chi}{2i}(\hat{J}_+^2 - \hat{J}_-^2). \quad (4.53)$$

Este Hamiltoniano apresenta como vantagem a obtenção de máximo *squeezing* em relação aos outros Hamiltonianos, assim como o fato de que o ângulo de *squeezing* não se altera no tempo, embora sua implementação não seja tão direta quando comparada a Hamiltonianos de OAT.

Figura 9 – Evolução da função de quasiprobabilidade de Wigner na esfera de Bloch para $J = 7/2$. O estado coerente inicial é representado em (a), com distribuição circular. Em (b), onde $\mu = 0.65$, fica evidente o efeito de *squeezing* na direção apontada pelas setas, assim como o ângulo de *squeezing* φ . A figura (c) é referente a $\mu = 1.1$, onde a distribuição está consideravelmente torcida, perdendo parte do caráter elíptico. Fonte: o autor.

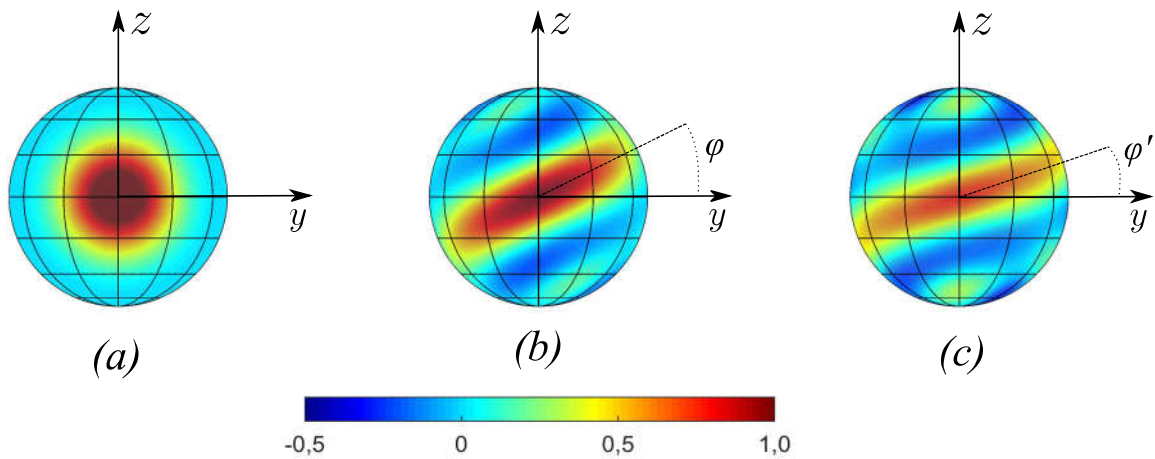
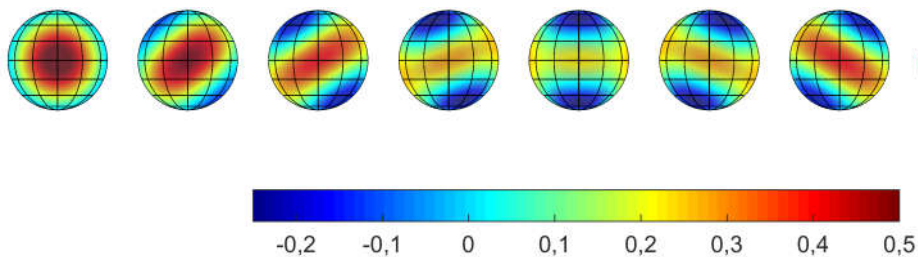


Figura 10 – Distribuição de quasiprobabilidade de Wigner para o ciclo de *spin squeezing* para $J = 3/2$ ($N = 3$ partículas). As distribuições apresentadas são relativas a ângulos de OAT iniciando em $\mu = 0$ até 2π em intervalos de $\pi/4$. Nas figuras, o eixo-*x* aponta para fora da página. Fonte: o autor.



5 NÚCLEOS QUADROPOLARES EM RMN

Uma das técnicas experimentais envolvendo princípios quânticos de maior aplicabilidade em diversas áreas da ciência e tecnologia é a técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), sendo explorada em diversos campos de pesquisa, como Física de Materiais, Química e até mesmo Medicina (76–78). No contexto de Mecânica Quântica tem se mostrado uma ferramenta versátil na realização de protocolos e algoritmos quânticos, contribuindo para o avanço das áreas de Computação e Informação Quântica (79–81). Outra importante aplicação de RMN no contexto de Mecânica Quântica é a possibilidade de simular sistemas quânticos experimentalmente (82), utilizando processos externos e controláveis do sistema como campos estáticos e pulsos de radiofrequência, assim como interações intrínsecas do sistema, como por exemplo o acoplamento quadrupolar, a interação dipolo-dipolo, entre outras. RMN se mostra então, além de uma ferramenta útil no estudo de estruturas nucleares e moleculares, uma maneira de explorar experimentalmente fenômenos e dinâmicas quânticas de sistemas aparentemente completamente distintos. Neste capítulo é descrita a teoria básica de RMN de núcleos quadrupolares, demonstrando a possibilidade de simular o Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios definido neste trabalho no contexto de BECs em poços-duplos em sistemas de spins nucleares, além de mostrar sua aplicação na produção de *spin squeezing* através de Hamiltonianos de OAT.

5.1 SPINS NUCLEARES EM CAMPOS MAGNÉTICOS EXTERNOS

A técnica de RMN tem como base a interação de momentos magnéticos de núcleos atômicos com campos magnéticos externos, juntamente com os efeitos perturbativos devido à fatores intrínsecos do sistema (23). A interação principal é a chamada interação Zeeman, onde momentos magnéticos nucleares interagem com um campo externo estático. Os momentos magnéticos nucleares $\boldsymbol{\mu}_m$ são relacionados com o momento angular do núcleo através de

$$\boldsymbol{\mu}_m = \gamma \hat{\mathbf{I}}, \quad (5.1)$$

sendo a constante de proporcionalidade γ chamada de razão giromagnética e o operador vetorial $\hat{\mathbf{I}} = (\hat{I}_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z)$, geralmente chamado spin nuclear, um momento angular efetivo gerado pelo acoplamento entre spins e momentos angulares orbitais de partículas que compõe o núcleo, obedecendo a todas as propriedades usuais de momento angular introduzidas no capítulo 2. O Hamiltoniano de interação de um momento magnético com um campo magnético é dado em termos de um produto escalar entre os vetores de momento e campo magnético:

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}_m \cdot \mathbf{B} = -\gamma \left(B_x \hat{I}_x + B_y \hat{I}_y + B_z \hat{I}_z \right), \quad (5.2)$$

sendo simplificado no caso de um sistema de coordenadas onde o campo B_0 aponta na direção- z para:

$$\hat{H}_0 = -\gamma B_0 \hat{I}_z = -\omega_0 \hat{I}_z \quad (5.3)$$

onde $\omega_0 = \gamma B_0$ é a chamada frequência de Larmor, sendo a frequência natural do sistema. A dinâmica dos spins nucleares no campo estático pode ser manipulada através de pulsos perturbativos devidos à aplicação de campos magnéticos dependentes do tempo em direções perpendiculares à direção do campo estático, induzindo transições entre níveis de energia. Tais pulsos são referidos como pulsos de radiofrequência, devido à frequência típica destes pulsos se encontrarem na faixa de rádio do espectro eletromagnético. Para um campo magnético típico $\mathbf{B}_{rf} = B_{rf}(\cos \omega_{rf}t, -\sin \omega_{rf}t)$, o termo perturbativo do Hamiltoniano é:

$$\hat{H}_{rf} = -\omega_1(\hat{I}_x \cos \omega_{rf}t - \hat{I}_y \sin \omega_{rf}t) \quad (5.4)$$

onde $\omega_1 = \gamma B_{rf}$ e ω_{rf} é a frequência do pulso aplicado. Levando em conta estas duas interações, o Hamiltoniano de RMN para núcleos interagindo com campos externos é dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{rf} = -\omega_0 \hat{I}_z - \omega_1(\hat{I}_x \cos \omega_{rf}t - \hat{I}_y \sin \omega_{rf}t). \quad (5.5)$$

Até o momento, apenas interações com campos externos foram consideradas, mas em muitos casos interações internas possuem papel fundamental, quebrando degenerescências ou introduzindo correlações no sistema. Dentre estas interações, duas são de interesse nesse trabalho: o acoplamento quadrupolar e a interação internuclear do tipo dipolo-dipolo magnético, que será abordada no capítulo seguinte.

5.2 ACOPLAMENTO QUADRUPOLAR

O acoplamento quadrupolar tem como origem a energia de interação entre um núcleo com distribuição de carga (devida aos prótons) assimétrica com um potencial elétrico externo, devido aos elétrons em torno do núcleo ou íons externos, variando de acordo com a orientação do núcleo em relação a esse potencial externo (23). Classicamente, a energia de interação entre uma distribuição de carga $\rho(\mathbf{r})$ e um potencial eletrostático externo $V(\mathbf{r})$ é dada por (30)

$$E = \int \rho(\mathbf{r})V(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (5.6)$$

Considerando que o centro de massa das partículas que formam a distribuição de carga localiza-se na origem do sistema cartesiano de coordenadas, o potencial eletrostático pode ser expandindo em série de Taylor em torno deste ponto:

$$V(\mathbf{r}) = V(0) + \sum_{\alpha=x,y,z} \left(\frac{\partial V}{\partial \alpha} \right)_{\mathbf{r}=0} \alpha + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial \alpha \partial \beta} \right)_{\mathbf{r}=0} \alpha\beta + \dots \quad (5.7)$$

Dentre as contribuições para este potencial, está o termo quadrupolar

$$V^{(2)} = \frac{1}{2!} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} V_{\alpha\beta} \alpha\beta, \quad (5.8)$$

onde é introduzida a notação

$$V_{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial \alpha \partial \beta} \right)_{\mathbf{r}=0} \quad (5.9)$$

para os gradientes de campo elétrico. Substituindo o potencial total $V(\mathbf{r})$ pela contribuição quadrupolar $V^{(2)}$ na expressão (5.10), encontra-se a energia eletrostática de interação devida a este termo:

$$E^{(2)} = \int \rho(\mathbf{r})V^{(2)}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} V_{\alpha\beta} \int \alpha\beta\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (5.10)$$

Esta expressão é simplificada no caso onde não há cargas elétricas na origem através da equação de Laplace

$$\nabla^2 V^{(2)} = 0, \quad (5.11)$$

que estabelece, quando calculada na origem, que

$$V_{xx} + V_{yy} + V_{zz} = 0. \quad (5.12)$$

Com esta restrição a energia de acoplamento quadrupolar fica na forma

$$E^{(2)} = \frac{1}{6} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} V_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta}, \quad (5.13)$$

onde é introduzido o parâmetro

$$Q_{\alpha\beta} = \int (3\alpha\beta - \delta_{\alpha\beta}r^2) d\mathbf{r}. \quad (5.14)$$

O formalismo definido anteriormente é aplicado para núcleos atômicos onde $I > 1/2$, chamados núcleos quadrupolares, através do análogo quântico da distribuição de cargas $\rho(\mathbf{r})$, definido como

$$\rho^{\text{op}} = e \sum_k \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_k), \quad (5.15)$$

onde o somatório em k refere-se à soma da contribuição de cada próton de carga e pertencente ao núcleo, uma vez que nêutrons não possuem carga, e $\hat{\mathbf{r}}_k = (\hat{x}_k, \hat{y}_k, \hat{z}_k)$ é o operador quântico de posição referente ao k -ésimo próton. Substituindo este operador densidade de carga e as coordenadas pelos operadores de posição na expressão (5.14), obtém-se o operador de quadrupolo:

$$\hat{Q}_{\alpha\beta} = e \sum_k \left(3\hat{\alpha}_k\hat{\beta}_k - \delta_{\alpha\beta}\hat{r}_k^2 \right), \quad (5.16)$$

dando origem ao Hamiltoniano de acoplamento quadrupolar

$$\hat{H}_Q = \frac{1}{6} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} V_{\alpha\beta} \hat{Q}_{\alpha\beta}. \quad (5.17)$$

É conveniente no tratamento de núcleos quadrupolares em RMN transformar o operador de quadrupolo da representação em termos de operadores de posição para a representação em termos de operadores de momento angular nuclear \hat{I}_x , \hat{I}_y , \hat{I}_z e \hat{I}^2 . O ferramental teórico necessário para essa transformação é contido no *teorema de Wigner-Eckhart* (25), que relaciona elementos de matriz de tensores esféricos irredutíveis com os coeficientes de Clebsch-Gordan. Com o

uso deste teorema demonstra-se que, em termos de operadores de momento angular nuclear o Hamiltoniano de acoplamento quadrupolar é dado por(23):

$$\hat{H}_Q = \frac{eQ}{6I(2I-1)} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} V_{\alpha\beta} \left(\frac{3}{2} (\hat{I}_\alpha \hat{I}_\beta + \hat{I}_\beta \hat{I}_\alpha) - \delta_{\alpha,\beta} I^2 \right), \quad (5.18)$$

onde $Q = \langle I, m | Q_{zz} | I, m \rangle$ é o momento de quadrupolo do núcleo em questão. Adotando o sistema de coordenadas onde $V_{\alpha,\beta} = 0$ se $\alpha \neq \beta$, chamado comumente de *sistema de eixos principal* e a condição (5.12) estabelecida pela equação de Laplace:

$$\hat{H}_Q = \frac{eQV_{ZZ}}{4I(2I-1)} \left((3\hat{I}_Z^2 - I^2) + \frac{V_{XX} - V_{YY}}{V_{ZZ}} (\hat{I}_X^2 - \hat{I}_Y^2) \right). \quad (5.19)$$

Duas aproximações são usualmente empregadas, sendo a primeira a condição de simetria axial $V_{XX} = V_{YY}$, equivalente a considerar o gradiente de campo elétrico cilíndrico. Com essa aproximação o Hamiltoniano quadrupolar é simplificado para

$$\hat{H}_Q = \frac{eQV_{ZZ}}{4I(2I-1)} \left(3\hat{I}_Z^2 - \hat{I}^2 \right). \quad (5.20)$$

A segunda aproximação é considerar, que na presença de um campo externo na direção- z deslocada por um ângulo ϑ do eixo- Z do sistema de eixos principal, o acoplamento quadrupolar pode ser tratado como uma perturbação em relação à interação Zeeman. No sistema de coordenadas do campo magnético estático, o operador \hat{I}_Z é reescrito como

$$\hat{I}_Z = \hat{I}_z \cos \vartheta + \hat{I}_x \sin \vartheta. \quad (5.21)$$

Substituindo no Hamiltoniano e aproximando em primeira ordem, ele pode ser reescrito como

$$\hat{H}_Q = \frac{eQV_{ZZ}}{4I(2I-1)} \frac{(3 \cos^2 \vartheta - 1)}{2} \left(3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2 \right), \quad (5.22)$$

ou por

$$\hat{H}_Q = \frac{1}{6} \omega_Q \left(3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2 \right), \quad (5.23)$$

com a definição de frequência quadrupolar

$$\omega_Q = \frac{3eQV_{ZZ}}{4I(2I-1)} (3 \cos^2 \vartheta - 1) = C_Q (3 \cos^2 \vartheta - 1), \quad (5.24)$$

onde

$$C_Q = \frac{3eQV_{ZZ}}{4I(2I-1)}. \quad (5.25)$$

Levando em consideração o acoplamento quadrupolar dado por (5.23), o Hamiltoniano para um spin $I > 1/2$ na presença do campo estático e campo de radiofrequência é

$$\hat{H} = -\omega_L \hat{I}_z - \omega_1 (\hat{I}_x \cos \omega_{rf} t - \hat{I}_y \sin \omega_{rf} t) + \frac{1}{6} \omega_Q \left(3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2 \right), \quad (5.26)$$

um Hamiltoniano não-linear com dependência explícita no tempo.

5.3 REFERENCIAL GIRANTE E HAMILTONIANO DE BOSE-HUBBARD

O Hamiltoniano (5.26) possui dinâmica complexa de analisar, principalmente devido à dependência temporal inserida pela radiofrequência. Esta complicação pode ser evitada mudando do referencial de laboratório, que estava sendo adotado até o momento, pelo muitas vezes chamado referencial girante, equivalente a rotacionar os estados do sistema em torno do eixo- z na frequência ω_{rf} da radiofrequência. Em termos mais formais, a simplificação consiste em adotar um sistema de coordenadas onde os estados do sistema são $|\psi_{\text{rot}}\rangle$, relacionados com os estados no referencial de laboratório por

$$|\psi_{\text{rot}}\rangle = e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z} |\psi_{\text{lab}}\rangle. \quad (5.27)$$

Neste referencial, a evolução do sistema é regida pela seguinte equação de Schroedinger

$$i\frac{d}{dt} |\psi_{\text{rot}}\rangle = \hat{H}_{\text{rot}} |\psi_{\text{rot}}\rangle, \quad (5.28)$$

onde \hat{H}_{rot} é o Hamiltoniano do sistema no referencial girante. Em termos do referencial de laboratório e derivando no tempo, esta equação fica na forma

$$e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z} \left(\omega_{rf}\hat{I}_z |\psi_{\text{lab}}\rangle + i\frac{d}{dt} |\psi_{\text{lab}}\rangle \right) = \hat{H}_{\text{rot}} \left(e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z} |\psi_{\text{lab}}\rangle \right). \quad (5.29)$$

A derivada do estado no referencial de laboratório pode ser substituída pelo Hamiltoniano neste referencial fazendo uso da equação de Schroedinger

$$i\frac{d}{dt} |\psi_{\text{lab}}\rangle = \hat{H}_{\text{lab}} |\psi_{\text{lab}}\rangle, \quad (5.30)$$

resultando em

$$e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z} \left(\omega_{rf}\hat{I}_z + \hat{H}_{\text{lab}} \right) |\psi_{\text{lab}}\rangle = \hat{H}_{\text{rot}} \left(e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z} |\psi_{\text{lab}}\rangle \right) \quad (5.31)$$

Para encontrar \hat{H}_{rot} , é preciso analisar as relações de comutação entre o operador de rotação $\hat{R}_z(t) = e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z}$ e os operadores \hat{I}_x e \hat{I}_y . Uma maneira direta de encontrar estas relações é através das expressões para operadores de momento angular rotacionados (25)

$$\hat{R}_z(\varphi)\hat{J}_x\hat{R}_z^\dagger(\varphi) = \hat{J}_x \cos \varphi + \hat{J}_y \sin \varphi \quad (5.32)$$

e

$$\hat{R}_z(\varphi)\hat{J}_y\hat{R}_z^\dagger(\varphi) = -\hat{J}_x \sin \varphi + \hat{J}_y \cos \varphi, \quad (5.33)$$

que podem ser provadas através da expansão em série do operador de rotação em conjunto com o lema de Baker-Hausdorff. Outra maneira de comprovar estes resultados é notando que o valor esperado dos operadores rotacionados correspondem à uma rotação do valor esperado no referencial de laboratório através de matrizes de rotação clássicas no espaço cartesiano. Através destas expressões, juntamente com a unitariedade dos operadores de rotação, ou seja

$$\hat{R}_z(\varphi)\hat{R}_z^\dagger(\varphi) = \hat{R}_z^\dagger(\varphi)\hat{R}_z(\varphi) = \hat{I}, \quad (5.34)$$

encontra-se que

$$e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z}\hat{I}_x = \left(\hat{I}_x \cos \omega_{rf}t + \hat{I}_y \sin \omega_{rf}t\right) e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z}, \quad (5.35)$$

e

$$e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z}\hat{I}_y = \left(-\hat{I}_x \sin \omega_{rf}t + \hat{I}_y \cos \omega_{rf}t\right) e^{-i\omega_{rf}t\hat{I}_z}. \quad (5.36)$$

Inserindo na expressão (5.31), encontra-se que o Hamiltoniano efetivo no referencial girante é

$$\hat{H}_{\text{rot}} = -(\omega_0 - \omega_{rf})\hat{I}_z - \omega_1\hat{I}_x + \frac{1}{6}\omega_Q \left(3\hat{I}_z^2 - \hat{\mathbf{I}}^2\right), \quad (5.37)$$

um Hamiltoniano não-linear independente do tempo. Um dos aspectos mais importantes deste Hamiltoniano é que pode ser utilizado para simular o Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios (3.42) em sistemas de spin nuclear. Definindo

$$\begin{aligned} (\omega_0 - \omega_{rf}) &= \delta, \\ \Omega &= \omega_1, \\ \omega_Q &= 2\chi, \end{aligned} \quad (5.38)$$

o Hamiltoniano de núcleos quadrupolares no referencial girante fica na forma

$$\hat{H}_{\text{rot}} = -\delta\hat{I}_z - \Omega\hat{I}_x + \chi\hat{I}_z^2 - \frac{1}{3}\chi\hat{\mathbf{I}}^2. \quad (5.39)$$

Eliminando o termo constante em $\hat{\mathbf{I}}^2 = I(I + 1)$, encontra-se o Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios:

$$\hat{H}_{BH} = -\delta\hat{I}_z - \Omega\hat{I}_x + \chi\hat{I}_z^2. \quad (5.40)$$

Deste modo, estabelece-se a relação entre BECs em poço-duplo e sistemas de núcleos quadrupolares em RMN, mostrando que estes sistemas, a princípio completamente distintos, se mostram como realizações do mesmo Hamiltoniano. O termo referente à componente- z de momento angular no sistema de núcleos quadrupolares é devido à interação Zeeman entre o núcleo e o campo externo, possuindo o mesmo papel do termo de assimetria no Hamiltoniano de BECs em poço duplo, sendo em ambos os sistemas parâmetros controláveis: em RMN este parâmetro pode ser modificado mudando o valor da radiofrequência ω_{rf} , enquanto em BECs esta modificação implica mudança na geometria das armadilhas. O termo envolvendo a componente- x novamente é relacionada à transições de estado: enquanto em BECs este termo implica em probabilidades de transição de uma partícula de um poço para outro, em RMN este termo é devido à radiofrequência, que pode induzir transições entre níveis de energia do núcleo através da absorção e emissão de fótons. Novamente, em ambos os sistemas estes parâmetros são controláveis: em BECs a altura da barreira de potencial pode ser modificada e em RMN basta modificar a intensidade do campo de radiofrequência ou ω_{rf} . Já a não-linearidade dos Hamiltonianos, em ambos os casos, envolvem interações internas nos sistemas, sendo colisões entre partículas no caso dos condensados, ou interações com gradientes de campo elétricos em núcleos quadrupolares. No caso do Hamiltoniano de Bose-Hubbard para núcleos quadrupolares em RMN, o único parâmetro

de controle da não-linearidade do sistema consiste no ângulo descrito entre o sistema de eixos principal e o alinhamento do campo estático, como indicam as expressões (5.24) e (5.38). No caso de condensados o controle da não-linearidade do Hamiltoniano é realizado através do fenômeno de ressonância de Feshbach (18, 19), que permite controlar as interações entre partículas que compõem o sistema. Uma vez que o Hamiltoniano de núcleos quadrupolares simula um Hamiltoniano de Bose-Hubbard, também pode ser utilizado para produzir spin squeezing neste tipo de sistema, do mesmo modo que em BECs. Para tanto, basta adotar a frequência de ressonância $\omega_{rf} = \omega_0$ para o referencial girante e eliminar o campo de radiofrequência ($\omega_1 = 0$), deste modo obtendo o Hamiltoniano de OAT:

$$\hat{H}_{OAT} = \chi \hat{I}_z^2, \quad (5.41)$$

de modo que a dinâmica de spin squeezing com Hamiltonianos de OAT pode ser implementada em núcleos quadrupolares em RMN (21), reproduzindo os resultados de Hamiltonianos de OAT apresentados no capítulo anterior.

6 A INTERAÇÃO DIPOLAR E SPIN SQUEEZING

Após discutido o papel das interações quadrupolares em RMN, a possibilidade de implementação do Hamiltoniano de Bose-Hubbard de dois sítios através destes núcleos quadrupolares e seu uso na produção de *spin squeezing* em RMN, neste capítulo será considerado o efeito de outra interação entre núcleos: a interação dipolar de caráter magnético entre núcleos em RMN. Esta interação, de caráter geralmente perturbativo, é empregada em alguns casos como uma maneira de obter informações estruturais em amostras de sólidos em RMN (83, 84). Neste capítulo será discutido a forma do Hamiltoniano introduzido ao considerarmos este tipo de interação *spin-spin* no caso de dois núcleos de mesma espécie ou de espécies diferentes, assim como o Hamiltoniano completo ao considerar núcleos quadrupolares distintos interagindo através de um acoplamento dipolar. Com base neste Hamiltoniano será analisado o efeito da adição de um termo análogo a interação dipolar em um Hamiltoniano composto por dois Hamiltonianos de OAT, um para momento angular $7/2$ e outro $3/2$, discutindo o efeito desta adição na dinâmica de *spin squeezing* em diversos regimes de proporção entre os Hamiltonianos de OAT e o termo do tipo dipolar.

6.1 INTERAÇÃO DIPOLAR EM RMN

Classicamente, a energia de interação entre dois momentos magnéticos μ_1 e μ_2 é dada por

$$E_D = \frac{\mu_1 \cdot \mu_2}{r^3} - \frac{3(\mu_1 \cdot r)(\mu_2 \cdot r)}{r^5}, \quad (6.1)$$

onde o vetor $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ é relativo à distância entre os dois momentos. Esta energia é devida à interação entre um dos momentos magnéticos e o campo magnético produzido pela presença do outro momento magnético. Para avaliar o efeito da interação dipolar entre núcleos em RMN, devemos utilizar a abordagem quântica, onde os momentos magnéticos são substituídos por

$$\mu_1 \rightarrow \gamma_1 \hat{I}_1 \quad \mu_2 \rightarrow \gamma_2 \hat{I}_2, \quad (6.2)$$

onde \hat{I}_1 e \hat{I}_2 são os operadores de spin total dos núcleos atômicos. Em termos de coordenadas esféricas, em um referencial onde a partícula 1 encontra-se na origem, ou seja, onde $\mathbf{r} = (r \cos \phi \sin \theta, r \sin \phi \sin \theta, r \cos \theta)$, o Hamiltoniano de interação dipolar é dado em termos de seis contribuições:

$$\hat{H}_D = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{r^3} (A + B + C + D + E + F), \quad (6.3)$$

onde

$$\begin{aligned}
A &= (1 - 3 \cos^2 \theta) \hat{I}_z^{(1)} \otimes \hat{I}_z^{(2)} \\
B &= -\frac{1}{4}(1 - 3 \cos^2 \theta) \left(\hat{I}_+^{(1)} \otimes \hat{I}_-^{(2)} + \hat{I}_-^{(1)} \otimes \hat{I}_+^{(2)} \right) \\
C &= -\frac{3}{2} \text{sen } \theta \cos \theta e^{-i\phi} \left(\hat{I}_+^{(1)} \otimes \hat{I}_z^{(2)} + \hat{I}_z^{(1)} \otimes \hat{I}_+^{(2)} \right) \\
D &= -\frac{3}{2} \text{sen } \theta \cos \theta e^{i\phi} \left(\hat{I}_-^{(1)} \otimes \hat{I}_z^{(2)} + \hat{I}_z^{(1)} \otimes \hat{I}_-^{(2)} \right) \\
E &= -\frac{3}{4} \text{sen}^2 \theta e^{-2i\phi} (\hat{I}_+^{(1)} \otimes \hat{I}_+^{(2)}) \\
F &= -\frac{3}{4} \text{sen}^2 \theta e^{2i\phi} (\hat{I}_-^{(1)} \otimes \hat{I}_-^{(2)}).
\end{aligned} \tag{6.4}$$

Em RMN, o termo de interação dipolar representa apenas um termo perturbativo em relação à energia de interação Zeeman entre os núcleos e o campo estático aplicado, uma vez que os campos produzidos pelos momentos magnéticos nucleares estão em ordens de grandeza abaixo dos valores típicos de intensidade de campo magnético estático. Dentre os termos perturbativos de A à F no Hamiltoniano \hat{H}_D , alguns termos possuem contribuição desprezível neste regime de campo estático intenso, em relação às aproximações de ordens baixas. Usualmente, este Hamiltoniano é simplificado no regime de campo estático intenso através da chamada *aproximação secular*, que mantém apenas os termos A e B para núcleos de mesma espécie (homonucleares), ou seja:

$$\hat{H}_D = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{r^3} (A + B) = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{2r^3} (1 - 3 \cos^2 \theta) \left[3 \hat{I}_z^{(1)} \otimes \hat{I}_z^{(2)} - \hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{I}}_2 \right]. \tag{6.5}$$

Em relação às espécies distintas (núcleos heteronucleares), na aproximação secular, mantém-se apenas o termo A do Hamiltoniano, de maneira que a interação dipolar depende apenas das componentes- z (direção do campo estático) dos momentos angulares nucleares:

$$\hat{H}_D = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{r^3} A = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{r^3} (1 - 3 \cos^2 \theta) \hat{I}_z \otimes \hat{J}_z, \tag{6.6}$$

onde por conveniência de notação, o momento angular do núcleo 2 é representado por \hat{J} . Esta expressão exibe a dependência espacial da energia de interação dipolar, sendo regulada pela distância entre os núcleos, assim como pela orientação relativa entre as partículas, expressa pelo termo dependente do ângulo θ . Em relação ao ângulo θ , a máxima contribuição de energia por interação dipolar ocorre quando ambas as partículas estão posicionadas ao longo do eixo- z , de modo que

$$\hat{H}_D = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{r^3} \left(\hat{I}_z \otimes \hat{J}_z \right), \tag{6.7}$$

para núcleos de espécies distintas. O caso oposto, de mínima contribuição dipolar, ocorre no ângulo de aproximadamente $\theta = 54,7^\circ$, conhecido como *ângulo mágico*, uma orientação que permite tornar a contribuição anisotrópica da interação dipolar desprezível. O ângulo mágico

possui grande importância em RMN de sólidos, uma vez que a interação dipolar representa uma contribuição significativa, ao contrário do caso de líquidos, onde o constante movimento das partículas torna a contribuição média dipolar nula. Outra observação importante é que a expressão (6.6) possui mesma forma geral do acoplamento escalar entre núcleos heteronucleares:

$$\hat{H}_J = J \left(\hat{I}_z^{(1)} \otimes \hat{I}_z^{(2)} \right), \quad (6.8)$$

uma forma aproximada da interação

$$\hat{H}_J = J(\hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{I}}_2), \quad (6.9)$$

uma interação mediada por elétrons compartilhados em ligações químicas entre átomos e sobreposições entre as funções de onda destes elétrons compartilhados e dos núcleos acoplados.

Considerando no referencial de laboratório um sistema composto por dois núcleos heteronucleares na presença de um campo estático B_0 interagindo por acoplamento dipolar, o Hamiltoniano do sistema é da forma

$$\hat{H} = -\omega_{01} \hat{I}_z - \omega_{02} \hat{J}_z + d(r, \theta) \hat{I}_z \hat{J}_z, \quad (6.10)$$

onde a notação de produto tensorial é suprimida por praticidade. Como no caso discutido no capítulo anterior, a dinâmica deste Hamiltoniano pode ser simplificada adotando um referencial não-estático em relação ao laboratório, neste caso sendo um referencial duplamente girante, ou seja, os estados do sistema neste referencial são relacionados com os estados no referencial de laboratório através da expressão

$$|\psi_{\text{rot}}\rangle = e^{-i\omega_{01}t\hat{I}_z} e^{-i\omega_{02}t\hat{J}_z} |\psi_{\text{lab}}\rangle, \quad (6.11)$$

duas rotações cada uma em ressonância com a frequência natural de um núcleo. Fazendo uso das equações de Schroedinger em ambos os referenciais em conjunto com a relação de comutação entre o Hamiltoniano no referencial de laboratório e os operadores de rotação, encontra-se que o Hamiltoniano efetivo no referencial girante inclui apenas a contribuição dipolar:

$$\hat{H}_{\text{rot}} = d(r, \theta) \hat{I}_z \hat{J}_z, \quad (6.12)$$

onde

$$d(r, \theta) = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{r^3} (1 - 3 \cos^2 \theta). \quad (6.13)$$

Em casos onde $I > 1/2$ e $J > 1/2$ termos de acoplamento quadrupolar devem ser incluídos no Hamiltoniano, sendo ele então referente a um sistema onde dois núcleos quadrupolares interagem através de acoplamento dipolar. Em um caso simples de gradientes de campo elétrico com simetria cilíndrica, a forma do Hamiltoniano é obtida diretamente, uma vez que os termos de acoplamento quadrupolar comutam com os operadores de rotação do referencial duplamente girante. Neste referencial, o Hamiltoniano do sistema é

$$\hat{H} = \frac{1}{6} \omega_{Q1} \left(3\hat{I}_z^2 - \hat{\mathbf{I}}^2 \right) + \frac{1}{6} \omega_{Q2} \left(3\hat{J}_z^2 - \hat{\mathbf{J}}^2 \right) + d(r, \theta) \hat{I}_z \hat{J}_z. \quad (6.14)$$

Eliminando os termos constantes em $\hat{\mathbf{I}}^2 = I(I + 1)$ e $\hat{\mathbf{J}}^2 = J(J + 1)$, este Hamiltoniano pode ser reescrito como

$$\hat{H} = \chi_1 \hat{I}_z^2 + \chi_2 \hat{J}_z^2 + d(r, \theta) \hat{I}_z \hat{J}_z, \quad (6.15)$$

que corresponde a Hamiltonianos de OAT para cada spin nuclear com a adição de um termo de acoplamento devido à presença da interação dipolar. Tendo como base este Hamiltoniano, neste trabalho será analisado um modelo de Hamiltoniano composto por dois termos de *one-axis twisting*, cada um referente a um subsistema de momento angular específico e distinto, em conjunto com um termo de acoplamento do tipo dipolar, de modo a observar as discrepâncias entre as dinâmicas em relação à um sistema sem acoplamento e o efeito na produção de estados *spin squeezed*.

6.2 HAMILTONIANO DE OAT COM TERMO DO TIPO DIPOLAR

Como já citado, com base no Hamiltoniano (6.15), neste trabalho será analisado os efeitos da adição de um termo dipolar no Hamiltoniano composto por dois Hamiltonianos de OAT cada um referente a um subsistema com momentos angulares definidos pelos números quânticos $I = 7/2$ e $J = 3/2$. A forma geral empregada para o Hamiltoniano é

$$\hat{H} = \chi \hat{I}_z^2 + c\chi \hat{J}_z^2 + d \hat{I}_z \hat{J}_z, \quad (6.16)$$

onde o parâmetro χ controla a não linearidade do primeiro subsistema, a constante real c controla a não-linearidade do segundo subsistema em termos de χ , e d define a intensidade da interação do tipo dipolar no Hamiltoniano. Como é dependente apenas das componentes na direção- z de momento angular, este Hamiltoniano é diagonal na base gerada pelo produto tensorial entre as bases de Dicke de cada sistema, ou seja, na base composta por elementos

$$|I, m_1; J, m_2\rangle = |I, m_1\rangle \otimes |J, m_2\rangle, \quad (6.17)$$

sendo o Hamiltoniano definido matricialmente nesta base por elementos de matriz do tipo

$$\langle I, m_1; J, m_2 | \hat{H} | I, m'_1; J, m'_2 \rangle = E_{m_1 m_2} \delta_{m_1, m'_1} \delta_{m_2, m'_2}, \quad (6.18)$$

onde

$$E_{m_1 m_2} = \chi \epsilon_{m_1 m_2} = \chi \left(m_1^2 + c m_2^2 + \frac{d}{\chi} m_1 m_2 \right) \quad (6.19)$$

são as auto-energias deste Hamiltoniano. Tendo em mãos as auto-energias e auto-vetores deste Hamiltoniano, encontra-se de maneira direta a evolução temporal do sistema, sendo ela realizada através do operador unitário

$$\hat{U} = e^{-i\hat{H}t} = \sum_{m_1, m_2} e^{-\frac{1}{2}i\mu \epsilon_{m_1 m_2}} |I, m_1; J, m_2\rangle \langle I, m_1; J, m_2|, \quad (6.20)$$

sendo este operador parametrizado no último termo através de

$$\mu = 2\chi t, \quad (6.21)$$

análogo ao ângulo de OAT definido nos capítulos anteriores. Sendo o Hamiltoniano dependente de três parâmetros (χ , c , e d), diversos regimes distintos podem ser analisados conforme a proporção entre estes coeficientes. A seguir, alguns regimes onde as não-linearidades são mantidas iguais ($c = 1$) mas termos de acoplamento do tipo dipolar estão presentes são abordados através de simulações numéricas utilizando o *software* MATLAB, sendo a presença de *spin squeezing* nos subsistemas observada através do parâmetro de Kitagawa e Ueda. A visualização dos estados quânticos dos subsistemas é realizada através da função de quasiprobabilidade de Wigner $W(\theta, \phi)$ construída de forma separada para cada subsistema pela decomposição do estado global pela operação traço parcial. Inicialmente, de modo a observar com mais clareza o efeito da adição do termo dipolar, é conveniente abordar novamente a dinâmica de OAT quando interações entre subsistemas não estão presentes.

6.2.1 DINÂMICA 1: SUBSISTEMAS DESACOPLADOS

Na ausência do termo de interação do tipo dipolar no Hamiltoniano (6.16) (ou seja, $d = 0$), o sistema total consiste em dois subsistemas desacoplados evoluindo através de Hamiltonianos de OAT, de modo que cada subsistema apresenta uma dinâmica própria de *spin squeezing*. As correlações presentes são de caráter intrínseco de cada sistema, uma vez que não há termo de interação global. De modo a obter mesmo período de ciclo de *spin squeezing* para ambos os subsistemas a não-linearidade será considerada igual para os dois, o que é equivalente a estabelecer $c = 1$ na expressão (6.16) do Hamiltoniano. O Hamiltoniano desta configuração é composto pela seguinte soma

$$\hat{H} = \hat{H}_{OAT}^I + \hat{H}_{OAT}^J = \chi \hat{J}_z^2 + \chi \hat{J}_z^2, \quad (6.22)$$

com autovalores

$$E_{m_1, m_2} = E_{m_1} + E_{m_2} = \chi(m_1^2 + m_2^2). \quad (6.23)$$

De maneira semelhante à dinâmica de *spin squeezing* apresentada no Capítulo 3, nas análises a seguir o estado inicial do sistema será correspondente aos dois sistemas em estados coerentes de spin com alinhamento médio na direção- x , ou seja

$$|\psi_0\rangle = |\theta = \pi/2, \phi = 0\rangle_I \otimes |\theta = \pi/2, \phi = 0\rangle_J, \quad (6.24)$$

estado que pode ser expandido em termos da base de Dicke para cada subsistema:

$$|\theta = \pi/2, \phi = 0\rangle_I \otimes |\theta = \pi/2, \phi = 0\rangle_J = \sum_{m_1=-I/2}^{I/2} \sum_{m_2=-J/2}^{J/2} c_{m_1} c_{m_2} |I, m_1; J, m_2\rangle, \quad (6.25)$$

onde

$$c_{m_1} = 2^{-I} \binom{2I}{m_1}^{\frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad c_{m_2} = 2^{-J} \binom{2J}{m_2}^{\frac{1}{2}}. \quad (6.26)$$

Como não há termo de acoplamento no Hamiltoniano, é possível investigar cada sistema individualmente, sem considerar a presença do outro, com cada estado evoluindo através de seu

próprio operador de evolução temporal

$$\hat{U}_K = \sum_m e^{-\frac{1}{2}i\mu m^2} |K, m\rangle \langle K, m|, \quad (6.27)$$

com $K = I, J$. Com a aplicação destes operadores de evolução temporal nos estados iniciais, encontra-se os estados do sistema no decorrer do tempo:

$$|\psi(\mu)\rangle_K = \sum_m c_m e^{-\frac{1}{2}i\mu m^2} |K, m\rangle. \quad (6.28)$$

Uma vez encontrada a dinâmica para cada *spin*, a presença de estados *spin squeezed* pode ser demonstrada através do cálculo do parâmetro de Kitagawa e Ueda. Gráficos deste parâmetro calculado para $I = 7/2$ e $J = 3/2$ são apresentados na figura 11.

A dinâmica de cada sistema consiste em ciclos de *squeezing* caracterizados pelo ângulo de OAT. Em ambos os casos, a distribuição de Wigner esférica dos estados coerentes de spin iniciais é achatada devido à redução da variância em uma direção perpendicular ao alinhamento médio de spin. As variâncias mínimas durante o ciclo, ou seja, máximo *squeezing*, ocorrem nos pontos A e C para o primeiro subsistema, e em A' e C' para o segundo. Após os pontos A e A' a deformação contínua dos estados leva à descaracterização de *spin squeezing*, não havendo a presença de ESSs durante o intervalo próximo da metade do período de squeezing, nos pontos B e B'. As distribuições de quasiprobabilidade de Wigner para os pontos discutidos são apresentadas na figuras 12 e 13.

Figura 11 – Parâmetros de *spin squeezing* ξ_S^2 em termos do ângulo μ de OAT para (a) $I = 7/2$ e (b) $J = 3/2$ evoluindo através de Hamiltonianos de OAT. Em cada figura três pontos de interesse são destacados. Estes pontos são explicados no texto. Fonte: o autor.

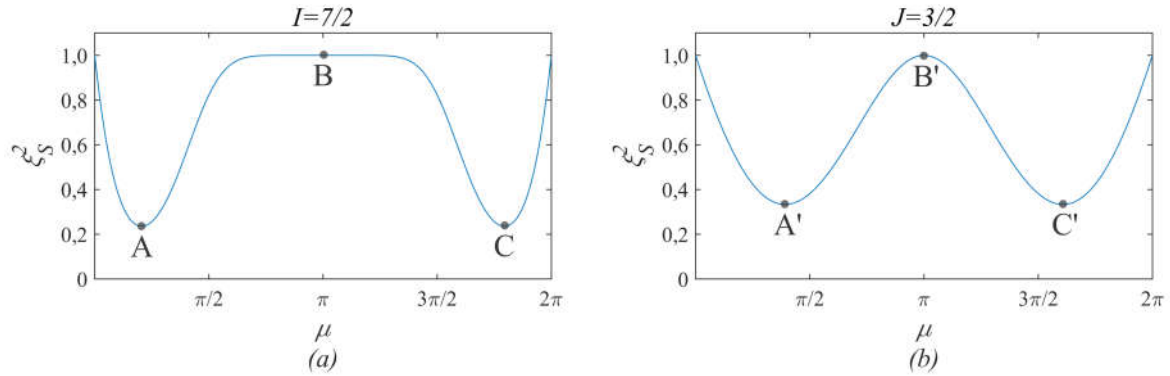


Figura 12 – Distribuições de quasiprobabilidade de Wigner para os três pontos representados na figura 11-(a) para $I = 7/2$. Em concordância com a figura citada, nos pontos A e C as distribuições apresentam a forma elíptica característica de ESSs. Fonte: o autor.

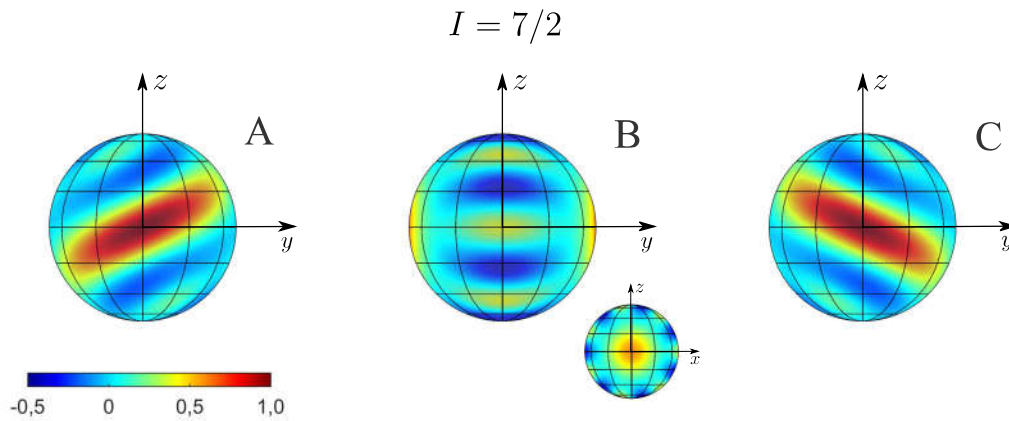
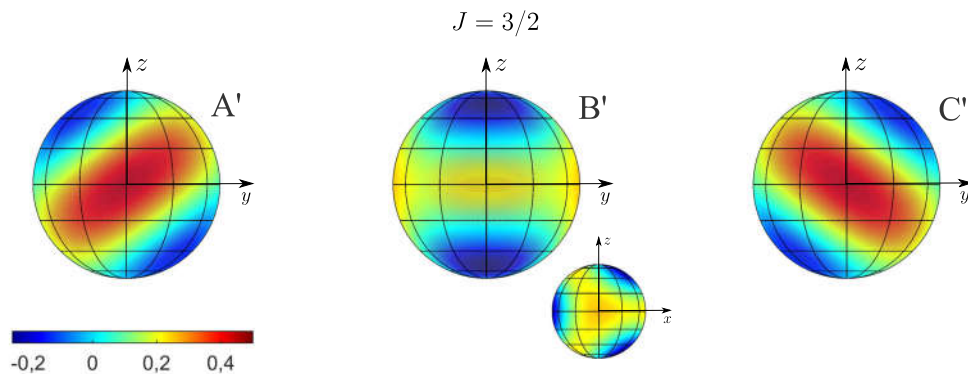


Figura 13 – Distribuições de quasiprobabilidade de Wigner para os três pontos representados na figura 11-(b) para $J = 3/2$. As formas elípticas das distribuições em A' e B' novamente indicam a presença de *spin squeezing*. Fonte: o autor.



6.2.2 DINÂMICA 2: APENAS TERMO DIPOLAR

Na segunda dinâmica abordada, o Hamiltoniano consiste apenas no termo de interação do tipo dipolar, sendo a contribuição dos termos não-lineares ignorada. Deste modo, em contraste com o caso anterior, apenas o efeito do acoplamento é considerado. O Hamiltoniano neste caso particular é

$$\hat{H} = d \hat{I}_z \hat{J}_z, \quad (6.29)$$

resultando em um operador de evolução temporal

$$\hat{U} = e^{-idt \hat{I}_z \hat{J}_z} = e^{-\frac{1}{2}i\mu D \hat{I}_z \hat{J}_z}, \quad (6.30)$$

onde, para escrever o operador em termos do ângulo de OAT, o parâmetro $D = d/\chi$ relativo à intensidade da interação do tipo dipolar é definido. Como esperado, para o mesmo estado inicial da dinâmica anterior, devido à ausência de termos não-lineares, *spin squeezing* não se manifesta neste sistema, uma vez que o parâmetro de *spin squeezing* para ambos os subsistemas se mantém igual à unidade durante todo o ciclo, como exposto na figura 14. As figuras 15 e 16 apresentam distribuições de Wigner calculadas para o início, meio e fim do intervalo $0 \leq \mu \leq 2\pi$. É interessante notar que partindo de um estado coerente inicial, o Hamiltoniano dipolar produz novamente um estado coerente de spin em $\mu = 2\pi$ para ambos os sistemas, mas com alinhamento em sentido oposto ao inicial.

Figura 14 – Parâmetro de *spin squeezing* para $I = 7/2$ (a) e $J = 3/2$ (b) para um sistema evoluindo pelo operador (6.30) (linha azul) em contraste com o parâmetro de *spin squeezing* para sistemas com Hamiltonianos de OAT (linha alaranjada). Como $\xi_S^2 = 1$ durante todo o ciclo, o termo dipolar não gera ESSs. Fonte: o autor.

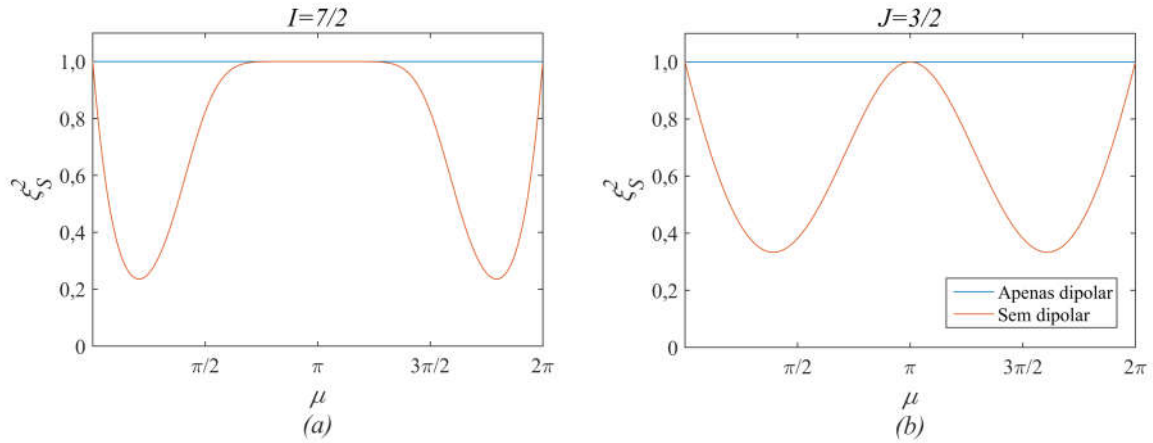


Figura 15 – Distribuições de Wigner para $\mu = 0, \pi$ e 2π relativos à dinâmica devida apenas ao termo de acoplamento do tipo dipolar para $I = 7/2$. Fonte: o autor.

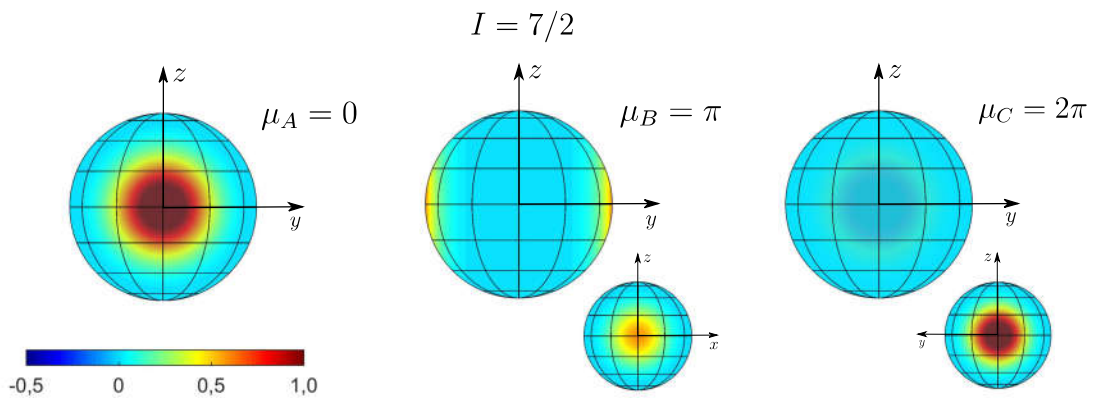
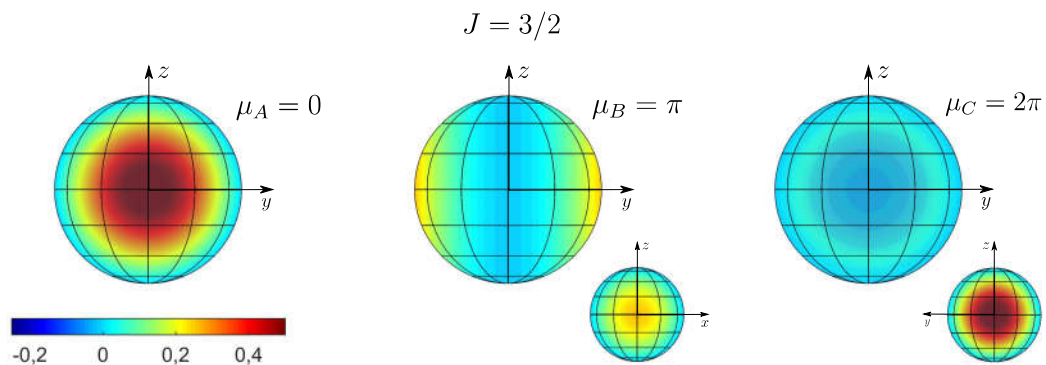


Figura 16 – Distribuições de Wigner para $\mu = 0, \pi$ e 2π relativos à dinâmica devida apenas ao termo de acoplamento do tipo dipolar para $J = 3/2$. Fonte: o autor.



6.2.3 DINÂMICA 3 - TERMO DE ACOPLAMENTO COM $D = 2$

Após discutir os casos sem acoplamento e apenas com termo de acoplamento, serão analisadas dinâmicas que envolvem ambos os termos, identificando o efeito do termo adicional de acoplamento em Hamiltonianos de OAT. O primeiro caso abordado será a dinâmica devida ao Hamiltoniano (6.16) com $D = 2$, de modo que os termos não-lineares e de acoplamento tenham energias relativamente próximas. Casos onde $D \ll 1$ não serão abordados, uma vez que não alteram de maneira significativa os parâmetros de *spin squeezing*. O parâmetro de *spin squeezing* para um ciclo com $D = 2$ é apresentado na figura 17. Novamente três pontos são destacados em cada gráfico, dois em pontos de máximo (A e A', C e C') *squeezing* e um no meio do intervalo (B e B'), instantes onde ESSs não estão presentes.

A primeira observação pertinente é que a presença do termo dipolar não destrói a formação de estados *spin squeezed* no sistema, que neste caso específico ainda ocorre através de transformações contínuas no estado coerente inicial. Além disto, este regime possui ciclo de *spin* de mesmo período do que o caso desacoplado. Apesar da manutenção de ESSs, o termo de acoplamento reduz o valor máximo de *squeezing* obtido na evolução, além de reduzir o intervalo onde ele é observado. Apesar das desvantagens citadas, a presença do termo dipolar neste regime sincroniza os instantes de máximo *squeezing* de ambos os subsistemas, que ocorrem em torno dos ângulos de OAT $\mu = 0.5$ e $\mu = 5.78$. Deste modo, o acoplamento do tipo dipolar pode ser utilizado na obtenção simultânea de estados *spin squeezed* em ambos os subsistemas. Outra observação interessante é o fato de que para ângulo de OAT $\mu = \pi$, os estados quânticos dos sistemas representados pela distribuição de Wigner nas figuras 18 e 19 possuem a mesma forma dos casos observados quando apenas o termo dipolar é considerado na evolução, embora as direções de maior quasiprobabilidade estejam rotacionadas em $\pi/2$ em relação ao caso anterior. As distribuições de Wigner apresentadas também exibem as formas elípticas características de *spin squeezing* para ambos os sistemas, mas outro efeito interessante é introduzido devido ao acoplamento: enquanto nos sistemas sem acoplamento *spin squeezing* é observado apenas na direção de alinhamento do estado coerente inicial, o termo dipolar acarreta a produção de ESSs em direção oposta ao alinhamento inicial em ambos os subsistemas (pontos C e C').

Figura 17 – Parâmetro de Kitagawa e Ueda para I (a) e J (b) para evolução com $D = 2$. A presença do termo dipolar sincroniza os pontos de mínima variância A e A' em $\mu = 0.5$ e C e C' em $\mu = 5.78$. Fonte: o autor.

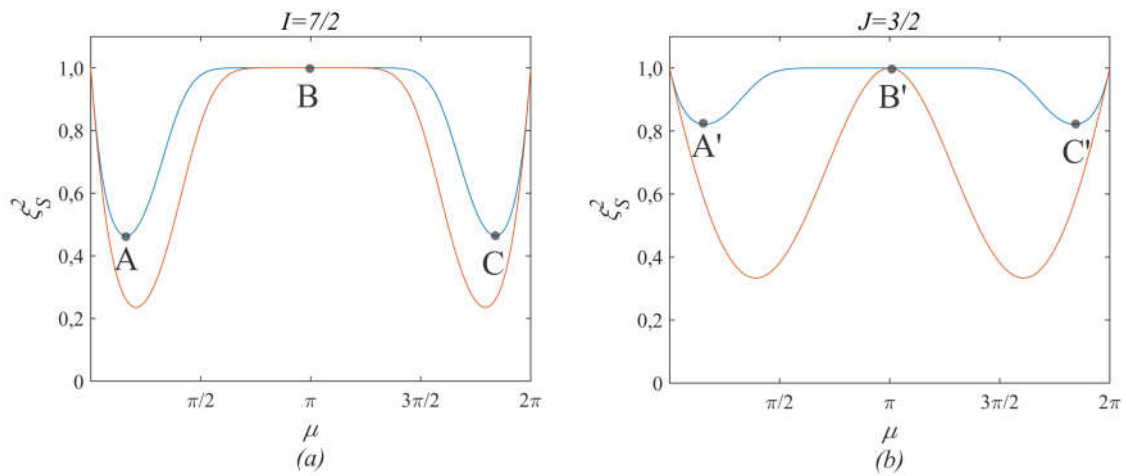


Figura 18 – Distribuições de Wigner para os pontos A, B e C indicados na Figura 17-(a). Fonte: o autor.

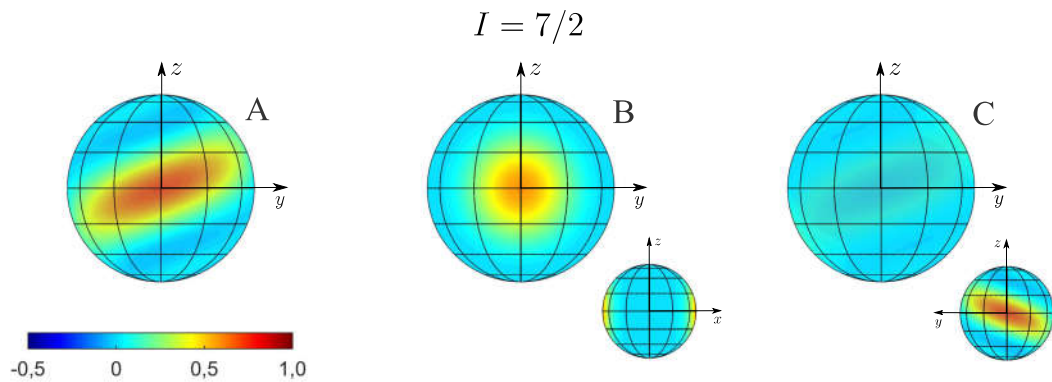
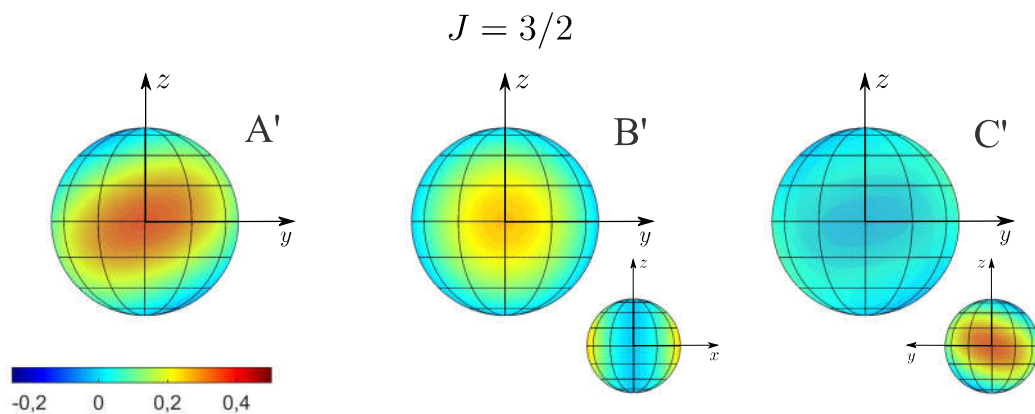


Figura 19 – Distribuições de Wigner para os pontos A', B' e C' indicados na Figura 17-(b). Fonte: o autor.



6.2.4 DINÂMICA 4 - TERMO DE ACOPLAMENTO COM $D = 10$

Em seguida será discutido o caso para $D = 10$ no Hamiltoniano (6.16), caso onde o acoplamento tem caráter mais forte que no caso anterior. Como apresentado na figura 20, a dinâmica de *spin squeezing* sofre alterações significativas neste regime, embora a duração do ciclo seja mantida.

Em relação ao subsistema com $I = 7/2$ ESSs estão presentes nos pontos A e C destacados na figura. O sistema evolui rapidamente do estado coerente inicial para um ESSs em A, embora a redução na variância ocorra de maneira pouco acentuada. Após essa redução, o sistema retorna à estados não-*squeezed* como no ponto B. Após um certo intervalo, novamente o sistema entra num regime de *squeezing* culminando em variância mínima no ponto C, ponto comum entre os parâmetros na presença e ausência de termo dipolar. No ângulo de OAT $\mu = \pi$ o estado encontrado possui mesma forma do caso anterior. Já no segundo subsistema, apesar do forte termo dipolar, *squeezing* máximo em comparação com os sistemas desacoplados é obtido no ponto B', embora a duração deste estado seja curta com o sistema retornando ao estado sem *spin squeezing* em C'. Redução na variância volta a ocorrer no ponto D', embora bem menos significativa. Como nos casos anteriores, as distribuições de Wigner para os pontos de interesse são apresentadas, estando contidas nas figuras 21 e 22.

Figura 20 – Parâmetro de Kitagawa e Ueda para evolução devido ao Hamiltoniano (6.16) com $D=10$ para $I = 7/2$ e $J = 3/2$. Fonte: o autor.

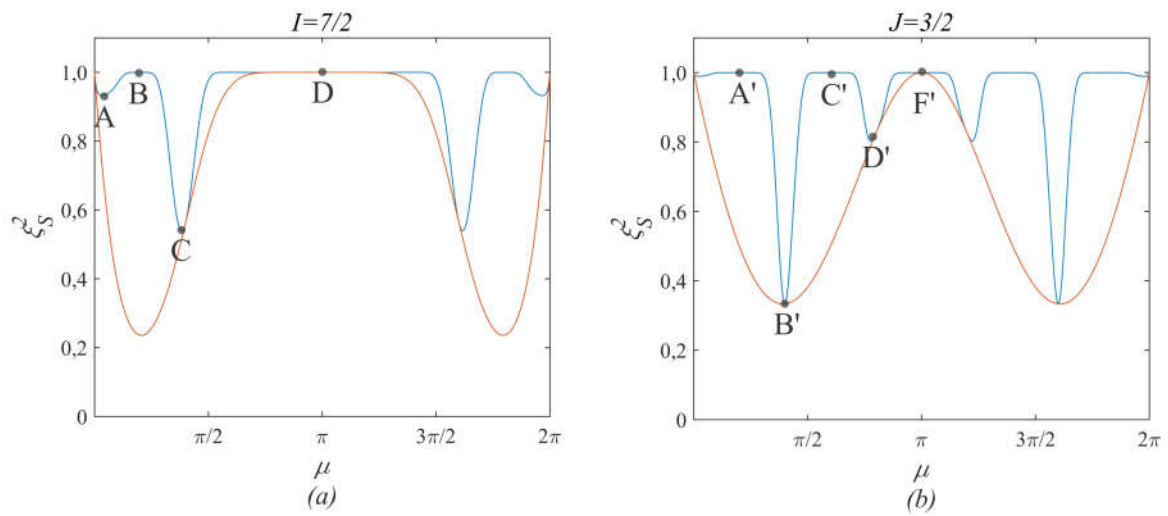


Figura 21 – Distribuições de Wigner para os pontos de A à D da figura 20-(a) para acoplamento $D = 10$. Fonte: o autor.

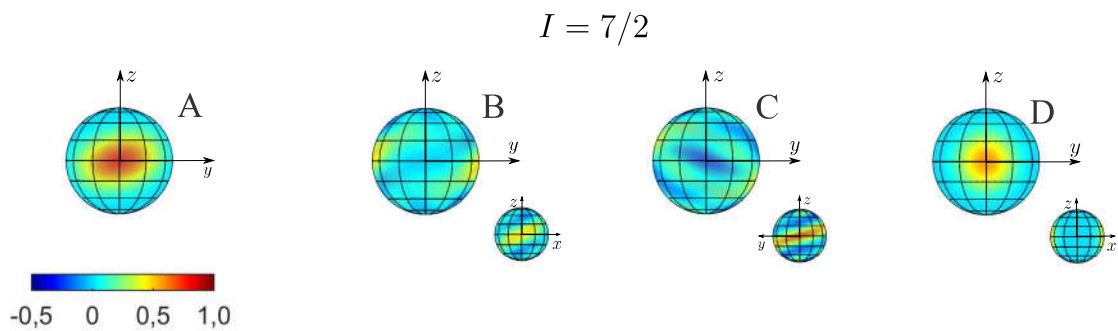
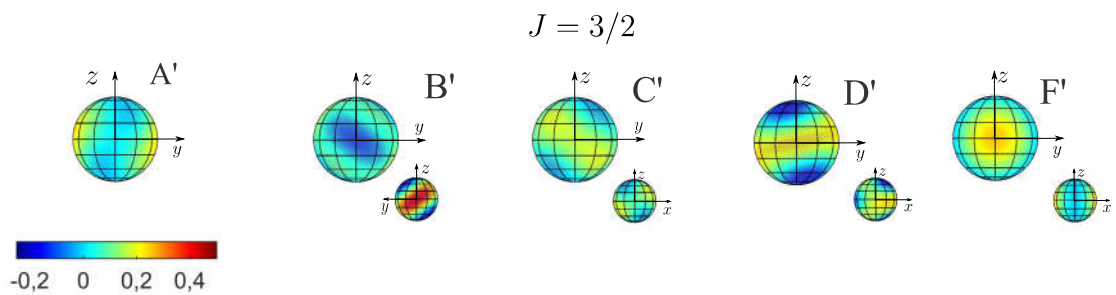


Figura 22 – Distribuições de Wigner para os pontos de A' à D' da figura 20-(a) para acoplamento $D = 10$. Fonte: o autor.



6.2.5 DINÂMICA 5 - ACOPLAMENTO FORTE ($D = 20$)

No caso anterior de $D = 10$, apesar de um acoplamento forte em relação aos termos de OAT, *spin squeezing* comparável ao caso sem acoplamento é encontrado para o subsistema $J = 3/2$, embora num intervalo curto. Aumentando ainda mais a intensidade do acoplamento para $D = 20$, encontra-se maior grau de *squeezing* também para o subsistema $I = 7/2$, como apresentado na figura 23 para o parâmetro de Kitagawa e Ueda (ponto A). Neste caso específico nota-se um aumento na frequência de ocorrência de *spin squeezing* em ambos os subsistemas, ocorrendo três pontos significativos de variância reduzida para $J = 3/2$ (A', B' e C'), e dois pontos para $I = 7/2$ (A e C), embora intercalados por intervalos onde ESSs não são encontrados nos sistemas. As distribuições de Wigner das figuras 24 e 25, como nas discussões anteriores, apresentam os pontos destacados nas dinâmicas dos parâmetros. Com base nestas figuras, duas observações são pertinentes: a variação da direção de alinhamento médio nos casos onde ESSs são encontrados durante a dinâmica, que como em casos discutidos anteriormente, oscilam entre direções opostas, e o fato de que com o acoplamento forte os estados encontrados no meio do ciclo ($\mu = \pi$) possuem mesma forma dos estados encontrados no regime apenas de Hamiltonianos OAT sem presença de termo dipolar, embora o estado para J esteja rotacionado por um ângulo de $\pi/2$.

Figura 23 – Parâmetro de *spin squeezing* para os subsistemas num regime $D = 20$. Fonte: o autor.

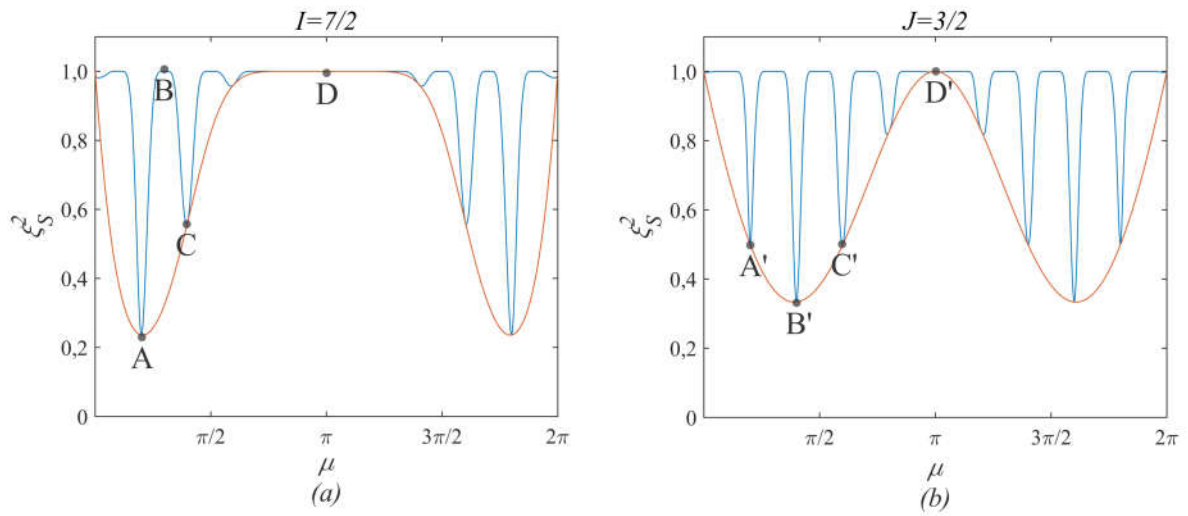


Figura 24 – Distribuições de Wigner para os pontos destacados na figura 23-(a). Fonte: o autor.

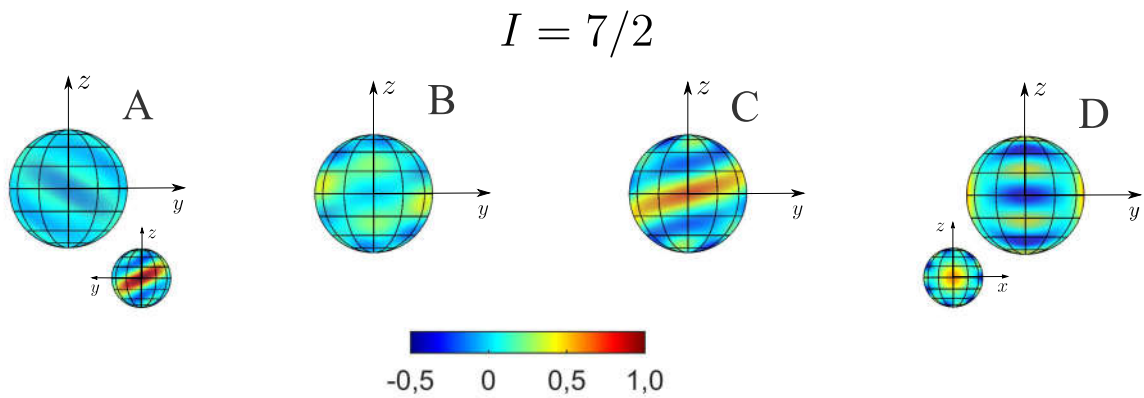
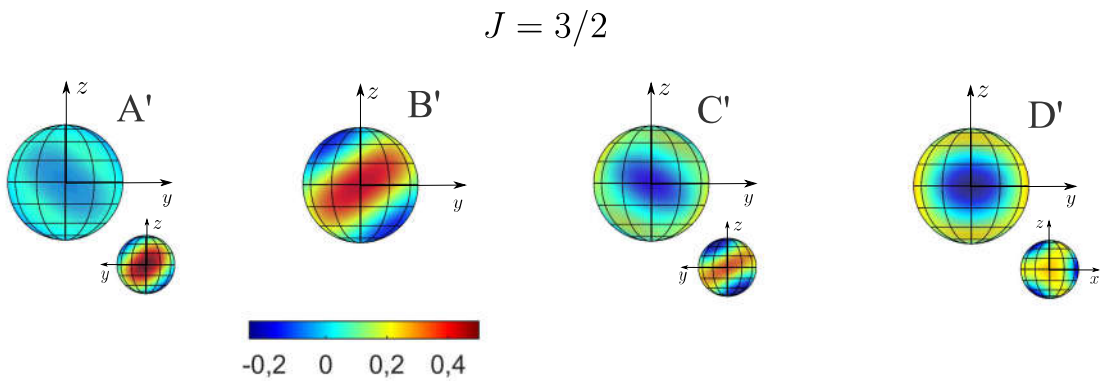


Figura 25 – Distribuições de Wigner para os pontos destacados na figura 23-(b). Fonte: o autor.



6.3 DISCUSSÕES

Nos itens anteriores, resultados calculados numericamente foram apresentados para diferentes regimes de acoplamento do tipo dipolar em relação ao valor de D no Hamiltoniano (6.16) em casos onde os subsistemas apresentam valores semi-inteiros de momento angular $I = 7/2$ e $J = 3/2$, sendo as dinâmicas de spin squeezing caracterizadas pelo parâmetro original de Kitagawa e Ueda, com os estados representados graficamente através da construção de distribuições de quasiprobabilidade de Wigner $W(\theta, \phi)$ para ambos os sistemas, sendo os estados de cada sistema de momento angular especificados através da operação traço parcial para o operador densidade global $\hat{\rho}(\mu)$. Algumas discussões são pertinentes em relação aos resultados obtidos e à abordagem empregada nas análises. Optou-se por empregar análises numéricas para regimes específicos, uma vez que a dinâmica do sistema torna-se ainda mais complexa com a adição do termo de interação, que durante a dinâmica introduz fases adicionais $e^{-i\mu D m_1 m_2}$ entre estados de Dicke, acoplando ambos os sistemas, uma vez que depende dos autovalores m_1 e m_2 simultaneamente. Deste modo, a simplificação dos estados quânticos para valores gerais de D de maneira analítica torna-se um problema complexo. Apesar da complexidade das dinâmicas, a adição da fase devido ao acoplamento não destrói permanentemente o surgimento de ESSs durante a evolução, sendo estes estados encontrados em todos os casos abordados neste trabalho, embora em intervalos mais curtos e em alguns casos com redução de squeezing. Em relação à essas análises, nota-se que com o aumento do parâmetro D , maior grau de squeezing é encontrado nos subsistemas, além de aumentar a frequência de ocorrência de estados ESSs. Este padrão fica ainda mais claro em casos extremos, onde o acoplamento do tipo dipolar apresenta valores ainda mais altos, como no caso apresentado na figura 26 para $D = 50$.

De maneira mais geral, as análises realizadas podem ser englobadas de forma sucinta na dependência em D dos valores mínimos do parâmetro de spin squeezing de Kitagawa e Ueda durante os ciclos. Este resultado é apresentado na figura 27. Este gráfico expõe que para valores baixos de acoplamento, ocorre diminuição do grau de squeezing em ambos os subsistemas. Conforme a intensidade deste acoplamento atinge valores mais altos, ocorre uma queda nos valores mínimos de ξ_S^2 , que apesar de algumas oscilações, se mantêm próximos do valor estabelecido pelos casos onde o acoplamento não está presente. Através destas análises é possível concluir que nos regimes abordados neste trabalho a presença de termos de acoplamento dipolar em Hamiltonianos de OAT não exclui a presença de estados ESSs durante a evolução do sistema, embora em casos de acoplamento forte esta evolução seja significativamente afetada pela presença desta interação.

Figura 26 – Parâmetro de *spin squeezing* para os subsistemas num regime $D = 50$. Fonte: o autor.

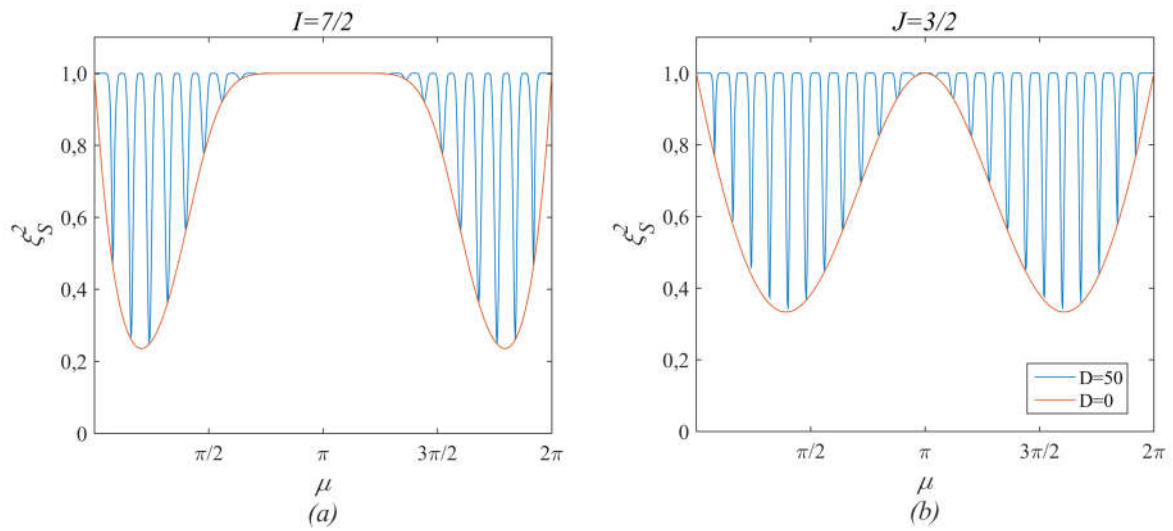


Figura 27 – Simulação numérica da variação do valor mínimo do parâmetro ξ_S^2 durante um ciclo de *spin squeezing* em função da intensidade D de interação do tipo dipolar. Fonte: o autor.

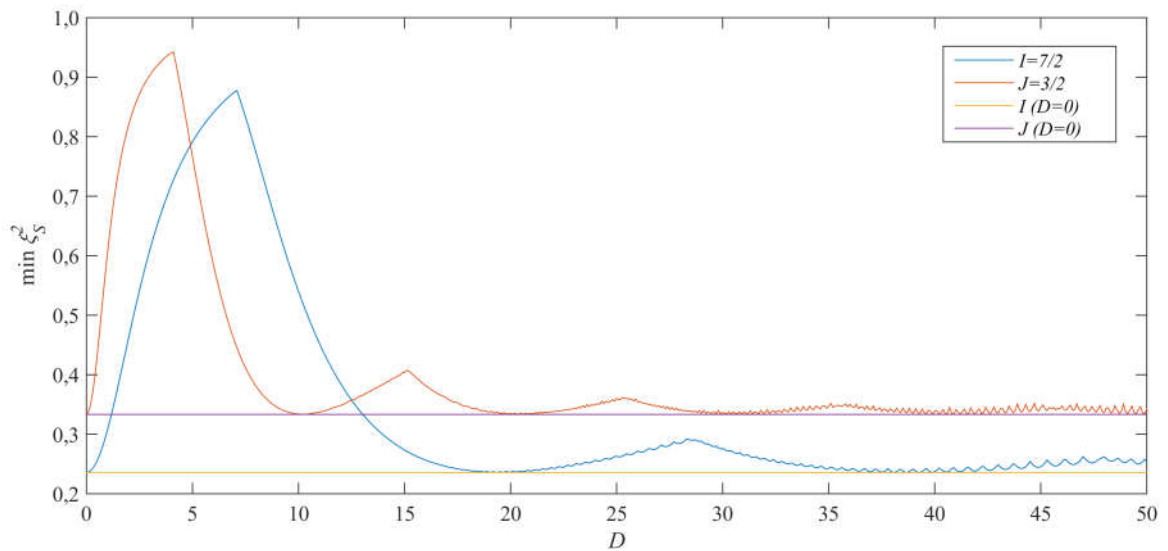
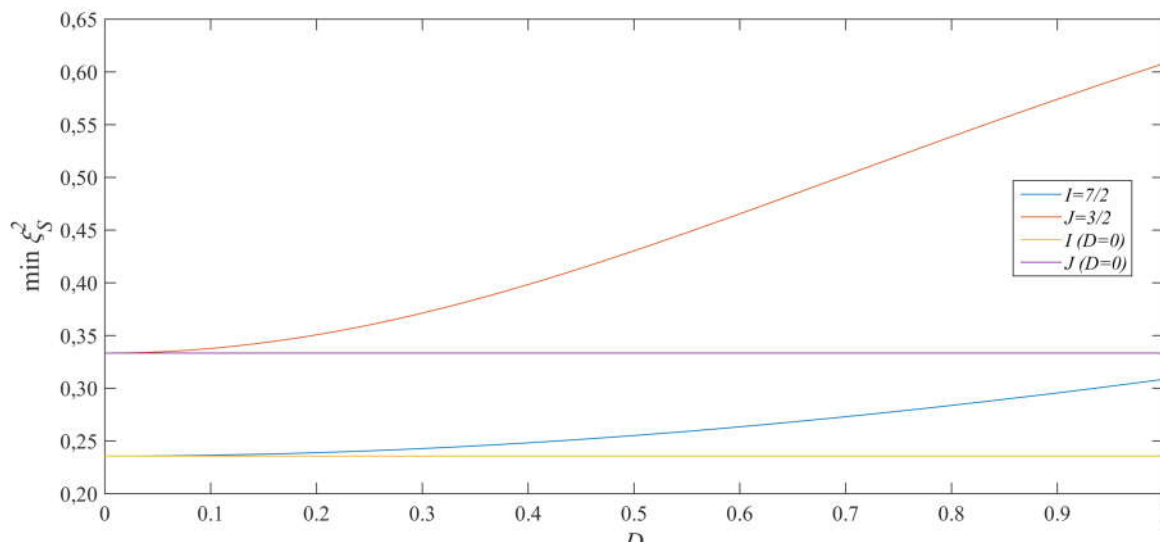


Figura 28 – Simulação numérica da variação do valor mínimo do parâmetro ξ_S^2 durante um ciclo de *spin squeezing* em função da intensidade D de interação do tipo dipolar no intervalo $0 \leq D \leq 1$. Fonte: o autor.



Em termos do Hamiltoniano relativo a núcleos quadrupolares heteronucleares em RMN em amostras de sólidos, os acoplamentos quadrupolares representam interações muito mais significativas do que acoplamentos do tipo dipolar, com frequências quadrupolares na ordem dos MHz (85), enquanto termos de acoplamento dipolar de caráter usualmente residual representam contribuições na ordem dos kHz ou inferiores (83, 84, 86, 87). Com o intuito de observar o efeito dos acoplamentos residuais no máximo grau de *spin squeezing* nestes casos, apresenta-se a figura 28, gráfico de ξ_S^2 por D num intervalo $D = 0$ à $D = 1$, equivalente a acoplamentos dipolares em mesma escala de grandeza do que acoplamentos quadrupolares. Nota-se que o grau de *spin squeezing* é afetado significativamente a partir de $D = 0.1$, equivalente à acoplamentos dipolares na ordem de centenas de kHz, bem acima dos valores usuais encontrados em experimentos de RMN com núcleos quadrupolares. Deste modo a possível implementação de Hamiltonianos de OAT na produção de *spin squeezing* em amostras onde diferentes núcleos quadrupolares estão presentes não seria afetada de maneira significativa pela presença de interações do tipo dipolo-dipolo. Por outro lado, a possibilidade de desenvolvimento de amostras específicas de cristais líquidos trazem novas perspectivas em relação aos parâmetros envolvidos em experimentos de RMN, possibilitando casos onde a interação dipolar entre núcleos quadrupolares pode apresentar um papel mais significativo na produção de *spin squeezing* neste tipo de amostra.

Outro ponto a ser destacado é relativo à forma de representar sistemas acoplados em espaços de fase de maneira completa. Neste trabalho a noção de distribuições de quasiprobabilidade em espaços de fase, mais especificamente a distribuição de Wigner, foi aplicada de modo a representar estados quânticos em sistemas de muitas partículas. Apesar de uma ferramenta útil na visualização dos estados durante as evoluções analisadas, as distribuições foram construídas através da operação traço parcial de um operador densidade global, de modo a separar os estados

quânticos de cada subsistema. Este modo de representação em espaço de fase pode prejudicar a observação de correlações entre ambos os subsistemas, como discutido em (88) no contexto de distribuições de Wigner em ótica quântica na produção de estados emaranhados. Com isso, destaca-se a necessidade de generalizações de representação em espaços de fase de sistemas de momento angular multipartidos, não conhecidos pelo autor até o momento do desenvolvimento deste trabalho.

6.4 TERMO DIPOLAR EM TERMOS DE OPERADORES BOSÔNICOS

Uma vez investigadas as consequências da adição do termo dipolar nos Hamiltonianos de OAT para dois subsistemas e seus efeitos na produção de *spin squeezing* através de núcleos quadrupolares, uma questão natural é: existe um equivalente para condensados de Bose-Einstein em poço-duplo para esse tipo de interação, uma vez que podem ser utilizados como implementação de Hamiltonianos de OAT? Para investigar esta questão é necessário estabelecer a forma do Hamiltoniano em termos de operadores bosônicos equivalente a um Hamiltoniano de interação dipolar entre momentos magnéticos. Isto pode ser feito através da aplicação da representação de Schwinger nos termos de A a F do Hamiltoniano dipolar (6.3) utilizando quatro modos bosônicos representados pelos operadores \hat{a} e \hat{b} para o primeiro sistema e \hat{c} e \hat{d} para o segundo, resultando em um Hamiltoniano da forma:

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{1}{4}c_A (\hat{n}_a - \hat{n}_b)(\hat{n}_c - \hat{n}_d) \\
 B &= -\frac{1}{4}c_A \left(\hat{a}^\dagger \hat{d}^\dagger \hat{b} \hat{c} + \hat{b}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{a} \hat{d} \right) \\
 C &= -\frac{3}{4}c_C \left(\hat{a}^\dagger \hat{b}(\hat{n}_c - \hat{n}_d) + (\hat{n}_a - \hat{n}_b)\hat{c}^\dagger \hat{d} \right) \\
 D &= -\frac{3}{4}c_C^* \left(\hat{b}^\dagger \hat{a}(\hat{n}_c - \hat{n}_d) + (\hat{n}_a - \hat{n}_b)\hat{d}^\dagger \hat{c} \right) \\
 E &= -\frac{3}{4}c_E \hat{a}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{b} \hat{d} \\
 F &= -\frac{3}{4}c_E^* \hat{b}^\dagger \hat{d}^\dagger \hat{a} \hat{c}.
 \end{aligned} \tag{6.31}$$

Para estabelecer o Hamiltoniano bosônico equivalente ao Hamiltoniano de interação dipolar para spins nucleares considerando a aproximação secular, devem ser descartados os termos C, D, E e F , assim como estabelecer dois casos específicos: o análogo ao caso de núcleos homonucleares, onde os termos A e B devem ser considerados, e o caso análogo à interação dipolar entre núcleos heteronucleares, onde apenas o termo A é mantido no Hamiltoniano. No primeiro caso, equivalente a estabelecer um mesmo número de partículas $N_1 = N_2$ em ambos os sistemas. Sendo assim, o Hamiltoniano de interação resultante neste caso é

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{4}c_A \left[(\hat{n}_a - \hat{n}_b)(\hat{n}_c - \hat{n}_d) + \hat{a}^\dagger \hat{d}^\dagger \hat{b} \hat{c} + \hat{b}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{a} \hat{d} \right], \tag{6.32}$$

onde o primeiro termo em colchetes é determinado pelas diferenças de populações nos modos de cada sistema enquanto o segundo e terceiro termos envolvem transições entre modos em cada subsistema. No segundo caso, relativo à interação entre núcleos heteronucleares, apenas o termo A seria mantido no Hamiltoniano de interação

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{4} c_A (\hat{n}_a - \hat{n}_b)(\hat{n}_c - \hat{n}_d). \quad (6.33)$$

Com a realização deste tipo de Hamiltoniano as dinâmicas analisadas na seção anterior poderiam ser realizadas num contexto de condensação de Bose-Einstein. Outro fator a se destacar, é que a implementação experimental do Hamiltoniano (6.31) representaria uma importante ferramenta na simulação de sistemas quânticos de momento angular, uma vez que a interação dipolar entre momentos magnéticos representa uma das principais contribuições de interação entre dois subsistemas de momento angular não-nulo.

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Após a definição dos conceitos básicos para a análise de *spin squeezing* e sua implementação de Hamiltonianos de OAT em sistemas de BECs em poços-duplos e núcleos quadrupolares em RMN, foram apresentadas dinâmicas de *spin squeezing* em diversos regimes quando um acoplamento inspirado pelo termo de interação dipolar entre núcleos em RMN é adicionado ao Hamiltoniano de um sistema total composto por subsistemas com $I = 7/2$ e $J = 3/2$ evoluindo através de Hamiltonianos de OAT. Das análises realizadas conclui-se que, apesar de mudanças significativas nas dinâmicas dos subsistemas, até mesmo na presença de acoplamento forte estados *spin squeezed* surgem de maneira periódica durante os ciclos. Também foram apresentados gráficos da relação entre o valor mínimo do parâmetro de *squeezing* de Kitagawa e Ueda e o coeficiente D que caracteriza a intensidade do acoplamento em relação às não-linearidades dos Hamiltonianos de OAT. Através destes gráficos é possível concluir que baseado em coeficientes usuais de experimentos em RMN, onde acoplamentos quadrupolares tem papel dominante em relação à interações dipolares de caráter residual, a produção de *spin squeezing* através de Hamiltonianos de OAT não seria afetada de maneira significativa devido à presença destas interações do tipo *spin-spin*.

Por fim, tendo em vista os tópicos abordados e os resultados obtidos, destaca-se algumas perspectivas de pesquisas futuras que complementarizam este trabalho. A primeira perspectiva destacada é a de obtenção de forma analítica das dinâmicas de *spin squeezing*, possibilitando uma análise geral para diversos valores de acoplamento, assim como de momento angular de cada subsistema, indo além dos casos $I = 7/2$ e $J = 3/2$ abordados nesta dissertação. Outra possibilidade seria a caracterização de dinâmicas de *spin squeezing* na presença de acoplamento através de outros parâmetros encontrados na literatura, como o parâmetro ξ_R^2 , ou de parâmetros associados à presença de correlações quânticas e emaranhamento, permitindo um estudo mais aprofundado da relação destes conceitos *spin squeezing*, principalmente na presença do termo dipolar, que além das correlações intrínsecas presentes devido aos Hamiltonianos de OAT, introduz correlações entre os subsistemas distintos. Associada à caracterização de correlações devidas ao termo dipolar, está a necessidade de uma representação gráfica que indicie a presença de correlações de maneira direta e visual. Como já discutido, apesar de útil na visualização de *spin squeezing* a função distribuição de Wigner como construída neste trabalho acaba por "separar" os subsistemas. Deste modo, outra perspectiva futura seria explorar novas propostas de representação em espaço de fase que permitam visualização de características locais e globais de sistemas compostos de momento angular. Por fim, aproveitando a relação entre sistemas de momento angular e sistemas bosônicos, busca-se encontrar sistemas de BECs em dois ou quatro modos que permitam a realização de Hamiltonianos de interação dipolar em termos de operadores bosônicos, permitindo a simulação de espectros de moléculas em RMN em Condensados de Bose-Einstein.

REFERÊNCIAS

- 1 HEISENBERG, W. *Physics and Philosophy: The Revolution in Modern Science*. [S.l.]: Prometheus Books, 1958.
- 2 GRIFFITHS, D. J. *Introduction to quantum mechanics*. [S.l.]: Prentice Hall, Inc., 1994.
- 3 EISBERG, R.; RESNICK, R. *Quantum physics*. [S.l.]: John Wiley New York, 1974.
- 4 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. *Quantum computation and quantum information*. [S.l.]: AAPT, 2002.
- 5 BELL, J. S. On the einstein podolsky rosen paradox. 1964.
- 6 HORODECKI, R.; HORODECKI, P.; HORODECKI, M.; HORODECKI, K. Quantum entanglement. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 81, n. 2, p. 865, 2009.
- 7 GÜHNE, O.; TÓTH, G. Entanglement detection. *Physics Reports*, Elsevier, v. 474, n. 1, p. 1–75, 2009.
- 8 GIOVANNETTI, V.; LLOYD, S.; MACCONE, L. Quantum metrology. *Physical Review Letters*, APS, v. 96, n. 1, p. 010401, 2006.
- 9 GIOVANNETTI, V.; LLOYD, S.; MACCONE, L. Advances in quantum metrology. *Nature Photonics*, Nature Research, v. 5, n. 4, p. 222–229, 2011.
- 10 ESCHER, B.; FILHO, R. de M.; DAVIDOVICH, L. General framework for estimating the ultimate precision limit in noisy quantum-enhanced metrology. *Nature Physics*, Nature Research, v. 7, n. 5, p. 406–411, 2011.
- 11 KITAGAWA, M.; UEDA, M. Squeezed spin states. *Physical Review A*, APS, v. 47, n. 6, p. 5138, 1993.
- 12 WINELAND, D. J.; BOLLINGER, J. J.; ITANO, W. M.; MOORE, F.; HEINZEN, D. Spin squeezing and reduced quantum noise in spectroscopy. *Physical Review A*, APS, v. 46, n. 11, p. R6797, 1992.
- 13 WINELAND, D. J.; BOLLINGER, J. J.; ITANO, W. M.; HEINZEN, D. Squeezed atomic states and projection noise in spectroscopy. *Physical Review A*, APS, v. 50, n. 1, p. 67, 1994.
- 14 SØRENSEN, A. S.; MØLMER, K. Entanglement and extreme spin squeezing. *Physical Review Letters*, APS, v. 86, n. 20, p. 4431, 2001.
- 15 TÓTH, G.; KNAPP, C.; GÜHNE, O.; BRIEGEL, H. J. Optimal spin squeezing inequalities detect bound entanglement in spin models. *Physical Review Letters*, APS, v. 99, n. 25, p. 250405, 2007.
- 16 TÓTH, G.; KNAPP, C.; GÜHNE, O.; BRIEGEL, H. J. Spin squeezing and entanglement. *Physical Review A*, APS, v. 79, n. 4, p. 042334, 2009.
- 17 MA, J.; WANG, X.; SUN, C.-P.; NORI, F. Quantum spin squeezing. *Physics Reports*, Elsevier, v. 509, n. 2, p. 89–165, 2011.

- 18 PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. *Bose-Einstein Condensation*. [S.l.]: Clarendon Press, 2003.
- 19 UEDA, M. *Fundamentals and New Frontiers of Bose-Einstein Condensation*. [S.l.]: World Scientific, 2010.
- 20 LEGGETT, A. J. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 73, n. 2, p. 307, 2001.
- 21 AUCCAISE, R.; ARAUJO-FERREIRA, A.; SARTHOUR, R.; OLIVEIRA, I.; BONA-GAMBA, T.; RODITI, I. Spin squeezing in a quadrupolar nuclei NMR system. *Physical Review Letters*, APS, v. 114, n. 4, p. 043604, 2015.
- 22 SCHWINGER, J. *On angular momentum*. [S.l.], 1952.
- 23 SLICHTER, C. P. *Principles of magnetic resonance*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 1.
- 24 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum mechanics*. [S.l.]: Wiley, 1977.
- 25 SAKURAI, J. *Advanced Quantum Mechanics*. [S.l.]: Pearson Education, Incorporated, 1967.
- 26 SHANKAR, R. *Principles of quantum mechanics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 27 NOETHER, E. Invariant variation problems. *Transport Theory and Statistical Physics*, Taylor & Francis, v. 1, n. 3, p. 186–207, 1971.
- 28 MARION, J.; THORNTON, S. *Classical dynamics of particles & systems*. [S.l.]: Harcourt Brace Jovanovich, 1988.
- 29 VARSHALOVICH, D.; MOSKALEV, A.; KHERSONSKII, V. *Quantum Theory of Angular Momentum*. [S.l.]: World Scientific Pub., 1988.
- 30 GRIFFITHS, D. J. *Introduction to electrodynamics*. [S.l.]: Prentice Hall, 1962.
- 31 RADCLIFFE, J. Some properties of coherent spin states. *Journal of Physics A: General Physics*, IOP Publishing, v. 4, n. 3, p. 313, 1971.
- 32 INOMATA, A.; KURATSUJI, H.; GERRY, C. *Path Integrals and Coherent States of SU(2) and SU(1,1)*. [S.l.]: World Scientific, 1992.
- 33 GAZEAU, J.-P. *Coherent states in quantum physics*. [S.l.]: Wiley, 2009.
- 34 EVERITT, B.; SKRONDAL, A. *The Cambridge dictionary of statistics*. [S.l.]: Cambridge University Press Cambridge, 2002. v. 106.
- 35 AGARWAL, G. S. Relation between atomic coherent-state representation, state multipoles, and generalized phase-space distributions. *Physical Review A*, APS, v. 24, n. 6, p. 2889, 1981.
- 36 SÁNCHEZ-SOTO, L.; KLIMOV, A.; HOZ, P. de la; LEUCHS, G. Quantum versus classical polarization states: when multipoles count. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, IOP Publishing, v. 46, n. 10, p. 104011, 2013.

- 37 BENEDICT, M.; CZIRJÁK, A. Wigner functions, squeezing properties, and slow decoherence of a mesoscopic superposition of two-level atoms. *Physical Review A*, APS, v. 60, n. 5, p. 4034, 1999.
- 38 GROSS, C. Spin squeezing, entanglement and quantum metrology with bose–einstein condensates. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, IOP Publishing, v. 45, n. 10, p. 103001, 2012.
- 39 HE, Q. Y.; REID, M. D.; VAUGHAN, T. G.; GROSS, C.; OBERTHALER, M.; DRUMMOND, P. D. Einstein-podolsky-rosen entanglement strategies in two-well Bose-Einstein condensates. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 106, p. 120405, 2011.
- 40 LUIZ, F.; DUZZIONI, E.; SANZ, L. Implementation of quantum logic gates using coupled Bose-Einstein condensates. *Brazilian Journal of Physics*, Springer, v. 45, n. 5, p. 550–559, 2015.
- 41 MILBURN, G.; CORNEY, J.; WRIGHT, E. M.; WALLS, D. Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential. *Physical Review A*, APS, v. 55, n. 6, p. 4318, 1997.
- 42 SPEKKENS, R. W.; SIPE, J. E. Spatial fragmentation of a Bose-Einstein condensate in a double-well potential. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 59, p. 3868–3877, 1999.
- 43 NAZAROV, Y. V.; DANON, J. *Advanced quantum mechanics: A practical guide*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2013.
- 44 ADAMS, C.; RIIS, E. Laser cooling and trapping of neutral atoms. *Progress in Quantum Electronics*, Elsevier, v. 21, n. 1, p. 1–79, 1997.
- 45 KETTERLE, W.; DRUTEN, N. V. Evaporative cooling of trapped atoms. *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*, Elsevier, v. 37, p. 181–236, 1996.
- 46 ADAMS, C. S. Atom optics. *Contemporary Physics*, Taylor & Francis, v. 35, n. 1, p. 1–19, 1994.
- 47 CRONIN, A. D.; SCHMIEDMAYER, J.; PRITCHARD, D. E. Optics and interferometry with atoms and molecules. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society, v. 81, p. 1051–1129, 2009.
- 48 BLOCH, I.; DALIBARD, J.; NASCIMBENE, S. Quantum simulations with ultracold quantum gases. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 4, p. 267, 2012.
- 49 ANDERSON, M. H.; ENSHER, J. R.; MATTHEWS, M. R.; WIEMAN, C. E.; CORNELL, E. A. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995.
- 50 NEGELE, J.; ORLAND, H. *Quantum Many-particle Systems*. [S.l.]: Westview Press, 2008.
- 51 ANANIKIAN, D.; BERGEMAN, T. Gross-pitaevskii equation for bose particles in a double-well potential: Two-mode models and beyond. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 73, p. 013604, 2006.
- 52 FU, L.; LIU, J. Quantum entanglement manifestation of transition to nonlinear self-trapping for Bose-Einstein condensates in a symmetric double well. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 74, p. 063614, 2006.

- 53 BERRADA, T. *Interferometry with Interacting Bose-Einstein Condensates in a Double-Well Potential*. [S.l.]: Springer International Publishing, 2015.
- 54 WEN, L.; XIONG, H.; WU, B. et al. Hidden vortices in a Bose-Einstein condensate in a rotating double-well potential. *Physical Review A*, APS, v. 82, n. 5, p. 053627, 2010.
- 55 RUOSTEKOSKI, J.; WALLS, D. F. Bose-Einstein condensate in a double-well potential as an open quantum system. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 58, p. R50–R53, 1998.
- 56 JAVANAINEN, J.; IVANOV, M. Y. Splitting a trap containing a Bose-Einstein condensate: Atom number fluctuations. *Physical Review A*, APS, v. 60, n. 3, p. 2351, 1999.
- 57 LEWENSTEIN, M.; SANPERA, A.; AHUFINGER, V. *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating Quantum Many-body Systems*. [S.l.]: OUP Oxford, 2012.
- 58 JAKSCH, D.; BRUDER, C.; CIRAC, J. I.; GARDINER, C. W.; ZOLLER, P. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Physical Review Letters*, APS, v. 81, n. 15, p. 3108, 1998.
- 59 BENENTI, G.; CASATI, G.; STRINI, G. *Principles of Quantum Computation and Information*. [S.l.]: World Scientific, 2004.
- 60 SCULLY, M.; ZUBAIRY, M. *Quantum Optics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1997.
- 61 LOUCHET-CHAUVET, A.; APPEL, J.; RENEMA, J. J.; OBLAK, D.; KJAERGAARD, N.; POLZIK, E. S. Entanglement-assisted atomic clock beyond the projection noise limit. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 12, n. 6, p. 065032, 2010.
- 62 SØRENSEN, A.; DUAN, L.-M.; CIRAC, J.; ZOLLER, P. Many-particle entanglement with Bose-Einstein condensates. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 409, n. 6816, p. 63, 2001.
- 63 HAMMERER, K.; SØRENSEN, A. S.; POLZIK, E. S. Quantum interface between light and atomic ensembles. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 82, n. 2, p. 1041, 2010.
- 64 BOUCHOULE, I.; MØLMER, K. Spin squeezing of atoms by the dipole interaction in virtually excited rydberg states. *Physical Review A*, APS, v. 65, n. 4, p. 041803, 2002.
- 65 GLAUBER, R. J. The quantum theory of optical coherence. *Physical Review*, APS, v. 130, n. 6, p. 2529, 1963.
- 66 GLAUBER, R. J. Coherent and incoherent states of the radiation field. *Physical Review*, APS, v. 131, n. 6, p. 2766, 1963.
- 67 PERELOMOV, A. *Generalized coherent states and their applications*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 68 DODONOV, V. Nonclassical states in quantum optics: squeezed review of the first 75 years. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, IOP Publishing, v. 4, n. 1, p. R1, 2002.
- 69 WALLS, D.; ZOLLER, P. Reduced quantum fluctuations in resonance fluorescence. *Physical Review Letters*, APS, v. 47, n. 10, p. 709, 1981.
- 70 SHEN, Y.-R. *The principles of nonlinear optics*. New York, Wiley-Interscience, 1984, 575 p., 1984.

- 71 POLZIK, E.; CARRI, J.; KIMBLE, H. Spectroscopy with squeezed light. *Physical Review Letters*, APS, v. 68, n. 20, p. 3020, 1992.
- 72 FURUSAWA, A.; SØRENSEN, J. L.; BRAUNSTEIN, S. L.; FUCHS, C. A.; KIMBLE, H. J.; POLZIK, E. S. Unconditional quantum teleportation. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 282, n. 5389, p. 706–709, 1998.
- 73 LVOVSKY, A. Squeezed light. *Photonics: Scientific Foundations Technology and Applications*, v. 1, 2014.
- 74 JIN, G.-R.; LIU, Y.-C.; LIU, W.-M. Spin squeezing in a generalized one-axis twisting model. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 11, n. 7, p. 073049, 2009.
- 75 LAW, C.; NG, H.; LEUNG, P. Coherent control of spin squeezing. *Physical Review A*, APS, v. 63, n. 5, p. 055601, 2001.
- 76 MITCHELL, T. N.; COSTISELLA, B. *NMR-From spectra to structures*. [S.l.]: Springer, 2004.
- 77 KEELER, J. *Understanding NMR spectroscopy*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011.
- 78 DAMADIAN, R. *NMR in Medicine*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 19.
- 79 CORY, D. G.; LAFLAMME, R.; KNILL, E.; VIOLA, L.; HAVEL, T.; BOULANT, N.; BOUTIS, G.; FORTUNATO, E.; LLOYD, S.; MARTINEZ, R. et al. NMR based quantum information processing: Achievements and prospects. *Fortschritte der Physik*, Wiley Online Library, v. 48, n. 9-11, p. 875–907, 2000.
- 80 VANDERSYPEN, L. M.; CHUANG, I. L. NMR techniques for quantum control and computation. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 76, n. 4, p. 1037, 2005.
- 81 OLIVEIRA, I.; JR, R. S.; BONAGAMBA, T.; AZEVEDO, E.; FREITAS, J. C. *NMR quantum information processing*. [S.l.]: Elsevier, 2011.
- 82 GEORGESCU, I.; ASHHAB, S.; NORI, F. Quantum simulation. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 86, n. 1, p. 153, 2014.
- 83 JERSCHOW, A. Dipolar and scalar couplings in solid state NMR of quadrupolar nuclei. In: *Current Developments in Solid State NMR Spectroscopy*. [S.l.]: Springer, 2002. p. 1–16.
- 84 FAUCHER, A.; TERSKIKH, V. V.; WASYLISHEN, R. E. Spin–spin coupling between quadrupolar nuclei in solids: 11b–75as spin pairs in lewis acid–base adducts. *The Journal of Physical Chemistry A*, ACS Publications, v. 119, n. 27, p. 6949–6960, 2015.
- 85 WASYLISHEN, R. E.; ASHBROOK, S. E.; WIMPERIS, S. *NMR of quadrupolar nuclei in solid materials*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2012.
- 86 PERRAS, F. A.; BRYCE, D. L. Residual dipolar coupling between quadrupolar nuclei under magic-angle spinning and double-rotation conditions. *Journal of Magnetic Resonance*, Elsevier, v. 213, n. 1, p. 82–89, 2011.
- 87 IUGA, D.; MORAIS, C.; GAN, Z.; NEUVILLE, D. R.; CORMIER, L.; MASSIOT, D. NMR heteronuclear correlation between quadrupolar nuclei in solids. *Journal of the American Chemical Society*, v. 127, p. 11540–11541, 2005.

88 WANG, C.; GAO, Y. Y.; REINHOLD, P.; HEERES, R. W.; OFEK, N.; CHOU, K.; AXLINE, C.; REAGOR, M.; BLUMOFF, J.; SLIWA, K. et al. A schrödinger cat living in two boxes. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 352, n. 6289, p. 1087–1091, 2016.

89 PU, H.; BIGELOW, N. Collective excitations, metastability, and nonlinear response of a trapped two-species Bose-Einstein condensate. *Physical Review Letters*, APS, v. 80, n. 6, p. 1134, 1998.

90 LOUIS, P.; BRYDON, P.; SAVAGE, C. Macroscopic quantum superposition states in Bose-Einstein condensates: Decoherence and many modes. *Physical Review A*, APS, v. 64, n. 5, p. 053613, 2001.

APÊNDICE A – CONDENSADOS DE DUAS ESPÉCIES EM POÇOS-DUPLOS E O HAMILTONIANO DIPOLAR

Como citado em 6.4, a implementação experimental do Hamiltoniano bosônico (6.31) possibilitaria investigação de interações dipolares de caráter magnético em termos de sistemas bosônicos de muitas partículas em armadilhas óptico-magnéticas. Longe de resolver o assunto, este apêndice busca apenas sugerir uma possível implementação deste Hamiltoniano, embora uma análise detalhada dos coeficientes envolvidos deva ser realizada para avaliar a possibilidade de realização de tais sistemas. Esta alternativa de implementação de interação dipolar entre momentos magnéticos em sistemas de BECs em poço-duplo seria um sistema composto por condensados de duas espécies atômicas interagentes contidas em um mesmo potencial de poço-duplo, conforme as referências (89) e (90). Novamente o formalismo empregado é de Segunda Quantização, com Hamiltoniano contendo operadores de um e dois corpos. Cada espécie, que serão designadas por 1 e 2, possui seus próprios operadores de campo $\hat{\Psi}_1$ e $\hat{\Psi}_2$. Num processo análogo ao discutido para BECs de uma espécie em poços-duplos, assume-se novamente a validade da aproximação de dois modos para cada espécie, de modo que os operadores de campo podem ser expandidos em termos de operadores de aniquilação de partículas em cada modo:

$$\hat{\Psi}_1 = \frac{\varphi_g + \varphi_e}{\sqrt{2}} \hat{a} + \frac{\varphi_g - \varphi_e}{\sqrt{2}} \hat{b} \quad (\text{A.1})$$

e

$$\hat{\Psi}_2 = \frac{\psi_g + \psi_e}{\sqrt{2}} \hat{c} + \frac{\psi_g - \psi_e}{\sqrt{2}} \hat{d}, \quad (\text{A.2})$$

sendo \hat{a} e \hat{c} operadores de aniquilação de partículas no primeiro poço e \hat{b} e \hat{d} do segundo. Como no caso de uma espécie, $\varphi_{g,e}$ e $\psi_{g,e}$ representam as funções de onda dos modos fundamentais e excitados de cada espécie. Desconsiderando as interações de partículas de espécies diferentes, esta descrição resulta em um Hamiltoniano total composto pela soma de Hamiltonianos de Bose-Hubbard, sendo os cálculos idênticos ao formalismo aplicado no Capítulo 2. Ao considerarmos as interações entre partículas de espécies diferentes um novo termo deve ser adicionado ao Hamiltoniano:

$$\hat{H}_{12} = \frac{g_{12}}{2} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_1^\dagger \hat{\Psi}_2^\dagger \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2. \quad (\text{A.3})$$

A expansão deste operador de dois corpos em termos da aproximação de dois modos resulta em um Hamiltoniano similar ao Hamiltoniano de interação dipolar magnética em termos de

operadores bosônicos:

$$\begin{aligned}
A &= c_A (\hat{n}_a - \hat{n}_b)(\hat{n}_c - \hat{n}_d) \\
B &= \frac{1}{4} c_B \left(\hat{a}^\dagger \hat{d}^\dagger \hat{b} \hat{c} + \hat{b}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{a} \hat{d} \right) \\
C &= \frac{1}{2} \left(c_{C_1} \hat{a}^\dagger \hat{b} (\hat{n}_c - \hat{n}_d) + c_{C_2} (\hat{n}_a - \hat{n}_b) \hat{c}^\dagger \hat{d} \right) \\
D &= \frac{1}{2} \left(c_{C_1} \hat{b}^\dagger \hat{a} (\hat{n}_c - \hat{n}_d) + c_{C_2} (\hat{n}_a - \hat{n}_b) \hat{d}^\dagger \hat{c} \right) \\
E &= c_B \hat{a}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{b} \hat{d} \\
F &= c_B \hat{b}^\dagger \hat{d}^\dagger \hat{a} \hat{c}.
\end{aligned} \tag{A.4}$$

porém com dois termos extras:

$$\begin{aligned}
G &= \frac{1}{4} c_G N_1 N_2 \\
H &= \frac{1}{2} (c_{H_1} N_1 (\hat{n}_c - \hat{n}_d) + c_{H_2} N_2 (\hat{n}_a - \hat{n}_b)) + \\
&+ \frac{1}{4} \left(c_{H_3} N_B (\hat{a}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{a}) + c_{H_4} N_A (\hat{c}^\dagger \hat{d} + \hat{d}^\dagger \hat{c}) \right)
\end{aligned} \tag{A.5}$$

onde $N_{1,2}$ representa o número de partículas de cada espécie, sendo os coeficientes contidos neste Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
c_A &= \int \varphi_g \varphi_e \psi_g \psi_e d\mathbf{r} \\
c_B &= \int (\varphi_g^2 - \varphi_e^2) (\psi_g^2 - \psi_e^2) d\mathbf{r} \\
c_{C_1} &= \int (\varphi_g^2 - \varphi_e^2) \psi_g \psi_e d\mathbf{r} \\
c_{C_2} &= \int (\psi_g^2 - \psi_e^2) \varphi_g \varphi_e d\mathbf{r} \\
c_G &= \int (\varphi_g^2 + \varphi_e^2) (\psi_g^2 + \psi_e^2) d\mathbf{r} \\
c_{H_1} &= \int (\varphi_g^2 + \varphi_e^2) \psi_g \psi_e d\mathbf{r} \\
c_{H_2} &= \int (\psi_g^2 + \psi_e^2) \varphi_g \varphi_e d\mathbf{r} \\
c_{H_3} &= \int (\varphi_g^2 - \varphi_e^2) (\psi_g^2 + \psi_e^2) d\mathbf{r} \\
c_{H_4} &= \int (\varphi_g^2 + \varphi_e^2) (\psi_g^2 - \psi_e^2) d\mathbf{r}.
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Uma vez que os termos essenciais para realizar (6.31) estão contidos neste Hamiltoniano, uma investigação detalhada dos coeficientes para determinados regimes permitiria avaliar a possibilidade de simulação de Hamiltonianos de interação dipolar em termos de operadores bosônicos.