

ALGUNS ASPECTOS DA
DINÂMICA QUÂNTICA DE UMA
PARTÍCULA BROWNIANA

AMIR O. CALDEIRA

notas de física ifgw

ALGUNS ASPECTOS
DA
DINÂMICA QUÂNTICA
DE UMA
PARTÍCULA BROWNIANA

POR
AMIR O. CALDEIRA

CURSO DO GRUPO INTERDEPARTAMENTAL DE FÍSICA TEÓRICA MINISTRADO
DURANTE O 2º SEMESTRE DE 1986 E 1º SEMESTRE DE 1987

ÍNDICE

I. Introdução	3
II. Movimento Browniano Clássico	8
a) Equação de Fokker-Planck	8
b) Exemplo de Interesse	15
III. Formulação Quântica	22
a) O modelo	24
b) O operador densidade reduzido dinâmico	29
c) O operador densidade reduzido em equilíbrio	40
IV. Aplicações	44
a) Dinâmica de pacotes de onda em potenciais simples	44
b) Destruição da interferência quântica em meios dissipativos	53
c) Tunelamento de uma partícula browniana (decaimento)	60
V. Conclusões	70
Apêndice I	72
Apêndice II	81
Apêndice III	84
Referências	95

I. Introdução

No século passado, o botânico inglês R. Brown observou que pequenas partículas imersas em um fluido viscoso apresentavam um movimento extremamente irregular. Quando não havia qualquer força externa aplicada à partícula, sua velocidade média, $\langle \vec{v} \rangle$, era nula e sua variância, $\langle \vec{v}^2 \rangle$, apresentava um valor finito (os valores médios são tomados em um ensemble de sistemas identicamente preparados). Este fenômeno é, desde então, conhecido como "movimento browniano".

A abordagem teórica mais conhecida no tratamento deste tipo de movimento é feita através da equação de Langevin, que é escrita como [1]

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + V'(q) = f(t) \quad , \quad (1.1a)$$

onde M é a massa da partícula, η é a constante de dissipação e $V(q)$ é o potencial externo ao qual a partícula está sujeita. $f(t)$ é a chamada "força flutuante", que obedece às seguintes relações:

$$\langle f(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle f(t)f(t') \rangle = 2\eta kT \delta(t-t') \quad . \quad (1.1b)$$

Assim como qualquer outra equação fenomenológica, a (1.1a) só é válida quando sujeita a algumas restrições. A equação de Langevin é uma boa descrição do movimento acima mencionado quando

- a massa, M , da partícula browniana é tal que $M \gg m$ onde m é a massa das moléculas do fluido viscoso e
- estamos interessados no comportamento da partícula a tempos longos. Neste caso, estamos nos referindo a tempos longos comparados com o tempo médio entre as colisões moleculares.

Embora tenhamos usado um exemplo clássico para introduzir a idéia do movimento browniano, existem inúmeros sistemas que serviriam ao mesmo propósito. Cabe aqui mencionar um segundo exemplo que será mais útil para os nossos objetivos neste curso. Trata-se da dinâmica do fluxo do campo magnético no interior de um circuito RLC, que obedece à equação de movimento

$$C\ddot{\phi} + \frac{RC}{L}\dot{\phi} + \frac{\phi}{L} = I_f(t) \quad (1.2)$$

onde $\langle I_f(t) \rangle = 0$ e $\langle I_f(t)I_f(t') \rangle = \frac{2RCkT}{L} \delta(t-t')$. Aqui, R , L e C são, respectivamente, a resistência, a indutância e a capacitância do circuito considerado e $I_f(t)$ é a chamada corrente flutuante.

Em sua grande maioria, muitos destes sistemas apresentam um comportamento puramente clássico. No primeiro exemplo, embora a partícula browniana seja extremamente leve (em termos macroscópicos), sua massa é ainda muito maior que a das moléculas do fluido viscoso. No segundo exemplo, a frequência típica do circuito, $1/\sqrt{LC}$, é tal que $\hbar/kT\sqrt{LC} \lll 1$ mesmo a temperaturas extremamente baixas. A fim de tornar este argumento quantitativo, devemos dizer que os efeitos quânticos são desprezíveis quando

$$\frac{\hbar\omega_0}{k} = T_0 \lll 1^\circ\text{K} \quad , \quad (1.3)$$

onde $\omega_0^2 = \frac{V''(q_0)}{M}$ com $V'(q_0) = 0$ e $V''(q_0) > 0$. $V(q)$ é o potencial ao qual a partícula está sujeita.

Com o grande progresso alcançado na fabricação de micro-circuitos supercondutores, foram criados dispositivos com $T_0 \leq 1^\circ\text{K}$, uma temperatura facilmente atingida com a atual tecnologia disponível em criogenia. Desta forma, deveríamos esperar a manifestação de efeitos quânticos nestes circuitos em condições bem razoáveis. O paradigma destes sistemas é o chamado "SQUID" (superconducting quantum interference device) [2] que é um anel supercondutor fechado por um contacto fraco, onde o fluxo do campo magnético é descrito por uma equação de Langevin sob a ação de um "potencial" $U(\phi)$. Este potencial, quando controlado por um campo magnético externo, pode assumir formas variadas que são apropriadas para a observação de uma rica variedade de efeitos quânticos. Nas figuras abaixo, três formas distintas do potencial $U(\phi)$ estão indicadas para diferentes valores do campo externo.

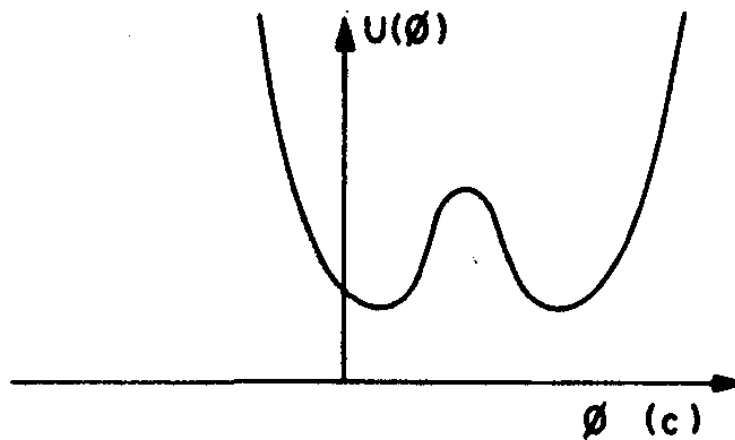
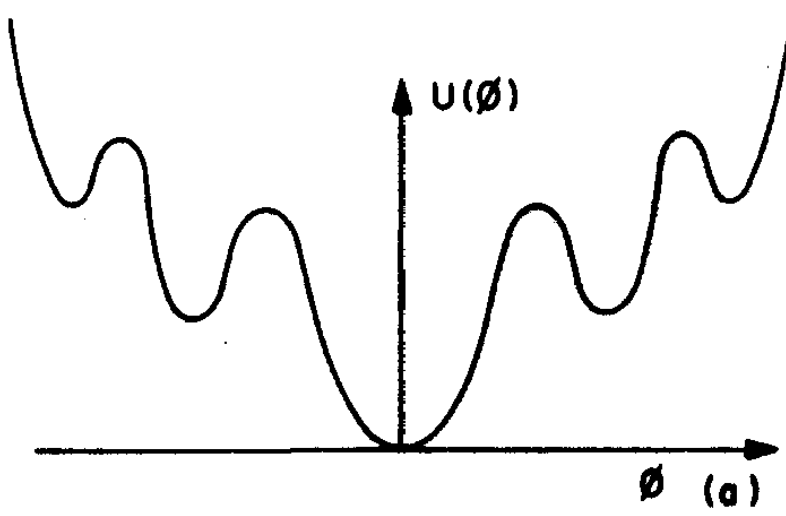


Fig. 1: Três formas possíveis de $U(\phi)$

a) Potencial estável

b) Potencial metaestável

c) Potencial biestável

Na fig. 1a a dinâmica de ϕ está restrita à região acessível no limite clássico. Neste caso pode-se estudar a estrutura dos níveis de energia deste sistema ou o movimento de pacotes de onda convenientemente preparados. A forma de $U(\phi)$ na fig. 1b é apropriada para o estudo do decaimento do valor inicial de ϕ via tunelamento quântico, enquanto que o tunelamento coerente pode ser investigado no caso 1c. Uma breve introdução aos SQUIDS será feita no próximo capítulo.

Ainda que os parâmetros do sistema considerado sejam tais que o tornem um forte candidato a exibir efeitos quânticos, três pontos fundamentais merecem atenção especial no momento.

Primeiramente, devemos notar que, em muitos casos, as variáveis dinâmicas em questão são variáveis macroscópicas, ou seja, são originárias de um efeito que envolve um número macroscopicamente grande de partículas. Assim sendo, qual seria o significado físico desta "quantização macroscópica"? No caso particular do SQUID, sabemos que $\phi = \oint \vec{A} \cdot d\vec{\ell}$ ao longo do circuito supercondutor. Portanto, a resposta neste caso seria que a variável que estamos quantizando é, na verdade, o campo eletromagnético sujeito às condições de contorno impostas pela física de materiais supercondutores e de contatos fracos. A interpretação em outros casos não é tão simples. Apesar desta ser uma questão de importância fundamental, não estaremos interessados em abordá-la neste curso. Consequentemente, iremos assumir a quantização destes sistemas dinâmicos como possível "a priori".

O segundo problema, diz respeito à quantização de sistemas não isolados. Equações do tipo (1.1) apresentam um termo dissipativo da forma $\eta \dot{q}$ e uma força flutuante $f(t)$. Por outro lado, sabemos que não existe uma hamiltoniana, $H(p,q)$, cujas equações de Hamilton reproduzam (1.1). Desta forma, ficamos impossibilitados de aplicar a formulação usual da quantização canônica para este tipo de sistema. A questão pertinente é, então: como podemos conciliar o processo de quantização usual com equações de movimento dissipativas?

Finalmente, se formos capazes de responder a questão anterior, qual será a influência dos termos dissipativo e flutuante nos diversos efeitos quânticos que exemplificamos acima? Será possível descrevê-la única e exclusivamente em função de constantes fenomenológicas (como,

por exemplo, η)?

São, exatamente, nestes dois últimos problemas que concentraremos todos os nossos esforços durante este curso. Inicialmente, tentaremos encontrar um sistema quântico cujo limite clássico reproduza equações de movimento do tipo da equação de Langevin. Posteriormente, resolveremos o problema quântico no caso de interesse. Porém, antes de entrar nos detalhes específicos destes problemas, faremos um breve resumo de como deveremos atingir nossos objetivos.

O problema da quantização de sistemas dissipativos vem sendo tratado já há algum tempo dentro de dois enfoques bem distintos. O primeiro deles envolve a tentativa de modificação do esquema de quantização canônico [3-7] a fim de podermos quantizar sistemas físicos não hamiltonianos. Apesar da grande maioria destes métodos ser de extrema criatividade matemática, sempre acabam por apresentar alguns pontos bem obscuros no que diz respeito a certos princípios físicos. O segundo enfoque mantém a quantização canônica inalterada mas muda o sistema. Esta abordagem baseia-se no fato dos sistemas dissipativos não serem isolados. Assim sendo, considera-se explicitamente o acoplamento do sistema de interesse a um reservatório, para então quantizar o sistema composto dentro do esquema usual. Posteriormente, elimina-se as variáveis do reservatório e estuda-se a dinâmica efetiva do sistema de interesse. Este método foi proposto originalmente por Senitzky [8] no estudo da relaxação de modos normais do campo eletromagnético dentro de uma cavidade.

Neste trabalho, adotaremos o segundo método. Estudaremos o sistema composto descrito pela seguinte hamiltoniana

$$H = H_R + H_I + H_S \quad (1.4)$$

onde H_R , H_I e H_S representam as hamiltonianas do reservatório (R), interação (I) e do sistema de interesse (S), respectivamente. Assim, podemos (pelo menos em princípio) computar o operador densidade do sistema composto através de

$$\hat{\rho}(t) = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \hat{\rho}(0) \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) \quad (1.5)$$

Como estamos interessados em operadores referentes apenas ao sistema S, $\hat{O} = \hat{O}(p,q)$, temos

$$\langle \hat{O}(p,q) \rangle = \text{tr}_{RS} \{ \hat{\rho}(t) \hat{O} \} = \text{tr}_S \{ [\text{tr}_R \hat{\rho}(t)] \hat{O} \} = \text{tr}_S \{ \tilde{\rho}(t) \hat{O} \} \quad (1.6)$$

onde tr_R (tr_S) representa o traço parcial com respeito a R(S) e

$$\tilde{\rho}(t) = \text{tr}_R \hat{\rho}(t) \quad (1.7)$$

o div. reduzido do sistema

é o operador densidade reduzido do sistema de interesse. Nosso problema será, então, escolher H_R e H_I convenientemente, de tal forma que $\tilde{\rho}(t)$ reproduza, no limite clássico, todos os resultados esperados da teoria clássica do movimento browniano [9].

Uma vez que tenhamos atingido esta meta, podemos estudar problemas específicos, tais como:

- i) Movimento de pacotes de onda em meios dissipativos, [9]
- ii) Influência da dissipação no processo de interferência quântica. [10]
- iii) Influência da dissipação no decaimento por tunelamento. [11]
- iv) Influência da dissipação no tunelamento coerente. [12]
- v) Movimento browniano em um potencial periódico. [13]

Neste curso estaremos particularmente interessados em problemas do tipo i, ii e iii. A razão desta escolha é dupla; fazer com que o curso tenha realmente um caráter introdutório na área e limitação de tempo. Os dois últimos problemas são muito semelhantes entre si no que diz respeito à formulação matemática empregada. Recomendo fortemente ao leitor a ref. [12] para um minucioso tratamento do problema.

II. Movimento Browniano Clássico

a) Equação de Fokker-Planck

No nosso capítulo introdutório, apresentamos a equação de movimento de uma partícula browniana clássica (eq. (1.1)). Esta equação envolve o conceito de "força flutuante" que, obviamente, introduz um

caráter probabilístico na variável dinâmica $q(t)$. Uma maneira simples de entender este processo é através da construção de um ensemble estatístico de partículas brownianas igualmente preparadas e sujeitas aos mesmos parâmetros externos. Após decorrido um intervalo de tempo t , cada uma das partículas ocupará diferentes posições devido ao fato de terem estado sujeitas a uma força aleatória $f(t')$ no intervalo $0 < t' < t$. Desta forma podemos definir a probabilidade, $P(q,t)dq$, da partícula browniana estar no intervalo $[q, q+dq]$ no instante t , o que nos permite calcular o valor médio de qualquer função $g(q)$.

Nosso objetivo nesta seção é o de obter uma equação que descreva a evolução de $P(q,t)$ no caso do movimento browniano. Porém, antes de especializar esta seção para o problema de interesse imediato, vamos introduzir alguns conceitos úteis da teoria dos processos estocásticos [14,15] (processos cujos valores das variáveis envolvidas só podem ser determinados pelo resultado da experiência).

Seja $y(t)$ uma variável que possa assumir qualquer valor no intervalo $-\infty < y < \infty$ em um dado instante t . A densidade de probabilidade da variável $y(t)$ assumir o valor y_1 no instante t_1 é escrita como $P_1(y_1, t_1)$. Este conceito pode ser generalizado para o caso de n eventos através da densidade de probabilidade de $y(t)$ assumir o valor y_1 em t_1 , y_2 em t_2 e assim sucessivamente até y_n em t_n , que é descrita por

$$\int_{R^n} P_n(y_n, t_n; \dots; y_1, t_1) dy_1 \dots dy_n = 1 \quad (2a.1)$$

Outra característica de P_n é que ao ser integrada com respeito a uma de suas variáveis, reduz-se à função P_{n-1} :

$$\int dy_n P_n(y_n, t_n; \dots; y_1, t_1) = P_{n-1}(y_{n-1}, t_{n-1}; \dots; y_1, t_1) \quad (2a.2)$$

e o momento da variável aleatória $y(t)$ nos instantes $t_1, \dots, t_n$ é dado por

$$\langle y(t_1) \dots y(t_n) \rangle = \int_{R^n} dy_1 \dots dy_n y_1 \dots y_n P_n(y_n, t_n; \dots; y_1, t_1) \quad (2a.3)$$

O processo é dito estacionário se

$$P_n(y_n, t_n; \dots, y_1, t_1) = P_n(y_n, t_n + \tau; \dots; y_1, t_1 + \tau) \quad (2a.4)$$

o que implica em $P_1(y_1, t_1) = P_1(y_1)$ e $P_2(y_2, t_2; y_1, t_1) = P_2(y_2, t_2 - t_1; y_1, 0)$.

Outro conceito importante é o da probabilidade condicional. Aqui definimos o conceito da densidade de probabilidade da variável $y(t)$ assumir o valor y_2 no instante t_2 dado que no instante t_1 seu valor era y_1 como

$$P_{11}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = \frac{P_2(y_2, t_2; y_1, t_1)}{P_1(y_1, t_1)} \quad (2a.5)$$

Integrando a equação acima com respeito a y_1 e usando (2a.2) temos

$$P_1(y_2, t_2) = \int dy_1 P_{11}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) \quad (2a.6)$$

que, então, integrada com respeito a y_2 nos dá a normalização da densidade de probabilidade condicional

$$\int dy_2 P_{11}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = 1 \quad (2a.7)$$

A generalização do conceito de probabilidade condicional dá-se através da função

$$\begin{aligned} P_{\ell k}(y_{k+\ell}, t_{k+\ell}; \dots; y_{k+1}, t_{k+1} | y_k, t_k; \dots; y_1, t_1) &= \\ &= \frac{P_{k+\ell}(y_{k+\ell}, t_{k+\ell}; \dots; y_1, t_1)}{P_k(y_k, t_k; \dots; y_1, t_1)} \end{aligned} \quad (2a.8)$$

que representa a densidade de probabilidade de $y(t)$ assumir os valores $y_{k+1}, \dots, y_{k+\ell}$ nos instantes $t_{k+1}, \dots, t_{k+\ell}$ dado que os valores assumidos em $t_1, \dots, t_k$ foram $y_1, \dots, y_k$.

De posse das funções definidas acima podemos introduzir dois

tipos de processos estocásticos particularmente importantes em física. O primeiro é o chamado processo independente onde

$$P_n(y_n, t_n; \dots; y_2, t_2) = \prod_{i=1}^n P_1(y_i, t_i) \quad (2a.9)$$

e portanto não existe nenhuma correlação entre os valores de $y(t)$ em t_1 e t_{1+1} . O segundo é o processo Markoviano onde

$$P_{1,n-1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}; \dots; y_1, t_1) = P_{11}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}) \quad (2a.10)$$

o que significa que o valor y_n só está correlacionado com y_{n-1} e é totalmente independente dos demais.

Em um processo Markoviano podemos escrever

$$\begin{aligned} P_3(y_3, t_3; y_2, t_2; y_1, t_1) &= P_{12}(y_3, t_3 | y_2, t_2; y_1, t_1) P_2(y_2, t_2; y_1, t_1) \\ &= P_{11}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{11}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) \end{aligned} \quad (2a.11)$$

que integrada em y_2 resulta em

$$P_2(y_3, t_3; y_1, t_1) = P_1(y_1, t_1) \int dy_2 P_{11}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{11}(y_2, t_2 | y_1, t_1) \quad (2a.12)$$

Com o auxílio de (2a.5) esta reduz-se à equação de Chapman-Kolmogorov

$$P_{11}(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int dy_2 P_{11}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{11}(y_2, t_2 | y_1, t_1) \quad (2a.13)$$

A equação que estamos querendo encontrar para $P(y, t)$ será deduzida no que segue. Nosso ponto de partida é a integração de (2a.13) com relação a y_1 que reproduz a equação (2a.6) que, por sua vez, pode ser reescrita como ($P_1 \equiv P$)

$$P(y, t+\tau) = \int dy_1 P_{11}(y, t+\tau | y_1, t) P(y_1, t) \quad (2a.14)$$

Usando que

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{P(y, t+\tau) - P(y, t)}{\tau} \quad (2a.15)$$

podemos, com o auxílio de (2a.14), escrever

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \int dy' [P_{11}(y, t+\tau | y', t) - P_{11}(y, t | y', t)] P(y', t). \quad (2a.16)$$

Mas, expandindo $P_{11}(y, t+\tau | y', t)$ até 1ª ordem em τ e mantendo a normalização (2a.7) até esta mesma ordem, devemos ter

$$P_{11}(y, t+\tau | y', t) \approx \frac{\delta(y-y') + \tau W_t(y, y')}{1 + \tau \int W_t(y, y') dy} \approx \delta(y-y') [1 - \tau \int W_t(y'', y') dy''] + \tau W_t(y, y') \quad (2a.17)$$

onde usamos que $P_{11}(y, t | y', t) = \delta(y-y')$ e $W_t(y, y') = \frac{\partial P_{11}}{\partial t}(y, t | y', t') \Big|_{t'=t}$. Substituindo (2a.17) em (2a.16) temos

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int dy' W_t(y, y') P(y', t) - \int dy' W_t(y', y) P(y, t) \quad (2a.18)$$

que é uma das equações mais importantes na teoria de processos estocásticos ("master equation"). Podemos, ainda, escrever esta equação de uma forma mais apropriada aos nossos propósitos através da seguinte mudança de variáveis; definindo $\xi = y - y'$ e

$$\begin{aligned} W_t(y, y') &= W(\xi; y') = W(\xi; y - \xi) \\ W_t(y', y) &= W(-\xi; y) \end{aligned} \quad (2a.19)$$

temos

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int d\xi W(\xi; y - \xi) P(y - \xi, t) - P(y, t) \int d\xi W(-\xi; y) \quad (2a.20)$$

Expandindo $W(\xi; y - \xi)$ e $P(y - \xi, t)$ no entorno de $y - \xi = y$ temos, finalmente,

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial y^n} [\alpha_n(y) P(y, t)] \quad (2a.21)$$

onde

$$\alpha_n(y) = \int d\xi \xi^n W(\xi; y) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \int dy (y - y')^n P_{11}(y\tau | y' 0) \quad (2a.22)$$

Caso tenhamos uma variável multidimensional, $\vec{y}(t)$, a equação (2a.21) pode ser generalizada por ($\vec{y}$ e R^N)

$$\frac{\partial P(\vec{y}, t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial y_i} [\alpha_i(\vec{y}) P(\vec{y}, t)] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} [\alpha_{ij}(\vec{y}) P(\vec{y}, t)] + \dots \quad (2a.23)$$

onde

$$\alpha_i(\vec{y}) = \int d\xi_1 \xi_1 W(\vec{\xi}; \vec{y}), \quad \alpha_{ij}(\vec{y}) = \int d\xi_1 d\xi_j \xi_1 \xi_j W(\vec{\xi}; \vec{y}) \quad \text{etc.} \quad (2a.24)$$

A seguir, iremos particularizar as equações (2a.21) e (2a.23) para dois casos específicos do movimento browniano.

Exemplos:

1) Partícula Browniana Livre

Neste caso, a equação de movimento é dada por

$$M \frac{dv}{dt} + \eta v = f(t)$$

onde

$$\langle f(t) \rangle = 0, \quad \langle f(t)f(t') \rangle = 2D \delta(t-t')$$

e

$$D = \eta kT$$

Esta equação, quando integrada em um intervalo de tempo Δt , nos dá

$$\Delta v = -\frac{\eta v}{M} \Delta t + \frac{1}{M} \int_t^{t+\Delta t} d\xi f(\xi)$$

que com os valores de $\langle f(t) \rangle$ e $\langle f(t)f(t') \rangle$ introduzidos acima nos permite calcular

$$\alpha_1 = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta v \rangle}{\Delta t} = -\frac{\eta v}{M}$$

$$\alpha_2 = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle (\Delta v)^2 \rangle}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\int_t^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} d\xi d\lambda 2D \delta(\xi - \lambda) \right] = \frac{2D}{M}$$

e $\alpha_n = 0$, se $n \geq 3$. Assim, tem-se

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \frac{\eta}{M} \frac{\partial}{\partial v} [v P(v, t)] + D \frac{\partial^2}{\partial v^2} P(v, t) \quad (2a.25)$$

11) Partícula Browniana sujeita a um potencial $V(q)$

Aqui, a equação de movimento pode ser considerada como um sistema de equações para a coordenada q e o momentum p da partícula browniana,

$$\begin{cases} \frac{dq}{dt} = \frac{p}{M} \\ \frac{dp}{dt} = -\frac{\eta}{M} p - V'(q) + f(t). \end{cases}$$

Integrando estas equações em Δt e procedendo como no caso anterior, podemos considerar este problema como o de uma variável estocástica bidimensional $\vec{y} = (q, p)$ e calcular

$$\alpha_1 = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta q \rangle}{\Delta t} = \frac{p}{M} ,$$

$$\alpha_2 = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta p \rangle}{\Delta t} = - \frac{\eta}{M} p - V'(q) ,$$

$$\alpha_{11} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle (\Delta q)^2 \rangle}{\Delta t} = 0 ,$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{21} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta q \Delta p \rangle}{\Delta t} = 0 ,$$

$$\alpha_{22} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle (\Delta p)^2 \rangle}{\Delta t} = 2D ,$$

e todos os demais α 's são nulos. Usando, então, a generalização (2a.23) tem-se

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial q} (pP) + \frac{\partial}{\partial p} \left[\left(\frac{\eta}{M} p + V'(q) \right) P \right] + D \frac{\partial^2 P}{\partial p^2} , \quad (2a.26)$$

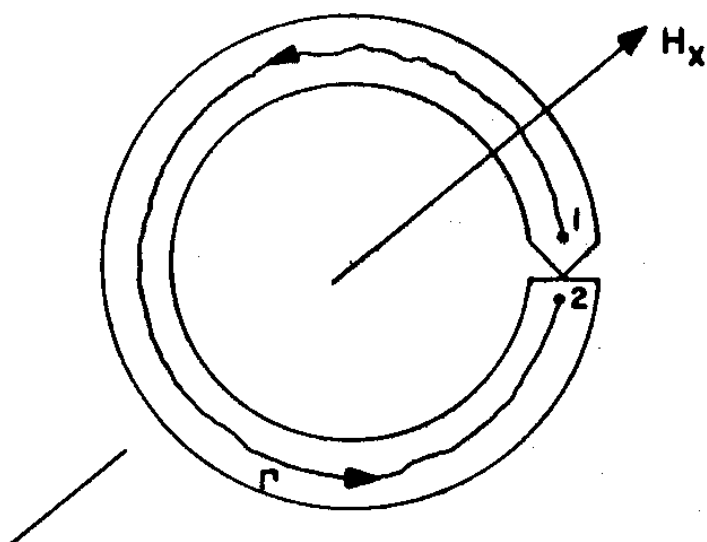
onde $P = P(q, p, t)$.

Os exemplos aqui mencionados resultam nas equações (2a.25) e (2a.26) que são conhecidas na literatura por "equação de Fokker-Planck". A forma geral desta equação é a expressão (2a.23) quando os momentos além dos de 2ª ordem são todos nulos. Estas equações [(2a.26) em particular] serão nosso ponto de comparação com as expressões quânticas a serem desenvolvidas ao longo deste trabalho.

b) Exemplo de Interesse

Nesta seção iremos deduzir a equação que rege a dinâmica do fluxo do campo eletromagnético no interior de um SQUID. Este dispositivo consiste em um anel supercondutor fechado por um contato fraco. Este

contato fraco pode ser um contato pontual ou até mesmo uma junção composta por um material não supercondutor. Na figura abaixo, esquematizamos o exemplo de um contato pontual.



Um fato bem conhecido da teoria da supercondutividade é que o condensado formado pelos pares de Cooper pode ser descrito por uma função de onda macroscópica dada por [16]

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{\rho(\vec{r})} \exp i \theta(\vec{r}) \quad , \quad (2b.1)$$

onde $\rho(\vec{r})$ é a densidade de pares de Cooper e $\theta(\vec{r})$ a fase da função de onda. A densidade de corrente de matéria, $\vec{J}_p$, é dada pela fórmula

$$\vec{J}_p = \frac{\hbar}{2m_p} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = \frac{1}{m_p} \text{Re}[\psi^* (\vec{p} \psi)] \quad , \quad (2b.2)$$

que nos permite calcular a densidade de supercorrente, $\vec{J}_s$, ao lembrarmos que $m_p = 2m$ (m = massa do elétron) e que $\vec{J}_s = 2e\vec{J}_p$ (e = carga do elétron). Temos, então,

$$\vec{J}_s = \frac{e\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = \frac{e\hbar}{m} \rho(\vec{r}) \vec{\nabla} \theta(\vec{r}) \quad . \quad (2b.3)$$

A fim de podermos estudar o caso mais geral do SQUID sujeito a

um campo externo H_x , devemos modificar ligeiramente a expressão (2b.3). A substituição usual encontrada nos textos de mecânica quântica vem de fazermos

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - 2e\vec{A} \quad (2b.4)$$

na equação equivalente a (2b.3) que é a (2b.2). Desta forma, na presença de um potencial vetor $\vec{A}$, a equação (2b.3) se transforma em

$$\vec{J}_s = \frac{eh}{m} \left(\vec{\nabla}\theta - \frac{2\pi}{\phi_0} \vec{A} \right) \rho \quad (2b.5)$$

onde $\phi_0 = \frac{h}{2e}$ é o quantum de fluxo do campo eletromagnético e $\rho(\vec{r}) = \rho$.

A integral de linha de $\vec{J}_s$ ao longo do contorno mostrado na fig. 2, que é dada por

$$\int_{\Gamma} \vec{J}_s \cdot d\vec{l} = \frac{eh}{m} \rho \int_{\Gamma} \vec{\nabla}\theta \cdot d\vec{l} - \frac{eh}{m} \frac{2\pi}{\phi_0} \rho \int_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (2b.6)$$

nos permite calcular a lei da quantização do fluxo no interior do SQUID como veremos abaixo.

Escolhendo o contorno Γ bem no interior do anel, podemos desprezar o lado esquerdo de (2b.6), pois $J_s = 0$ no interior de um material supercondutor. Assim sendo,

$$\int_{\Gamma} \vec{\nabla}\theta \cdot d\vec{l} = \frac{2\pi}{\phi_0} \int_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (2b.7)$$

A integral do potencial vetor, $\vec{A}$, pode ser aproximada por

$$\int_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{l} \approx \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \phi \quad (2b.8)$$

que é o fluxo total no interior do anel. Usando agora o fato de que

$$\int_{\Gamma} \vec{\nabla}\theta \cdot d\vec{l} = \oint \vec{\nabla}\theta \cdot d\vec{l} - \int_2^1 \vec{\nabla}\theta \cdot d\vec{l} \quad (2b.9)$$

e que θ é uma fase (portanto, definida a menos de um múltiplo de 2π), temos

$$\int_{\Gamma} \vec{\nabla}\theta \cdot d\vec{l} = 2\pi n + \Delta\theta \quad , \quad (2b.10)$$

onde $\Delta\theta = \theta_2 - \theta_1$. Consequentemente, podemos reescrever (2b.7) como

$$\phi + \frac{\phi_0}{2\pi} \Delta\theta = n\phi_0 \quad , \quad (2b.11)$$

que é a condição de quantização do fluxo no interior do SQUID. Convém notar que no caso de um anel uniforme, $\Delta\theta = 0$, o que implica no resultado já conhecido $\phi = n\phi_0$.

Vamos agora analisar o comportamento do fluxo no interior do SQUID. Como já é bem conhecido da teoria elementar da eletrodinâmica, o fluxo total pode ser escrito como

$$\phi = \phi_x + LI \quad , \quad (2b.12)$$

onde ϕ_x é o fluxo devido a H_x , L a auto indutância do circuito e i a corrente total que circula no SQUID. A corrente total, por sua vez, é composta de três termos:

i) Corrente Josephson: esta componente é devida ao tunelamento de pares através do contato e sua expressão é dada por [16]

$$i_s = i_0 \sin \Delta\theta \quad , \quad (2b.13)$$

onde i_0 é a corrente crítica.

ii) Corrente Normal: a componente normal é oriunda do modelo de dois fluidos, constituído por pares de Cooper e elétrons normais, e obedece à lei de Ohm

$$I_N = \frac{V}{R} \quad , \quad (2b.14)$$

onde V é a diferença de potencial induzida e R a resistência do contato em sua fase normal.

iii) Corrente de Polarização: esta componente é devida ao valor finito da capacitância do contato e é dada por

$$I_C = C\dot{V} \quad , \quad (2b.15)$$

onde C é a capacitância acima mencionada.

Assumindo que a corrente total seja dada pela soma destas três partes temos:

$$I = I_0 \sin \Delta\theta + \frac{V}{R} + C\dot{V} \quad (2b.16)$$

Substituindo (2b.16) em (2b.12), usando (2b.11) e o fato de que $V = -\dot{\phi}$, podemos escrever

$$\frac{\phi_x - \phi}{L} = I_0 \sin \frac{2\pi\phi}{\phi_0} + \frac{\dot{\phi}}{R} + C\ddot{\phi} \quad , \quad (2b.17)$$

que é a equação de uma "partícula" de coordenada ϕ em um potencial $U(\phi)$ dado por

$$U(\phi) = \frac{(\phi - \phi_x)^2}{2L} - \frac{\phi_0 I_0}{2\pi} \cos \frac{2\pi\phi}{\phi_0} \quad . \quad (2b.18)$$

Usando (2b.18) podemos reescrever (2b.17) como

$$C\ddot{\phi} + \frac{1}{R}\dot{\phi} + U'(\phi) = 0 \quad . \quad (2b.19)$$

Na realidade, devemos adicionar ainda uma corrente flutuante, $I_f(t)$, do lado direito de (2b.19) para que possamos descrever corretamente as propriedades termodinâmicas deste sistema. Com este

termo adicional, (2b.19) nada mais é que a equação de Langevin que apresentamos na introdução deste trabalho.

Para que sejamos capazes de reconhecer a diversidade de fenômenos físicos contidos em (2b.19) convém analisar o potencial (2b.18) em algum detalhe.

Os mínimos de $U(\phi)$ (soluções estáveis) são obtidos como soluções, ϕ_m , de $U'(\phi) = 0$ e ainda sujeitos a $U''(\phi_m) > 0$. Com o auxílio de (2b.18), estas duas equações nos levam a dois casos distintos:

$$i) 2\pi \frac{L I_0}{\phi_0} > 1 \rightarrow \text{diversos mínimos}$$

$$ii) 2\pi \frac{L I_0}{\phi_0} \leq 1 \rightarrow \text{apenas um mínimo.}$$

Na figura a seguir, esboçamos o gráfico de $U(\phi)$ para 3 valores distintos do fluxo externo, ϕ_x , no caso i).

Vamos, agora, supor que no instante $t = 0$ não haja campo externo ($H_x = 0$) e que a corrente supercondutora seja nula. Neste caso, o valor de equilíbrio do fluxo no interior do SQUID é também nulo (ponto P na fig. 3.a). Ao variarmos lentamente o valor de H_x , o potencial $U(\phi)$ começa a ser deformado e o valor de equilíbrio de ϕ segue, adiabaticamente, o seu poço de potencial até que este se torne um ponto de inflexão de $U(\phi)$. No exemplo acima, vemos claramente a posição de equilíbrio inicial variando da forma $P \rightarrow P' \rightarrow P''$. Cabe notar que esta aproximação adiabática só é válida quando dH_x/dt é muito menor que qualquer frequência típica do SQUID; $\left(\frac{1}{C} U''(\phi) \Big|_{\phi_m} \right)^{1/2}$ ou $\frac{1}{2RC}$. Desta forma, é possível varrer uma vasta região de valores de H_x através da qual a posição de equilíbrio inicial muda de estável para biestável e, finalmente, para metaestável.

A constatação de que a dinâmica do fluxo ϕ é realmente a de uma partícula browniana no potencial $U(\phi)$ deu-se através do estudo do decaimento do valor metaestável de ϕ por flutuações térmicas [17]. Aqui, ao variar H_x , observa-se que o valor de ϕ , que evolui adiabaticamente de $\phi = 0$, sofre uma transição brusca para outro mínimo local do potencial

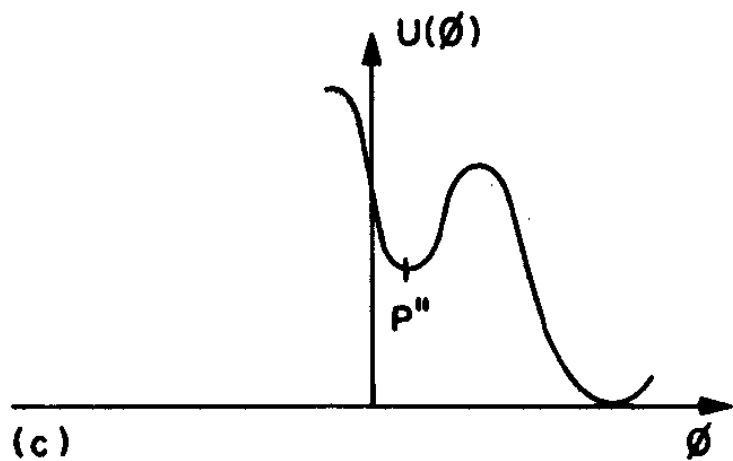
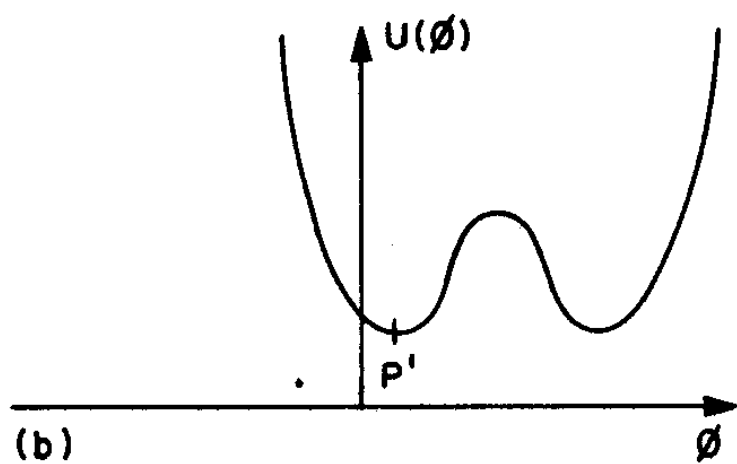
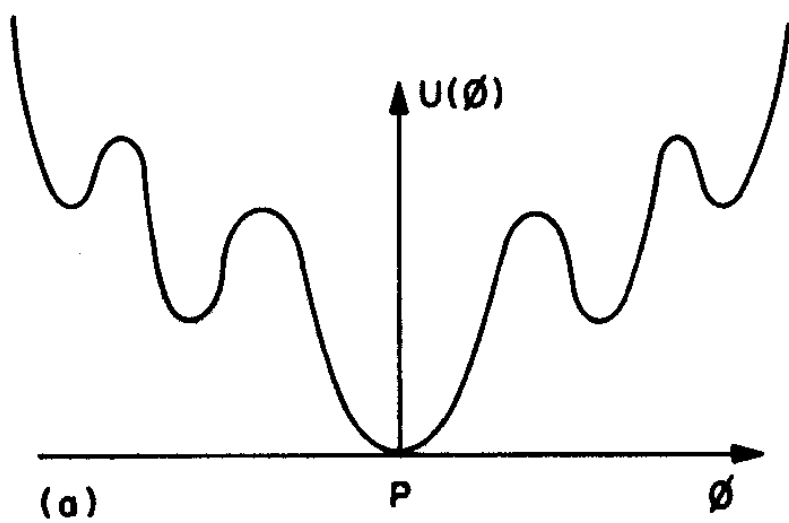


Fig. 3: O potencial $U(\phi)$ para: a) $\phi_x \approx 0$; b) $\phi_x = \frac{\phi_0}{2}$ e c) $\phi_x = \phi_0$.

antes que H_x atinja o valor H_c que transforma o mínimo inicial em um ponto de inflexão de $U(\phi)$. O mecanismo responsável por esta transição é o de ativação térmica sobre a barreira de potencial local que mantém ϕ em sua posição metaestável. A probabilidade de decaimento no caso do SQUID é a mesma que a de uma partícula browniana de coordenada $\phi(t)$ neste potencial.

A observação do fenômeno descrito acima foi feita a temperaturas em torno de 4°K , o que faz com que haja energia térmica suficiente para induzir a transição. A temperaturas da ordem de 1°K já não haveria flutuações térmicas para efetivar o processo de ativação. Por outro lado, com os parâmetros típicos destes dispositivos supercondutores ($C \sim 10^{-12}\text{F}$, $L \sim 5 \times 10^{-10}\text{H}$ e $i_c \sim 10^{-5}\text{A}$) tem-se $T_0 \sim 1^\circ\text{K}$ (ver eq. (1.3)), o que sugere a investigação de um novo mecanismo responsável pelo decaimento do valor metaestável de ϕ , o tunelamento quântico.

O processo específico que mencionamos neste capítulo foi a questão que originou todo o interesse atual no movimento browniano a nível quântico. Uma vez constatada a possibilidade de observarmos o tunelamento desta "partícula browniana", podemos montar experiências a fim de testar a dinâmica de pacotes de onda, o tunelamento coerente em um potencial biestável (fig. 3b) e a estrutura de níveis de energia de $U(\phi)$.

Nosso objetivo agora parece estar bem claro. Após encontrar um sistema físico que a baixas temperaturas se comporta da mesma forma que uma partícula browniana no limite quântico, cabe-nos desenvolver uma forma sistemática de tratar este problema (ver introdução) para, então, podermos analisar de que forma a dissipação influi na dinâmica quântica destes sistemas.

III. Formulação Quântica

Neste capítulo, nosso objetivo é descrever a estratégia a ser usada no tratamento do limite quântico da dinâmica de uma partícula browniana.

Como já adiantamos na introdução, o tratamento a ser adotado

neste curso considera, explicitamente, o acoplamento da partícula de interesse a um reservatório. O motivo para adotarmos este ponto de vista é óbvio; qualquer sistema dissipativo está sempre acoplado a um segundo sistema que é o responsável pelas perdas no primeiro. Desta forma, antes de tentarmos modificar o esquema canônico de quantização, acreditamos que a idéia de aplicar o esquema tradicional a modelos mais realistas seja extremamente útil.

Conceitualmente, a idéia é muito simples. Entretanto, o que ocorre na prática é bem diferente. Ao decidirmos que vamos considerar explicitamente o acoplamento do sistema de interesse com um reservatório, devemos conhecer o sistema que serve de reservatório para o primeiro e como eles interagem entre si, o que é uma tarefa bem complicada em muitos casos.

Por outro lado, sistemas compostos, fundamentalmente diferentes, podem ter o subsistema de interesse apresentando uma dinâmica clássica do tipo browniano. Apesar deste fato nos parecer mais uma complicação em nossa maneira de abordar o problema, ele nos dá, de fato, uma oportunidade para argumentar em favor de algumas hipóteses simplificadoras. Por exemplo, podemos assumir que diferentes reservatórios, por mais complexos que sejam, apresentem algumas características em comum, tais como os seus espectros de excitações elementares ou a maneira pela qual são perturbados por suas respectivas "partículas brownianas".

No que segue, não tentaremos justificar o uso de um determinado modelo. Estaremos apenas interessados em escolher aquele que seja suficientemente simples e que, sob certas condições, reproduza o limite clássico esperado. Portanto, a justificativa para a escolha que faremos é, basicamente, "a posteriori". Entretanto, convém enfatizar que o tratamento microscópico detalhado de determinados reservatórios, poderá mostrar um comportamento quântico ligeiramente diferente para cada um deles, apesar das características em comum que mencionamos acima. Um exemplo típico deste fato, é a comparação da formulação que decorre do modelo que iremos utilizar, com o tratamento microscópico da dinâmica da fase da função de onda supercondutora através de uma junção de tunelamento [36]. Neste caso, mostra-se que os resultados que iremos obter com um modelo simples, são aproximações, válidas na maioria dos

casos de interesse, de resultados mais gerais.

a) O Modelo:

Vamos supor que o nosso sistema composto (sistema de interesse e reservatório) seja descrito pela seguinte lagrangeana:

$$L = T - U$$

$$L = L_S + L_I + L_R$$

onde

$$L_S = \frac{1}{2} M \dot{q}^2 - V_0(q) \quad , \quad (3a.1)$$

$$L_I = -\sum_k C_k q q_k \quad , \quad (3a.2)$$

$$L_R = \sum_k \left\{ \frac{1}{2} m_k \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right\} \quad , \quad (3a.3)$$

são, respectivamente, as lagrangeanas do sistema (S), de interação e do reservatório (R) que é formado por um conjunto de osciladores de "coordenadas" q_k , "massas" m_k e constantes de acoplamento C_k . Uma tentativa, relativamente bem sucedida, de justificar este modelo foi feita na referência [11] onde a interpretação física destes "osciladores" foi dada.

Inicialmente, vamos estudar a equação de movimento clássica da variável $q(t)$ quando em contato com o reservatório. Escrevendo as equações de Euler-Lagrange para o sistema composto temos

$$M \ddot{q} = -V'_0(q) - \sum_k C_k q_k \quad (3a.4)$$

e

$$m_k \ddot{q}_k = -m_k \omega_k^2 q_k - C_k q \quad (3a.5)$$

Tomando a Transformada de Laplace das equações para q_k temos

$$\tilde{q}_k(s) = \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{s q_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} - \frac{C_k \tilde{q}(s)}{m_k(s^2 + \omega_k^2)}$$

Tomando, agora, a transformada inversa de $\tilde{q}_k(s)$ e substituindo em (3a.4) temos

$$\begin{aligned} M\ddot{q} + V'_0(q) &= \frac{-1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \sum_k \left\{ \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{s q_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} \right\} e^{st} ds + \\ &+ \sum_k \frac{C_k^2}{m_k} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \frac{\tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds \end{aligned} \quad (3a.6)$$

Usando então a identidade

$$\frac{1}{s^2 + \omega_k^2} = \frac{1}{\omega_k^2} \left\{ 1 - \frac{s^2}{s^2 + \omega_k^2} \right\}$$

podemos reescrever a equação para $q(t)$ como

$$\begin{aligned} m\ddot{q} + V'_0(q) &- \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \boxed{\frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \tilde{q}(s) e^{st} ds} + \\ &+ \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \frac{s^2 \tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds = \\ &= \frac{-1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \sum_k \left\{ \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{s q_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} \right\} e^{st} ds \end{aligned} \quad (3a.7)$$

O terceiro termo do lado esquerdo da (3a.7) nada mais é que $\sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q(t)$, ou seja, uma correção harmônica ΔV ao potencial $V_0(q)$ dada por

$$\Delta V = - \frac{1}{2} \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2 \quad (3a.8)$$

Então, ao acoplarmos uma partícula sujeita a um potencial $V_0(q)$ a um banho de osciladores, este potencial é renormalizado por um termo ΔV . Na realidade, não devemos nos preocupar muito com estas correções pois, na grande maioria de sistemas que estamos interessados, seria impossível observar o potencial não renormalizado $V_0(q)$. O que é realmente importante é o potencial efetivo $V(q) = V_0(q) + \Delta V$. Há ainda exemplos onde $V(q) = V_0(q)$, como veremos mais adiante.

O último termo do lado esquerdo da (3a.7) pode também ser escrito como

$$\frac{d}{dt} \left\{ \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \frac{s \tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds \right\},$$

que, com o uso do teorema da convolução, transforma-se em

$$\frac{d}{dt} \left\{ \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos \omega_k(t-t') q(t') dt' \right\} \quad (3a.9)$$

A fim de transformar $\sum_k$ em $\int d\omega$ vamos definir a função espectral

$$J(\omega) = \sum_k \frac{\pi C_k^2}{2m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k) \quad (3a.10)$$

que nos permite escrever

$$\sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos \omega_k(t-t') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega(t-t')$$

A função $J(\omega)$ nada mais é que a parte imaginária da transformada de Fourier da susceptibilidade dinâmica (retardada) do banho de

osciladores,

$$J(\omega) = \text{Im } \mathcal{F}\{-i\theta(t-t') \langle [\sum_k C_k q_k(t), \sum_{k'} C_{k'} q_{k'}(t')] \rangle\} ,$$

no limite clássico. Assumindo que $J(\omega)$ seja da forma

$$J(\omega) = \begin{cases} \eta\omega & \text{se } \omega < \Omega \\ 0 & \text{se } \omega > \Omega \end{cases} , \quad (3a.11)$$

onde Ω é muito maior que as frequências características do problema, temos

$$\sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos \omega_k(t-t') = \frac{2}{\pi} \int_0^\Omega \eta \cos \omega(t-t') d\omega \approx 2\eta \delta(t-t') ,$$

onde fizemos $\Omega \rightarrow \infty$. Este resultado permite-nos escrever o último termo do lado esquerdo de (3a.7) como

$$\frac{d}{dt} \left\{ \int_0^t 2\eta \delta(t-t') q(t') dt' \right\} = \eta \dot{q}(t) . \quad (3a.12)$$

Finalmente, o termo do lado direito de (3a.7) pode ser interpretado como uma força $f(t)$ que depende das condições iniciais impostas aos osciladores do banho. Supondo que o banho esteja inicialmente em equilíbrio termodinâmico temos, no limite clássico,

$$\langle q_k(0) \rangle = \langle \dot{q}_k(0) \rangle = \langle \dot{q}_k(0) q_k(0) \rangle = 0 \quad (3a.13)$$

$$\text{e } \langle \dot{q}_k(0) \dot{q}_{k'}(0) \rangle = \frac{kT}{m_k} \delta_{kk'} , \quad \text{e } \langle q_k(0) q_{k'}(0) \rangle = \frac{kT}{m_k \omega_k^2} \delta_{kk'} ,$$

o que nos permite mostrar, após algumas manipulações algébricas, que $\langle f(t) \rangle = 0$ e $\langle f(t) f(t') \rangle = 2\eta kT \delta(t-t')$.

Desta forma vemos que a equação resultante para $q(t)$ no limite clássico é uma equação de Langevin

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + V'(q) = f(t) \text{ onde } \langle f(t) \rangle = 0 \text{ e } \langle f(t)f(t') \rangle = 2\eta kT \delta(t-t'). \quad (3a.14)$$

Vamos agora retomar a discussão da renormalização do potencial. Se ao invés de considerar a lagrangeana de interação (3a.2) adotarmos um modelo onde

$$L_I = - \sum_k \tilde{C}_k q \dot{q}_k \quad (3a.15)$$

não haverá diferença entre $V_0(q)$ e $V(q)$. A obtenção deste resultado é extremamente simples. Nosso ponto de partida é escrever a hamiltoniana do sistema composto quando L_I é dada por (3a.15). Desta forma, usando que

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = M\dot{q} \quad (3a.16)$$

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = m_k \dot{q}_k - C_k q \quad (3a.17)$$

podemos escrever

$$H = p\dot{q} + p_k \dot{q}_k - L = \frac{p^2}{2M} + V_0(q) + \sum_k \left\{ \frac{1}{2m_k} (p_k + \tilde{C}_k q)^2 + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right\}. \quad (3a.18)$$

Agora, efetuando a transformação canônica

$$p \rightarrow p, \quad q \rightarrow q, \quad p_k \rightarrow m_k \omega_k q_k \quad \text{e} \quad q_k \rightarrow \frac{p_k}{m_k \omega_k} \quad (3a.19)$$

e definindo $C_k = \tilde{C}_k \omega_k$, temos a nova hamiltoniana

$$\tilde{H} = \frac{p^2}{2M} + V_0(q) + \sum_k C_k q_k q + \sum_k \left\{ \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right\} + \frac{1}{2} \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2. \quad (3a.20)$$

Observamos que $\tilde{H}$ pode ser obtida da lagrangeana inicial com

$$L_I = -\sum_k C_k q_k q \text{ acrescida de um termo harmônico } - \frac{1}{2} \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2. \text{ O fato}$$

interessante sobre este último termo é que ele cancela a correção harmônica que surge naturalmente na expressão (3a.8). Portanto, no caso de um acoplamento coordenada-velocidade (tipo carga-campo eletromagnético) na lagrangeana do sistema composto temos $V(q) = V_0(q)$.

De qualquer forma, é sempre conveniente considerarmos a existência deste termo adicional na lagrangeana cujo acoplamento é do tipo coordenada-coordenada para que possamos, desde o início, usar o potencial efetivo $V(q)$ na lagrangeana total.

Com os resultados desta seção alcançamos parte do nosso objetivo. Introduzimos um sistema isolado (R+S) de forma que a dinâmica clássica de S seja descrita por uma equação de Langevin. Nosso próximo passo será estudar o comportamento quântico de S quando levamos em conta o acoplamento com R.

b) O operador densidade reduzido dinâmico

Como foi adiantado em nossa introdução (eq. (1.7)), podemos obter toda a informação referente a um determinado subsistema quântico (S) ao tomarmos o traço parcial (com respeito às demais variáveis a ele acopladas) do operador densidade do sistema composto, $\hat{\rho}(t)$. Por outro lado, estamos particularmente interessados no modelo proposto em (3a.1-3, 10-11) por nos fornecer os resultados que queremos no limite clássico. Porém, antes de tratar este modelo específico, vamos descrever a técnica a ser usada durante o resto do curso para um caso genérico de acoplamento da forma

$$H = H_S(p, q) + H_I(q, q_k) + H_R(q_k, p_k) \quad , \quad (3b.1)$$

onde, como de hábito, H_S , H_I e H_R são, respectivamente, as hamiltonianas

do sistema de interesse, de interação e do reservatório. Desta forma, introduzindo o vetor $\vec{R} \equiv (R_1, \dots, R_N)$, onde R_k é o valor assumido pela coordenada q_k e usando a relação de completeza

$$\iint dx' d\vec{R}' |\vec{x}' \vec{R}'\rangle \langle \vec{x}' \vec{R}'| = 1 \quad , \quad (3b.2)$$

podemos escrever o operador $\hat{\rho}(t)$ (eq. (1.5)) na representação de coordenadas como

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} \vec{R} | \hat{\rho}(t) | \vec{y} \vec{Q} \rangle = & \iiint dx' dy' d\vec{R}' d\vec{Q}' \langle \vec{x} \vec{R} | e^{-iHt/\hbar} | \vec{x}' \vec{R}' \rangle \langle \vec{x}' \vec{R}' | \hat{\rho}(0) | \vec{y}' \vec{Q}' \rangle \\ & * \langle \vec{y}' \vec{Q}' | e^{iHt/\hbar} | \vec{y} \vec{Q} \rangle \end{aligned} \quad (3b.3)$$

ou ainda, reconhecendo o elemento de matrix $\langle \vec{x} \vec{R} | \exp \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right) | \vec{x}' \vec{R}' \rangle$ como o propagador de Feynman, $K(\vec{x}, \vec{R}, t; \vec{x}', \vec{R}', 0)$, para o sistema composto, temos

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} \vec{R} | \hat{\rho}(t) | \vec{y} \vec{Q} \rangle = & \iiint dx' dy' d\vec{R}' d\vec{Q}' K(\vec{x}, \vec{R}, t; \vec{x}', \vec{R}', 0) K^*(\vec{y}, \vec{Q}, t; \vec{y}', \vec{Q}', 0) \\ & * \langle \vec{x}' \vec{R}' | \hat{\rho}(0) | \vec{y}' \vec{Q}' \rangle \end{aligned} \quad (3b.4)$$

Tomando, então, o traço de (3b.4) com respeito às variáveis do banho temos

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\vec{x}, \vec{y}, t) \equiv & \int d\vec{R} \langle \vec{x} \vec{R} | \hat{\rho}(t) | \vec{y} \vec{R} \rangle \\ = & \iiint d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' dx' dy' K(\vec{x}, \vec{R}, t; \vec{x}', \vec{R}', 0) K^*(\vec{y}, \vec{R}, t; \vec{y}', \vec{Q}', 0) * \\ & * \langle \vec{x}' \vec{R}' | \hat{\rho}(0) | \vec{y}' \vec{Q}' \rangle \end{aligned} \quad (3b.5)$$

onde definimos $\tilde{\rho}(\vec{x}, \vec{y}, t)$ como o operador densidade reduzido do sistema S.

Vamos agora fazer a primeira hipótese simplificadora em (3b.5). Supondo que o operador densidade inicial do sistema composto,

$$\langle x' \vec{R}' | \hat{\rho}(0) | y' \vec{Q}' \rangle = \hat{\rho}(x' \vec{R}', y' \vec{Q}', 0) \quad (3b.6)$$

possa ser fatorizado na forma

$$\hat{\rho}(x', \vec{R}', y', \vec{Q}', 0) = \hat{\rho}_S(x', y', 0) \hat{\rho}_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) \quad (3b.7)$$

onde $\hat{\rho}_S$ e $\hat{\rho}_R$ são, respectivamente, operadores densidade do sistema e do reservatório quando isolados, podemos reescrever (3b.5) como

$$\tilde{\rho}(x, y, t) = \iint dx' dy' J(x, y, t; x', y', 0) \tilde{\rho}(x', y', 0) \quad (3b.8)$$

Em (3b.8) definimos a função

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \iiint d\vec{R}' d\vec{Q}' d\vec{R} K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) K^*(y, \vec{R}, t; y', \vec{Q}', 0) * \hat{\rho}_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) \quad (3b.9)$$

e identificamos, obviamente, $\hat{\rho}_S(0)$ com $\tilde{\rho}(0)$. A interpretação física desta função J é bem simples. Caso não houvesse interação entre os sistemas R e S , a eq. (3b.9) se reduziria a

$$J(x, y, t; x', y', 0) = K_S(x, t; x', 0) K_S^*(y, t; y', 0) * \iiint d\vec{R}' d\vec{Q}' d\vec{R} K_R(\vec{R}, t; \vec{R}', 0) K_R^*(\vec{R}, t; \vec{Q}', 0) \hat{\rho}_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) \quad (3b.10)$$

onde K_S e K_R são os propagadores do sistema e do reservatório quando isolados. A integral do lado direito de (3b.10) é facilmente reconhecida como $\text{tr}_R \hat{\rho}_R(t) = 1$, o que nos leva a

$$J(x, y, t; x', y', 0) = K_S(x, t; x', 0) K_S^*(y, t; y', 0) \quad (3b.11)$$

Portanto, $J(x, y, t; x', y', 0)$ funciona como um super-propagador que rege a evolução temporal de $\tilde{\rho}(x, y, t)$ e que, no caso do sistema S estar isolado,

reduz-se a um produto de propagadores que regem a evolução de $\psi(x,t)$ e $\psi^*(y,t)$ separadamente.

Antes de prosseguirmos na discussão de como calcular a função $J(x,y,t;x',y',0)$, devemos fazer um comentário sobre a hipótese que fizemos na eq. (3b.7). Fatorizando o operador densidade do sistema composto, estamos, na realidade, assumindo que a interação entre R e S é ligada bruscamente em $t = 0^+$. Dependendo da situação física que estivermos tentando descrever, esta pode não ser a melhor escolha. Uma outra possível condição inicial foi proposta em [18] onde o movimento browniano quântico de uma partícula livre foi estudado dentro de um formalismo idêntico ao que aqui usamos. Apesar de nos restringirmos à escolha (3b.7) nesta seção, convém deixar claro que a formulação aqui apresentada é suficientemente geral e deverá apresentar apenas pequenas modificações caso uma outra forma para $\hat{\rho}(0)$ seja adotada. Futuramente chamaremos a atenção do leitor para os pontos onde os efeitos das diferentes escolhas de condições iniciais possam ser relevantes.

Uma vez estabelecida a forma pela qual iremos tratar o operador densidade inicial, resta-nos computar o propagador $K(x,\vec{R},t;x',\vec{R}',0)$ do sistema composto. Para tal, devemos conhecer os auto estados de $R + S$ o que é, em geral, uma tarefa extremamente difícil. Mesmo em casos simples, como o apresentado no modelo (3a.1-3) quando $V_0(q)$ é, por exemplo, um potencial harmônico, a obtenção de K é ainda bem elaborada. Entretanto, podemos evitar o uso de funções de onda $N+1$ dimensionais se adotarmos a representação de integrais funcionais [19] para os propagadores (ver, também, apêndice I). Assim,

$$K(x,\vec{R},t;x',\vec{R}',0) = \int_{x'}^x \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} Dx(t') D\vec{R}(t') \exp \frac{i}{\hbar} S[x(t'),\vec{R}(t')], \quad (3b.12)$$

onde

$$S[x(t'),\vec{R}(t')] = \int_0^t L(x(t'),\vec{R}(t'),\dot{x}(t'),\dot{\vec{R}}(t')) dt' \quad (3b.13)$$

é a ação correspondente à lagrangeana do sistema $R+S$. No caso de R ser

um banho de osciladores teremos L dada pela soma de (3a.1,2,3). As integrais em (3b.12) são sobre caminhos $x(t)$ e $\vec{R}(t)$ tais que $x(0) = x'$, $x(t) = x$, $\vec{R}(0) = \vec{R}'$ e $\vec{R}(t) = \vec{R}$.

Usando, então, esta representação para K em (3b.9) temos:

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x \int_{y'}^y Dx(t') Dy(t') \exp \frac{i}{\hbar} S_0[x(t')] \exp - \frac{i}{\hbar} S_0[y(t')] * \\ * F[x(t'), y(t')] \quad , \quad (3b.14)$$

onde S_0 é a ação referente ao sistema S quando isolado e

$$F[x(t'), y(t')] = \iiint d\vec{R}' d\vec{Q}' d\vec{R} \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} \int_{\vec{Q}'}^{\vec{Q}} D\vec{R}(t') D\vec{Q}(t') * \\ * \exp \frac{i}{\hbar} (S_I[x(t'), \vec{R}(t')] - S_I[y(t'), \vec{Q}(t')] + S_R[\vec{R}(t')] - S_R[\vec{Q}(t')]) \quad (3b.15)$$

é o chamado "funcional de influência" [19,20]. Nesta expressão, S_R e S_I são, respectivamente, as ações do reservatório R (quando isolado) e de interação. A (3b.15) descreve o produto de propagadores K_{RI} e K_{RI}^* do reservatório, quando sujeitos a forças externas $x(t)$ e $y(t)$, integrados com o operador densidade inicial para o reservatório. Portanto, teremos um funcional acoplando os caminhos $x(t)$ e $y(t)$.

Vamos agora calcular $F[x(t), y(t)]$ para o modelo proposto na seção anterior. A integral funcional do k-ésimo oscilador do reservatório sujeito a uma força $C_k x(t)$ (ver 3a.2)) pode ser facilmente calculada como [19]

$$K_{RI}^{(k)} = \left(\frac{m_k \omega_k}{2\pi i \hbar \sin \omega_k t} \right)^{1/2} \exp \frac{i}{\hbar} S_{cl}^{(k)} \quad , \quad (3b.16)$$

onde

$$\begin{aligned}
S_{cl}^{(k)} = & \frac{m_k \omega_k}{2 \sin \omega_k t} \left[\left(R_k^2 + R_k'^2 \right) \cos \omega_k t - 2 R_k R_k' + \frac{2 C_k R_k}{m_k \omega_k} \int_0^t x(t') \sin \omega_k t' dt' \right. \\
& + \left. \frac{2 C_k R_k'}{m_k \omega_k} \int_0^t x(t') \sin \omega_k (t-t') dt' \right] \\
& - \frac{2 C_k^2}{m_k \omega_k^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' x(t') x(t'') \sin \omega_k (t-t') \sin \omega_k t'' \quad (3b.17)
\end{aligned}$$

Desta forma vemos que $K_{RI}^{(k)}$ é uma função de R_k e R_k' e um funcional de $x(t')$ que denotamos por $K_{RI}^{(k)}(R_k, R_k', [x(t')])$. Substituindo este resultado em (3b.15) temos

$$F[x(t'), y(t')] =$$

$$\iiint_k \prod dR_k dR_k' dQ_k' \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) K_{RI}^{(k)}(R_k, R_k', [x(t')]) K_{RI}^{(k)*}(R_k, Q_k', [y(t')]) \quad (3b.18)$$

Assumindo que em $t = 0$ o banho de osciladores esteja em equilíbrio a temperatura T , podemos escrever [19,21]

$$\begin{aligned}
\rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) &= \prod_k \rho_R^{(k)}(R_k', Q_k', 0) = \\
&= \prod_k \frac{m_k \omega_k}{2\pi\hbar \sinh\left(\frac{\hbar\omega_k}{kT}\right)} \exp - \left\{ \frac{m_k \omega_k}{2\hbar \sinh\left(\frac{\hbar\omega_k}{kT}\right)} \left[\left(R_k'^2 + Q_k'^2 \right) \cosh\left(\frac{\hbar\omega_k}{kT}\right) - 2R_k' Q_k' \right] \right\} \quad (3b.19)
\end{aligned}$$

Como todas as integrais envolvidas em (3b.18) são gaussianas, podemos efetuá-las trivialmente. Substituindo o resultado da integração de (3b.18) em (3b.14) obtém-se

$$\begin{aligned}
J(x,y,t;x',y',0) = & \int_{x'}^x \int_{y'}^y Dx(t') Dy(t') \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ S_0[x(t')] - S_0[y(t')] - \right. \\
& \left. - \int_0^t \int_0^\tau [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_I(\tau - \sigma) [x(\sigma) + y(\sigma)] d\tau d\sigma \right\} * \\
& * \exp - \frac{1}{\hbar} \int_0^t \int_0^\tau [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_R(\tau - \sigma) [x(\sigma) - y(\sigma)] d\tau d\sigma \quad ,
\end{aligned}
\tag{3b.20}$$

onde

$$\alpha_R(\tau - \sigma) = \sum_k \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \coth \frac{\hbar \omega_k}{2kT} \cos \omega_k(\tau - \sigma)
\tag{3b.21}$$

e

$$\alpha_I(\tau - \sigma) = - \sum_k \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \sin \omega_k(\tau - \sigma)
\tag{3b.22}$$

Com o auxílio de (3a.10 e 11) estas somas podem ser escritas como

$$\alpha_R(\tau - \sigma) = \frac{1}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \, \eta \omega \coth \frac{\hbar \omega}{2kT} \cos \omega(\tau - \sigma)
\tag{3b.23}$$

e

$$\alpha_I(\tau - \sigma) = - \frac{1}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \, \eta \omega \sin \omega(\tau - \sigma) = \frac{\eta}{\pi} \frac{d}{d(\tau - \sigma)} \int_0^\Omega d\omega \cos \omega(\tau - \sigma)
\tag{3b.24}$$

A fim de obter a forma final de $J(x,y,t;x',y',0)$ devemos substituir (3b.23) e (3b.24) em (3b.20). Todavia, a substituição de (3b.24) merece uma atenção especial. A integral dupla na parte

imaginária do expoente em (3b.20) se transforma em

$$\begin{aligned}
 & \frac{\eta}{\pi} \int_0^t \int_0^\tau \int_0^\Omega [x(\tau)-y(\tau)] \frac{d}{d(\tau-\sigma)} \cos \omega(\tau-\sigma) [x(\sigma)+y(\sigma)] d\tau d\sigma d\omega \\
 &= - \frac{\eta\Omega}{\pi} \int_0^t [x^2(\tau)-y^2(\tau)] d\tau + \frac{\eta}{\pi} (x'+y') \int_0^t \frac{\sin \Omega\tau}{\tau} [x(\tau)-y(\tau)] d\tau \\
 &+ \frac{\eta}{\pi} \int_0^t \int_0^\tau [x(\tau)-y(\tau)] \frac{\sin \Omega(\tau-\sigma)}{(\tau-\sigma)} [\dot{x}(\sigma)+\dot{y}(\sigma)] d\tau d\sigma \quad , \quad (3b.25)
 \end{aligned}$$

onde integramos por partes com relação a σ . O primeiro termo do lado direito da equação (3b.25) é proveniente da correção harmônica que mencionamos em (3a.8). Como discutimos anteriormente, este termo pode ser incluído na redefinição de um potencial efetivo ou eliminado através de um contra-termo na lagrangeana inicial.

As demais integrais em (3b.25) podem ser simplificadas se usarmos o fato que o intervalo de tempo t é tal que $t \gg \Omega^{-1}$, o que nos permite fazer a aproximação

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin \Omega(\tau-\sigma)}{\tau-\sigma} \approx \delta(\tau-\sigma) \quad , \quad (3b.26)$$

Entretanto, há um ponto onde devemos usar o limite (3b.26) com muito cuidado. Uma breve análise das integrais em (3b.25) nos mostra que este limite pode ser tomado na segunda e terceira integrais do lado direito daquela expressão. Quando $\Omega t \gg 1$, a segunda integral é escrita como

$$\eta(x'+y') \int_0^t \frac{1}{\pi} \frac{\sin \Omega\tau}{\tau} [x(\tau)-y(\tau)] d\tau \rightarrow \eta(x'+y') \int_0^t \delta(\tau) [x(\tau)-y(\tau)] d\tau \quad , \quad (3b.27)$$

que, como função de seu limite inferior de integração, não é contínua. Esta integral vale

$$\eta(x'+y') \int_{t'}^t \delta(\tau)[x(\tau)-y(\tau)]d\tau = \begin{cases} 0 & \forall t' > 0 \\ \eta(x'^2-y'^2)/2 & \text{se } t' = 0 \end{cases} \quad (3b.28)$$

Por outro lado, a última integral em (3b.25) é uma função contínua do seu limite inferior de integração. Quando $\Omega t \gg 1$ temos

$$\begin{aligned} \frac{\eta}{2} \int_0^t d\tau [x(\tau)-y(\tau)] \int_0^t \delta(\tau-\sigma)[\dot{x}(\sigma)+\dot{y}(\sigma)]d\sigma \\ = \frac{\eta}{2} \int_0^t d\tau [x(\tau)-y(\tau)][\dot{x}(\tau)+\dot{y}(\tau)] \end{aligned} \quad (3b.29)$$

que, por sua vez, pode ser obtida através de

$$\lim_{t' \rightarrow 0} \frac{\eta}{2} \int_{t'}^t d\tau [x(\tau)-y(\tau)] \int_{t'}^t \delta(\tau-\sigma)[\dot{x}(\sigma)+\dot{y}(\sigma)]d\sigma \quad (3b.30)$$

e, portanto, incluir ou não o instante $t = 0$ no limite inferior de integração não faz diferença nesta integral.

Devemos, então, especificar o que entendemos pelas integrais de $\tau, \sigma = 0$ a $\tau, \sigma = t$. Para que possamos obter as condições de contorno corretas, ou seja, que $J(x, y, 0^+; x', y', 0) = \delta(x-x')\delta(y-y')$ (ver apêndice II) devemos efetuar as integrais no intervalo $0 < \tau, \sigma \leq t$ o que nos permite tomar a segunda integral de (3b.25) como nula (ver 3b.28)).

Desta forma, (3b.20) transforma-se em

$$\begin{aligned} J(x, y, t; x', y', 0) = \exp - \frac{1}{\hbar} f(x, y, x', y') \int_{x'}^x \int_{y'}^y Dx(t') Dy(t') * \\ * \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ S_0[x(t')] - S_0[y(t')] - M\gamma \int_0^t (x\dot{y} - y\dot{x}) dt' \right\} \end{aligned}$$

$$* \exp - \frac{2M\gamma}{\hbar \pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \coth \frac{\hbar\omega}{2kT} \int_0^t \int_0^{\tau} [x(\tau)-y(\tau)] \cos \omega(t-\sigma) [x(\sigma)-y(\sigma)] d\tau d\sigma \quad (3b.31)$$

onde $\gamma = \frac{\eta}{2M}$ é a constante de relaxação, e a função $f(x,y,x',y')$, que resulta da última integral em (3b.25), é dada por

$$f(x,y,x',y') = \frac{M\gamma}{2} \left[(x^2 - x'^2) - (y^2 - y'^2) \right] \quad (3b.32)$$

A expressão que obtivemos em (3b.31) é o resultado principal desta seção. Dado o potencial $V_0(q)$ ao qual a partícula de interesse está sujeita, podemos, pelo menos em princípio, determinar $J(x,y,t;x',y',0)$ através da resolução desta integral funcional dupla. Como era de se esperar, poucos são os casos onde $J(x,y,t;x',y',0)$ pode ser obtido em uma forma analítica fechada. Na grande maioria dos problemas alguns métodos de aproximação deverão ser desenvolvidos. Os potenciais da forma $V_0(q) = aq^n$ onde $n = 0, 1$ ou 2 são casos especiais que podem ser resolvidos exatamente. Após a resolução de (3b.31) podemos obter o operador densidade reduzido $\tilde{\rho}(x,y,t)$ usando a expressão (3b.8). Nosso objetivo é, então, resolver as eqs. (3b.8) e (3b.31) para alguns potenciais e condições iniciais de interesse. Antes, porém, vamos investigar um limite particularmente importante de (3b.31). Trata-se do limite clássico, onde $kT \gg \hbar\omega$ para frequências $\omega \ll \Omega$.

Neste limite, usando que $\coth x \sim x^{-1}$ para $x \rightarrow 0$ e integrando em ω , podemos aproximar a (3b.31) por

$$J(x,y,t;x',y',0) \approx \exp - \frac{1}{\hbar} f(x,x',y,y') \int_{x'}^x \int_{y'}^y Dx(t') Dy(t') * \\ * \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ S_0[x(t')] - S_0[y(t')] - M\gamma \int_0^t (x\dot{y} - \dot{x}y) dt' \right\} \\ * \exp - \frac{2M\gamma kT}{\hbar^2} \int_0^t [x(\tau) - y(\tau)]^2 d\tau \quad (3b.33)$$

Entretanto, esta não é a função mais apropriada para o estudo do limite clássico de nosso problema. Para tal, devemos trabalhar diretamente com o operador densidade reduzido. Mais ainda, é conveniente escrevermos uma equação diferencial para $\tilde{\rho}(x,y,t)$. Esta equação pode ser obtida se seguirmos os mesmos passos que Feynman [19] ao deduzir a equação de Schrödinger partindo da representação de integrais funcionais para $K(x,t;x',t')$. No apêndice II obtemos, explicitamente, esta equação que é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = & -\frac{\hbar}{2M1} \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2M1} \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial y^2} - \gamma(x-y) \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial x} + \gamma(x-y) \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial y} \\ & + \frac{V_o(x)}{i\hbar} \tilde{\rho} - \frac{V_o(y)}{i\hbar} \tilde{\rho} - \frac{2M\gamma kT}{\hbar^2} (x-y)^2 \tilde{\rho} \end{aligned} \quad (3b.34)$$

Neste ponto, devemos nos preocupar com o significado do limite clássico desta equação quântica. Para que possamos estudar o limite clássico de uma forma coerente, devemos introduzir a transformada de Wigner do operador densidade reduzido [21] que é definida como

$$W(q,p,t) \equiv \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{ipu}{\hbar}\right) \tilde{\rho}\left(q - \frac{u}{2}, q + \frac{u}{2}, t\right) du \quad (3b.35)$$

Esta função é particularmente importante porque, no limite clássico ($\hbar \rightarrow 0$), reduz-se à função de distribuição no espaço de fase da partícula. Então, invertendo a (3b.35) podemos escrever

$$\tilde{\rho}(x,y,t) = \int_{-\infty}^{\infty} W\left(\frac{x+y}{2}, p, t\right) \exp\left(-\frac{ip}{\hbar} (x-y)\right) dp \quad (3b.36)$$

que, quando substituída em (3b.34), nos fornece, finalmente, a equação para a transformada $W(q,p,t)$,

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} pW + \frac{\partial}{\partial p} \left[V_o'(q)W \right] + 2\gamma \frac{\partial}{\partial p} [pW] + D \frac{\partial^2 W}{\partial p^2} \quad (3b.37)$$

onde $D \equiv \eta kT$. Vemos, então, que no limite clássico nosso modelo nos leva à equação de Fokker-Planck para a transformada de Wigner de $\tilde{\rho}(x,y,t)$, como era de se esperar (vide (2a.26)).

Convém notar que, apesar da função de Wigner, $W(q,p,t)$, ser puramente quântica, apenas o seu limite clássico faz sentido em (3b.37) já que a equação diferencial (3b.34) foi deduzida neste limite. Para o caso geral, deveríamos ter uma generalização de (3b.34), que, por sua vez, acarretaria na obtenção de uma equação de Fokker-Planck modificada para $W(q,p,t)$. A vantagem de se trabalhar com a representação de integrais funcionais neste problema é que podemos tratar o limite quântico diretamente através da resolução das integrais funcionais em (3b.31) (em alguns casos) sem a necessidade de generalizar (3b.34) ou (3b.37). Portanto, a solução do problema dinâmico a qualquer temperatura, reduz-se à resolução de (3b.31).

c) O operador densidade reduzido em equilíbrio

Apesar de termos desenvolvido uma expressão para a evolução temporal de $\tilde{\rho}(x,y,t)$, há diversos problemas que podemos resolver conhecendo apenas o operador densidade reduzido da partícula quando o sistema composto está em equilíbrio. Para tal, bastaria que tomássemos o limite quando $t \rightarrow \infty$ do operador densidade reduzido $\tilde{\rho}(x,y,t)$ para obter sua expressão em equilíbrio. Entretanto, esta manobra envolve, primeiramente, a resolução explícita de (3b.31) para então podermos analisar o estado de equilíbrio termodinâmico com o conhecimento de $\tilde{\rho}(x,y,t)$.

Há porém uma maneira mais direta de lidarmos com este problema. O operador densidade do sistema composto em equilíbrio é dado por

$$\langle x\vec{R} | e^{-\beta H} | y\vec{Q} \rangle = \rho(x,\vec{R};y,\vec{Q},\beta) \quad , \quad (3c.1)$$

onde H é a hamiltoniana do sistema composto, $H = H_S + H_I + H_R$, como em (3b.1). Usando, então, a representação de integrais funcionais que pode ser generalizada de (AI.44) e (AI.45) pode-se reescrever (3c.1) como

$$\rho(x, \vec{R}; y, \vec{Q}, \beta) = \int_y^x \int_{\vec{Q}}^{\vec{R}} dq(\tau) d\vec{R}(\tau) \exp - \frac{1}{\hbar} S_E[q(\tau), \vec{R}(\tau)] \quad , \quad (3c.2)$$

onde

$$S_E[q(\tau), \vec{R}(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} \left\{ \frac{1}{2} M \dot{q}^2 + V_0(q) + \sum_k C_k q R_k + \sum_k \frac{1}{2} m_k \dot{R}_k^2 + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 R_k^2 \right\} d\tau \quad (3c.3)$$

é a chamada "ação Euclideana" do sistema composto. O operador densidade reduzido da partícula é dado por

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(x, y, \beta) &= \int d\vec{R} \rho(x, \vec{R}; y, \vec{R}, \beta) = \\ &= \int_y^x dq(\tau) \int d\vec{R} \int_{\vec{R}}^{\vec{R}} D\vec{R}(\tau) \exp - \frac{1}{\hbar} S_E[q(\tau), \vec{R}(\tau)] \quad , \quad (3c.4) \end{aligned}$$

que envolve o produto de integrais funcionais do tipo

$$A_k(\beta) \equiv \int dR_k \int_{R_k}^{R_k} DR_k(\tau) \exp - \frac{1}{\hbar} \left\{ \int_0^{\hbar\beta} \left[\frac{1}{2} m_k \dot{R}_k^2 + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 R_k^2 + C_k R_k q \right] d\tau \right\} \quad (3c.5)$$

Estas integrais são exatamente as mesmas que resolvemos na seção anterior em (3b.16) e (3b.17) se substituirmos t por $-\hbar\beta$ e fizermos $R_k = R'_k$. O resultado final é dado por

$$A_k(\beta) = I_k(0) \exp \frac{C_k^2}{4m_k \hbar \omega_k} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \frac{q(\tau)q(\tau') \cosh \omega_k (|\tau - \tau'| - \hbar\beta/2)}{\sinh (\hbar\beta\omega_k/2)} \quad , \quad (3c.6)$$

onde

$$I_k(0) = \frac{1}{2} \operatorname{cosech} \left(\frac{\hbar \omega_k \beta}{2} \right) \quad (3c.7)$$

A expressão (3c.6) adquire uma forma extremamente simples se definirmos $q(\tau)$ fora do domínio $0 \leq \tau < \hbar\beta$ através de $q(\tau+\hbar\beta) = q(\tau)$ [21]. Assim,

$$A_k(\beta) = \frac{1}{2} \operatorname{cosech} \left(\frac{\hbar \omega_k \beta}{2} \right) \exp \frac{C_k^2}{4m_k \hbar \omega_k} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_0^{\hbar\beta} d\tau \exp -\omega_k |\tau - \tau'| \cdot \quad (3c.8)$$

$$\cdot q(\tau)q(\tau')$$

Substituindo este resultado em (3c.4), temos

$$\tilde{\rho}(x, y, \beta) = \tilde{\rho}_0(\beta) \int_y^x Dq(\tau) \exp - \frac{S_E^{(0)}[q(\tau)]}{\hbar} \exp \frac{\Lambda}{\hbar} [q(\tau)] \quad (3c.9)$$

onde

$$\tilde{\rho}_0(\beta) = \prod_k \frac{1}{2} \operatorname{cosech} \left(\frac{\hbar \beta \omega_k}{2} \right) \quad (3c.10a)$$

$$S_E^{(0)}[q(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} \left[\frac{1}{2} M \dot{q}^2 + V_0(q) \right] d\tau \quad (3c.10b)$$

$$\Lambda[q(\tau)] = \sum_k \frac{C_k^2}{4m_k \omega_k} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_0^{\hbar\beta} d\tau q(\tau)q(\tau') \exp -\omega_k |\tau - \tau'| \quad (3c.10c)$$

Agora, usando a identidade

$$q(\tau)q(\tau') = \frac{1}{2} \left\{ q^2(\tau) + q^2(\tau') - \left(q(\tau) - q(\tau') \right)^2 \right\} \quad (3c.11)$$

podemos escrever $\Lambda[q(\tau)]$ como

$$\Lambda = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_0^{\hbar\beta} \alpha(\tau-\tau') \{q(\tau)-q(\tau')\}^2 d\tau + \\ + \sum_k \frac{C_k^2}{4m_k \omega_k} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_0^{\hbar\beta} \left\{ \frac{q^2(\tau)}{2} + \frac{q^2(\tau')}{2} \right\} \exp -\omega_k |\tau-\tau'| d\tau \quad , \quad (3c.12)$$

onde

$$\alpha(\tau-\tau') = \sum_k \frac{C_k^2}{4m_k \omega_k} \exp -\omega_k |\tau-\tau'| = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} J(\omega) \exp -\omega |\tau-\tau'| d\omega. \quad (3c.13)$$

A segunda integral em (3c.12) pode ser trivialmente efetuada e como resultado temos a bem conhecida correção

$$\int_0^{\hbar\beta} \frac{1}{2} M(\Delta\omega)^2 q^2(\tau) d\tau \quad ,$$

que já foi discutida em diversas oportunidades ao longo deste curso. Portanto, o operador densidade reduzido da partícula em equilíbrio fica

$$\tilde{\rho}(x,y,\beta) = \tilde{\rho}_0(\beta) \int_y^x Dq(\tau) \exp -\frac{S_{\text{eff}}[q(\tau)]}{\hbar} \quad , \quad (3c.14)$$

onde

$$S_{\text{eff}}[q(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} \left\{ \frac{1}{2} M \dot{q}^2 + V_0(q) \right\} d\tau + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_0^{\hbar\beta} d\tau \alpha(\tau-\tau') \{q(\tau)-q(\tau')\}^2 \quad . \quad (3c.15)$$

No caso particular de $J(\omega) = \eta\omega$ temos

$$\alpha(\tau-\tau') = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \eta\omega \exp -\omega |\tau-\tau'| d\omega = \frac{\eta}{2\pi} \frac{1}{(\tau-\tau')^2} \quad . \quad (3c.16)$$

IV. Aplicações

No capítulo anterior fomos capazes de escrever o operador densidade reduzido (dinâmico ou em equilíbrio) da partícula de interesse em uma representação de integrais funcionais. Cabe-nos agora tentar resolver estas integrais em alguns casos de interesse como já mencionamos no capítulo II.

a) Dinâmica de pacotes de onda em potenciais simples

Nesta seção, resolveremos um dos poucos exemplos que podem ser tratados exatamente: o oscilador harmônico quântico com dissipação. Usando a (3b.31) para este exemplo específico temos

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x \int_{y'}^y Dx(\tau) Dy(\tau) \exp \frac{1}{\hbar} \tilde{S}[x(\tau), y(\tau)] \exp - \frac{1}{\hbar} \phi[x(\tau), y(\tau)] \quad (4a.1)$$

onde

$$\tilde{S}[x(\tau), y(\tau)] = \int_0^t \tilde{L}(x, \dot{x}, y, \dot{y}) - M\gamma \int_0^t (x\dot{x} - y\dot{y}) d\tau \quad (4a.2)$$

$$\tilde{L}(x, \dot{x}, y, \dot{y}) = \frac{1}{2} M\dot{x}^2 - \frac{1}{2} M\dot{y}^2 - \frac{1}{2} M\omega_0^2 x^2 + \frac{1}{2} M\omega_0^2 y^2 - M\gamma x\dot{y} + M\gamma y\dot{x} \quad (4a.3)$$

e

$$\phi[x(\tau), y(\tau)] = \frac{2M\gamma}{\pi} \int_0^\Omega \nu \coth \frac{\hbar\nu}{2kT} \int_0^t \int_0^\tau [x(\tau) - y(\tau)] \cos \nu(\tau - \sigma) [x(\sigma) - y(\sigma)] d\sigma d\tau d\nu \quad (4a.4)$$

Como a integral funcional acima é gaussiana, podemos

resolvê-la exatamente. Vamos inicialmente expandir o integrando no entorno de caminhos $x_c(\tau)$ e $y_c(\tau)$ convenientes para o nosso cálculo. Escolhamos $x_c(\tau)$ e $y_c(\tau)$ tais que

$$\left. \frac{\delta \tilde{S}}{\delta x} \right|_{\substack{x=x_c \\ y=y_c}} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial x} = M\ddot{x}_c + 2M\gamma\dot{y}_c + M\omega_o^2 x_c = 0 \quad (4a.5)$$

$$\left. \frac{\delta \tilde{S}}{\delta y} \right|_{\substack{x=x_c \\ y=y_c}} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial y} = M\ddot{y}_c + 2M\gamma\dot{x}_c + M\omega_o^2 y_c = 0 \quad (4a.6)$$

Definindo os caminhos

$$q(\tau) = \frac{x(\tau)+y(\tau)}{2} \quad \text{e} \quad \xi(\tau) = x(\tau)-y(\tau) \quad , \quad (4a.7)$$

as equações (4a.5) e (4a.6) transformam-se em

$$\ddot{q}_c + 2\gamma\dot{q}_c + \omega_o^2 q_c = 0 \quad (4a.8)$$

$$\ddot{\xi}_c - 2\gamma\dot{\xi}_c + \omega_o^2 \xi_c = 0 \quad (4a.9)$$

Dadas as condições iniciais $q(0) = q'$, $\dot{q}(0) = \dot{q}'$, $\xi(0) = \xi'$ e $\dot{\xi}(0) = \dot{\xi}'$, as soluções destas equações de movimento são

$$q_c(\tau) = (\sin \omega t)^{-1} \left\{ q e^{\gamma t} \sin \omega \tau + q' \sin \omega(t-\tau) \right\} e^{-\gamma \tau} \quad , \quad (4a.10)$$

$$\xi_c(\tau) = (\sin \omega t)^{-1} \left\{ \xi e^{-\gamma t} \sin \omega \tau + \xi' \sin \omega(t-\tau) \right\} e^{\gamma \tau} \quad , \quad (4a.11)$$

onde $\omega = \sqrt{\omega_o^2 - \gamma^2}$ se $\omega_o > \gamma$ e $\omega = i\sqrt{\gamma^2 - \omega_o^2}$ se $\omega_o < \gamma$. Outro caso interessante é o da partícula livre ($V = 0$) onde ω deve ser substituído por $i\gamma$ em (4a.10 e 11).

De posse das soluções (4a.10 e 11) podemos definir novos caminhos $\tilde{q}(\tau)$ e $\tilde{\xi}(\tau)$ centrados em $q_c(\tau)$ e $\xi_c(\tau)$:

$$\tilde{\xi}(\tau) = \xi(\tau) - \xi_c(\tau) \quad \text{e} \quad \tilde{q}(\tau) = q(\tau) - q_c(\tau) \quad (4a.12)$$

e reescrever a (4a.1) como

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{S}_c \right\} \exp - \frac{1}{\hbar} \left\{ A(t) \xi^2 + B(t) \xi \xi' + C(t) \xi'^2 \right\} \\ * G(q, \xi, t; q', \xi', 0) \quad , \quad (4a.13)$$

cujos termos passamos a analisar abaixo.

A primeira exponencial envolve a "ação clássica", $\tilde{S}_c$, dada por

$$\tilde{S}_c = K(t)[q\xi + q'\xi'] - L(t)q'\xi - N(t)q\xi' - M\gamma[q\xi - q'\xi'] \quad , \quad (4a.14)$$

onde

$$K(t) = M\omega \cotan \omega t \quad , \quad L(t) = \frac{M\omega e^{-\gamma t}}{\sin \omega t} \quad e \quad N(t) = \frac{M\omega e^{\gamma t}}{\sin \omega t} \quad ,$$

que é oriunda de (4a.2) calculada em $q_c(\tau)$ e $\xi_c(\tau)$.

A segunda exponencial em (4a.13) é proveniente da integração (4a.4) efetuada sobre os caminhos $q_c(\tau)$ e $\xi_c(\tau)$ e as funções $A(t)$, $B(t)$ e $C(t)$ são da forma

$$f(t) = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\Omega dv \, v \coth \frac{\hbar v}{2kT} f_v(t) \quad , \quad (4a.16)$$

onde

$$A_v(t) = \frac{e^{-2\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega \tau \cos v(\tau - \sigma) \sin \omega \sigma e^{\gamma(\tau + \sigma)} d\tau d\sigma \quad , \quad (4a.17)$$

$$B_v(t) = \frac{2 e^{-\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega \tau \cos v(\tau - \sigma) \sin \omega(t - \sigma) e^{\gamma(\tau + \sigma)} d\tau d\sigma \quad , \quad (4a.18)$$

$$C_\nu(t) = \frac{1}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega(t-\tau) \cos \nu(\tau-\sigma) \sin \omega(t-\sigma) e^{\gamma(\tau+\sigma)} d\tau d\sigma \quad (4a.19)$$

Finalmente, a expressão para $G(q, \xi, t; q', \xi', 0)$ é dada por

$$G(q, \xi, t; q', \xi', 0) = \int_0^0 \int_0^0 \frac{D\tilde{q}(\tau) D\tilde{\xi}(\tau)}{2} \exp \frac{1}{\hbar} \tilde{S}[\tilde{q}(\tau), \tilde{\xi}(\tau)] * \\ * \exp - \frac{1}{\hbar} \phi_T[\tilde{\xi}(\tau), \tilde{\xi}(\tau)] \exp \frac{2}{\hbar} \phi_T[\xi_c(\tau), \tilde{\xi}(\tau)] \quad (4a.20)$$

onde

$$\phi_T[f(\tau), g(\tau)] \equiv \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\Omega d\nu \nu \coth \frac{\hbar\nu}{2kT} \int_0^t \int_0^t f(\tau) \cos \nu(\tau-\sigma) g(\sigma) d\tau d\sigma. \quad (4a.21)$$

Se não fosse pela integral funcional (4a.20), a expressão para $J(q, \xi, t; q', \xi', 0)$ já estaria na forma desejada para efetuarmos a evolução temporal de qualquer pacote de onda neste potencial. Quando tratamos de integrais funcionais simples, este termo é uma função do tempo (ver exemplo de integrais funcionais quadráticas no apêndice I) o que não é um resultado óbvio de uma simples inspeção em (4a.20), devido à sua dependência funcional em $\xi_c(\tau)$. Entretanto, este fato é também verdadeiro na integração (4a.20) como veremos a seguir.

Ao discretizarmos a integral (4a.20), facilmente constataremos que a forma resultante pode ser representada simbolicamente por

$$N \int \delta U \exp - \frac{1}{2} U^T M U \exp - A U \quad (4a.22)$$

onde $U^T = (\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N, \tilde{\xi}_1, \dots, \tilde{\xi}_N)$ é um vetor em $2N$ dimensões, $\delta U = \delta \tilde{q}_1 \dots \delta \tilde{q}_N \delta \tilde{\xi}_1 \dots \delta \tilde{\xi}_N$ é o elemento de volume neste espaço, A é outro vetor em $2N$ dimensões oriundo da discretização de $\xi_c(\tau)$ e M é uma matriz $2N \times 2N$. O que há de interessante na forma específica de (4a.20) é que

$$A = \begin{bmatrix} 0 \\ a \end{bmatrix} \quad e \quad M = \begin{bmatrix} 0 & p \\ p & r \end{bmatrix} \quad (4a.23)$$

onde a é um vetor N -dimensional e, p e r são matrizes $N \times N$. As formas específicas de A e M são devidas ao fato de não existir acoplamento da forma $q(\tau)q(\sigma)$ em (4a.20).

A integral (4a.22) em $2N$ dimensões é um exemplo já bem conhecido de integrais Gaussianas multidimensionais e o resultado é

$$N \int \delta U \exp - \frac{1}{2} U^T M U \exp - AU = \frac{1}{(\det iM)^{1/2}} \exp - \frac{1}{2} A M^{-1} A \quad (4a.24)$$

Mas devido ao fato de N ter o seu bloco superior esquerdo nulo, sua inversa terá, necessariamente, o bloco inferior direito nulo. Assim sendo, o produto $A M^{-1} A$ será, obviamente, igual a zero. Por outro lado, como sabemos que toda a dependência de (4a.20) em q, ξ, q' e ξ' está contida em A , concluímos que $G(q, \xi, t; q', \xi', 0)$ é função única e exclusivamente do tempo. Esta função pode ser encontrada através do cálculo do $\det M$, como foi feito no apêndice I, ou determinada pela condição de normalização do operador densidade reduzido no final do problema. A fim de simplificar os cálculos, iremos determinar $G(t)$ desta última maneira. Podemos então reescrever a (4a.13) como

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = G(t) \exp \frac{1}{\hbar} \{ [K(t) - M\gamma] q \xi + [K(t) + M\gamma] q' \xi' - \\ - L(t) q' \xi - N(t) q \xi' \} \exp - \frac{1}{\hbar} \{ A(t) \xi^2 + B(t) \xi \xi' + C(t) \xi'^2 \} \quad (4a.25)$$

e determinar $G(t)$ posteriormente.

Em termos das novas variáveis q, ξ, q' e ξ' o operador densidade reduzido da partícula ainda pode ser escrito como

$$\tilde{\rho}(q, \xi, t) = \int dq' d\xi' J(q, \xi, t; q', \xi', 0) \tilde{\rho}(q', \xi', 0) \quad (4a.26)$$

onde $\tilde{\rho}(q', \xi', 0)$ é o estado inicial da partícula. Em nosso exemplo

específico, tomemos $\tilde{\rho}(q', \xi', 0)$ como um estado puro representado por

$$\tilde{\rho}(q', \xi', 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \frac{1}{\hbar} p\xi' \exp - \frac{q'^2}{2\sigma^2} \exp - \frac{\xi'^2}{8\sigma^2} \quad (4a.27)$$

que é simplesmente o produto $\psi(x')\psi^*(y')$ onde

$$\psi(x') = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp \frac{1px'}{\hbar} \exp - \frac{x'^2}{4\sigma^2} \quad (4a.28)$$

Esta condição inicial representa uma partícula centrada na origem com incerteza σ em sua posição e momentum médio p . Com este valor inicial de $\tilde{\rho}$, a integral (4a.26) pode ser facilmente efetuada resultando em

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(q, \xi, t) = & \frac{G(t)}{2} \left(\frac{\pi\hbar^2}{\sigma^2 K_1(t) + \hbar C_1(t)} \right)^{1/2} \exp - \frac{N^2(t)}{2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar C_1^2(t)} \left(q - \frac{p}{N(t)} \right)^2 \\ & * \exp - \left(\frac{A(t)}{\hbar} + \frac{\sigma^2 L^2(t)}{2\hbar^2} - \frac{\left(\sigma^2 K_1(t)L(t) - \hbar B(t) \right)^2}{\hbar^2 \left(2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar C_1(t) \right)} \right) \xi^2 \\ & * \exp \frac{1}{\hbar} \left(K_2(t)q\xi - \frac{\left(\sigma^2 K_1(t)L(t) - \hbar B(t) \right) N(t)}{\left(\sigma^2 K_1^2(t) + 2\hbar C_1(t) \right)} \left(q - \frac{p}{N(t)} \right) \xi \right), \quad (4a.29) \end{aligned}$$

onde

$$C_1(t) = C(t) + \frac{\hbar}{8\sigma^2}, \quad K_1(t) = K(t) + M\gamma \quad \text{e} \quad K_2(t) = K(t) - M\gamma \quad (4a.30)$$

A evolução temporal do pacote que representa a partícula de interesse é obtida através de (4a.29) quando $\xi = 0$, ou seja, $\tilde{\rho}(q, 0, t) = \tilde{\rho}(x, x, t)$ que são os elementos diagonais de $\tilde{\rho}(x, y, t)$. A expressão para $\tilde{\rho}(x, x, t)$ depois de convenientemente normalizada é escrita como

$$\tilde{\rho}(x, x, t) = \left(\frac{N^2(t)}{2\pi\sigma^2 K_1^2(t) + 4\pi\hbar C_1^2(t)} \right)^{1/2} \exp - \frac{N^2(t)}{2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar C_1^2(t)} \left(x - \frac{p}{N(t)} \right)^2, \quad (4a.31)$$

o que nos permite determinar o movimento do centro do pacote através de

$$x_0(t) \equiv \frac{p}{N(t)} \quad (4a.32)$$

Para o oscilador harmônico sub-amortecido ($\omega_0 > \gamma$), por exemplo, $x_0(t)$ é dado por

$$x_0(t) = \frac{p}{M\omega} \sin \omega t e^{-\gamma t}, \quad (4a.33)$$

que é, exatamente, a trajetória clássica de uma partícula com momentum inicial p e posição inicial zero.

A largura do pacote, pode, também, ser identificada a partir de (4a.31) como

$$\sigma^2(t) = \frac{\sigma^2 K_1^2(t) + 2\hbar C_1^2(t)}{N^2(t)} \quad (4a.34)$$

Esta expressão para a evolução temporal de $\sigma(t)$ permite-nos calcular o valor da largura para alguns instantes particularmente importantes. Por exemplo, podemos computar a largura $\sigma^2(t)$ quando $t \rightarrow \infty$, que é o valor de equilíbrio de $\sigma^2(t)$. Usando as equações (4a.30), (4a.15), (4a.19) e tomando o limite quando $t \rightarrow \infty$ de (4a.34) pode-se mostrar, após algum trabalho, que

$$\sigma^2(\infty) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty dv \coth \frac{\hbar v}{2kT} \left(\frac{1}{M} \frac{2\gamma v}{\left(\omega_0^2 - v^2 \right)^2 + 4\gamma^2 v^2} \right), \quad (4a.35)$$

que é um resultado bem familiar da teoria da resposta linear. Ao identificarmos que o termo entre parenteses no integrando de (4a.35) é a parte imaginária da função resposta de um oscilador amortecido, podemos escrever

$$\sigma^2(\omega) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} d\nu \coth \frac{\hbar\nu}{2kT} \chi''(\nu) \quad (4a.36)$$

onde $\chi''(\nu) = \text{Im } \chi(\nu)$. A equação (4a.36) é o famoso "teorema de flutuação e dissipação" (ver, por exemplo, [14] ou [22]).

Podemos, com o auxílio de (4a.36), estudar o comportamento da largura do pacote de onda da partícula browniana em equilíbrio em função da constante de relaxação γ e da temperatura T . A integral em (4a.36) é particularmente simples no caso de temperatura zero quando podemos aproximar $\coth(\hbar\nu/2kT) \approx 1$. O resultado da integração é

$$\sigma^2(\omega) = \frac{\hbar}{2M\omega_0} f(\alpha) \quad \left(\alpha \equiv \frac{\gamma}{\omega_0} \right) \quad (4a.37)$$

onde

$$f(\alpha) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{1-\alpha^2}} \left(1 - \frac{2}{\pi} \tan^{-1} \frac{\alpha}{\sqrt{1-\alpha^2}} \right) & \text{se } \alpha < 1 \\ \frac{1}{\sqrt{\alpha^2-1}} \frac{1}{\pi} \ln \left| \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2-1}}{\alpha - \sqrt{\alpha^2-1}} \right| & \text{se } \alpha > 1 \end{cases} \quad (4a.38)$$

que nos mostra que quanto maior a dissipação, menor será a incerteza na posição da partícula browniana. Consequentemente, deveremos ter um aumento na incerteza da distribuição dos momenta. Este fato é característico do tipo de dissipação na equação de movimento da partícula. Na equação de Langevin, a dissipação é tal que $dE/dt \propto \dot{q}^2$ por sua vez está intimamente ligada ao acoplamento da forma $\sum_k C_k q_k \dot{q}_k$. Quando a dissipação é tal que $dE/dt \propto \dot{p}^2$, o efeito nas incertezas de posição e momentum é oposto ao estudado no caso anterior. Esta dissipação "anômala" foi tratada explicitamente na referência [23].

Com a obtenção de (4a.29) temos toda a informação necessária para estudar o oscilador harmônico amortecido a qualquer temperatura.

Mais ainda, outro exemplo particularmente interessante pode ser investigado se tomarmos o limite $\omega_0 \rightarrow 0$ (e $\omega \rightarrow i\gamma$) de nossas expressões: o movimento da partícula livre com dissipação.

Não é necessário refazer todas as integrais desta seção para acompanharmos a evolução temporal de $\tilde{\rho}(x,x,t)$. Basta que tomemos o limite apropriado na expressão (4a.31). Como era de se esperar o centro do pacote segue a trajetória clássica que é dada por

$$x_0(t) = \frac{p}{2M\gamma} \left(1 - e^{-2\gamma t} \right) \quad , \quad (4a.39)$$

enquanto que a largura do pacote (a $T = 0$) comporta-se assintoticamente como

$$\sigma^2(t) \sim \frac{4\hbar}{\pi M\gamma} \ln \sqrt{\frac{\Omega\gamma}{2}} t \quad , \quad (4a.40)$$

Note que apesar do pacote ainda alastrar-se espacialmente, ele o faz de forma bem mais lenta que quando $\gamma = 0$ (neste caso, $\sigma(t) \propto t$). Ainda sobre o comportamento de $\sigma(t)$ devemos chamar a atenção do leitor para dois pontos: Em primeiro lugar, o comportamento logaritmico apenas faz sentido a $T = 0$. Mesmo a temperaturas extremamente baixas, o termo clássico $\sigma_c^2(t) = (2kT) t/\eta$ torna-se mais importante que (4a.40) em um intervalo de tempo muito curto. Em segundo lugar, a dependência de (4a.40) na frequência Ω é devida à escolha de condição inicial do sistema composto ser da forma (3b.7). Recentemente, foi mostrado [18] que, modificando-se a condição (3b.7), o comportamento de $\sigma(t)$ torna-se independente de Ω .

Para finalizar esta seção, gostaríamos de fazer alguns comentários adicionais. Em primeiro lugar, queremos deixar claro que o modelo aqui adotado para o reservatório nos permitiu desenvolver exatamente a forma do funcional de influência (3b.15) do sistema. Entretanto, a integral funcional resultante (4a.1) só pode ser resolvida analiticamente para potenciais simples da forma $V(q) = C q^n$ ($n = 0, 1, 2$). Para estes valores de n a (4a.1) é uma integral funcional gaussiana e, portanto, exatamente solúvel. Os caminhos $q_c(\tau)$ e $\xi_c(\tau)$ foram escolhidos por pura conveniência já que, com eles, as equações (4a.2) e (4a.9) são

totalmente independentes.

No caso de potenciais mais complicados, poderíamos resolver a integral por métodos aproximados como, por exemplo, o método de fase estacionária ainda que esta aproximação só nos dê o comportamento do sistema no limite semi-clássico ($\hbar \rightarrow 0$). Mesmo assim, as soluções das equações de Euler-Lagrange correspondentes à parte imaginária $\tilde{S}[q(\tau), \xi(\tau)]$ não nos seriam muito úteis, já que, no método do ponto de sela, necessitaríamos do princípio variacional aplicado a todo o expoente, $\tilde{S} + i\phi$, da (4a.1). As equações de Euler-Lagrange que daí resultam são equações integro-diferenciais, não-lineares e acopladas, o que torna a resolução de (4a.1) possível apenas por métodos numéricos [24].

A resolução de integrais funcionais do tipo (4a.1) para potenciais mais complicados aparecerá em futuras aplicações onde aproximações muito específicas serão usadas para cada caso particular.

b) Destruição da interferência quântica em meios dissipativos

O problema que iremos tratar nesta seção é, basicamente, o mesmo que o da seção anterior no que diz respeito à sua formulação geral. Entretanto, o efeito a ser estudado é bem diferente.

Desde nossos cursos básicos de mecânica quântica estamos familiarizados com o conceito de interferência entre estados quânticos. O paradigma deste fenômeno é a famosa "experiência" da fenda dupla. Nosso objetivo nesta seção, é o de estudar a influência de um meio dissipativo no fenômeno de interferência quântica. Para tal, vamos, inicialmente, definir exatamente o problema a ser atacado.

O que pretendemos é estudar a evolução temporal de um oscilador harmônico amortecido cujo estado inicial é dado por

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x) = \tilde{N} \exp\left[-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right] + \exp\left[-\frac{(x-q_0)^2}{4\sigma^2}\right] \quad (4b.1)$$

onde $\tilde{N}$ é uma constante de normalização e σ é a largura inicial dos dois pacotes que, por simplicidade, tomaremos como a largura do estado fundamental do oscilador harmônico ($\sigma = \hbar/2M\omega_0$). Porém, antes de entrar

no mérito dos efeitos dissipativos, vamos relembrar o que devemos esperar da evolução temporal de $\rho(x,y,t)$ quando o oscilador está isolado, ou seja, $\gamma = 0$ na eq. (3b.31). Usando a condição inicial (4b.1) podemos escrever $\rho(x',y',0)$ como

$$\rho(x',y',0) = \rho_1(x',y',0) + \rho_2(x',y',0) + \rho_{int}(x',y',0) \quad (4b.2)$$

onde $\rho_1(x',y',0) = \psi_1^*(y')\psi_1(x')$, $\rho_2(x',y',0) = \psi_2^*(y')\psi_2(x')$ e $\rho_{int}(x',y',0) = \psi_1^*(y')\psi_2(x') + \psi_2^*(y')\psi_1(x')$. O termo ρ_1 representa o pacote centrado na origem, ρ_2 o pacote centrado em q_0 e finalmente ρ_{int} é o termo de interferência entre ρ_1 e ρ_2 . Quando $q_0 \gg \sigma$ este termo é desprezível.

Nossa intenção é estudar a evolução temporal de $\rho(x,x,t)$ que é obtido através de (4a.26) (obviamente após a mudança de variáveis $(x,y) \rightarrow (q,\xi)$ para $q = x$ e $\xi = 0$). Como a evolução de ρ é linear temos que

$$\rho(x,x,t) = \rho_1(x,x,t) + \rho_2(x,x,t) + \rho_{int}(x,x,t) \quad (4b.3)$$

onde ρ_1 e ρ_2 representam os pacotes 1 e 2 se eles estivessem sozinhos no potencial (e cuja dinâmica já nos é bem familiar) e

$$\rho_{int}(x,x,t) = 2\sqrt{\rho_1(x,t)}\sqrt{\rho_2(x,t)}\cos\phi(x,t) \quad (4b.4)$$

A expressão (4b.4) nos diz que o termo de interferência é mais intenso quando os dois pacotes coincidem. Em particular, quando $t = \frac{n\pi}{\omega} + \frac{\pi}{2\omega_0}$ pode-se calcular (4b.4) como

$$\rho_{int}\left(x, \frac{n\pi}{\omega} + \frac{\pi}{2\omega_0}\right) \propto \cos\left(\frac{q_0}{\sigma^2}x\right) \exp - \frac{x^2}{\sigma^2} \quad (4b.5)$$

Este resultado nos lembra muito o de uma experiência de interferência em ótica quando a intensidade luminosa em um anteparo, provocada pela emissão de luz de duas fontes (coerentes) distantes, é dada por

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \phi(x) \quad (4b.6)$$

onde $I_1(I_2)$ é a intensidade devido à primeira (segunda) fonte e $\phi(x)$ é uma função da medida linear x sobre o anteparo.

As equações (4b.3) e (4b.4) são a origem de nossa nova questão. Se repetíssemos todo o problema com a expressão (3b.31) com $\gamma \neq 0$, o caráter linear da evolução temporal seria ainda preservado e teríamos

$$\tilde{\rho}(x,t) = \tilde{\rho}_1(x,t) + \tilde{\rho}_2(x,t) + \tilde{\rho}_{int}(x,t) \quad , \quad (4b.7)$$

onde agora $\tilde{\rho}_1$ e $\tilde{\rho}_2$ representariam pacotes sujeitos à dissipação como em (4a.31) e $\tilde{\rho}_{int}(x,t)$ seria dado por

$$\rho_{int}(x,t) = 2\sqrt{\tilde{\rho}_1(x,t)} \sqrt{\tilde{\rho}_2(x,t)} \cos \phi(x,t) \exp -f(t) \quad , \quad (4b.8)$$

que é ainda da forma (4b.4), exceto pela presença de um fator de atenuação $\exp -f(t)$. A pergunta que surge naturalmente é; como a função de relaxação $f(t)$ se relaciona com a função de relaxação γt do movimento dos pacotes?

Em princípio a questão é simples, pois $f(t)$ pode ser obtida diretamente quando resolvemos a integral

$$\tilde{\rho}_{int}(x,x,t) = \int dx' dy' J(x,x,t;x',y',0) \tilde{\rho}_{int}(x',y',0) \quad , \quad (4b.9)$$

onde $\tilde{\rho}_{int}(x',y',0)$ é dado por (4b.2) e J é o propagador em (3b.11). As integrais são, como antes, gaussianas e de simples resolução. Para facilitar nossa análise da exponencial em (4b.8), vamos definir algumas quantidades como

$$\alpha \equiv \frac{\gamma}{\omega_0} \quad ; \quad S \equiv \frac{\omega}{\omega_0} \quad ; \quad \theta \equiv \omega_0 t \quad ; \quad \kappa \equiv \frac{\hbar \omega_0}{2kT} \quad ; \quad \lambda_c \equiv \frac{\Omega}{\omega_0}$$

$$q(\theta) = q_0 \left[\frac{\alpha \sin S\theta}{S} + \cos S\theta \right] \exp -\alpha\theta \quad ,$$

$$C_R(\theta, \lambda) = \frac{1}{\sin^2 S\theta} \int_0^\theta \int_0^\theta \sin \left[S(\theta - \theta_1) \right] \cos \left[\lambda(\theta_1 - \theta_2) \right] \sin \left[S(\theta - \theta_2) \right] \cdot$$

$$* \exp \left[\alpha (\theta_1 + \theta_2) \right] d\theta_1 d\theta_2$$

$$I_R(\theta) = \frac{4}{\pi} \int_0^{\lambda_c} d\lambda \lambda C_R(\theta, \lambda) \coth(\kappa \lambda) ; Q(\theta) \equiv 1 + \alpha I_R(\theta) + (\alpha S \cotan S\theta)^2$$

e

$$\sigma^2(\theta) = \frac{\sigma^2 Q(\theta) \sin^2(S\theta) \exp -(2\alpha\theta)}{S^2} \quad (4b.10)$$

em termos das quais o fator de atenuação é escrito como

$$\exp -f(t) = \exp - \frac{q_0^2 \alpha I_R(\theta)}{8\sigma^2 Q(\theta)} \quad (4b.11)$$

e a nossa meta é a análise deste expoente.

Antes de iniciarmos a análise propriamente dita, convém notar que as expressões em (4b.10) são provenientes da integração (4b.9) no caso do movimento sub-amortecido ($\gamma < \omega_0$) e $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}$. Quando $\gamma > \omega_0$ devemos lembrar que $\omega = i \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}$ (como na seção anterior) e as demais funções devem ser convenientemente modificadas.

Tanto para o movimento sub-amortecido quanto para o super-amortecido, a função $g(\theta) \equiv \alpha I_R(\theta)/Q(\theta)$ é tal que $g(0) = 0$ e $g(\infty) = 1$. Consequentemente, o fator de atenuação tende a $\exp -(N/2)$ quando $t \rightarrow \infty$, onde $N \equiv q_0^2/4\sigma^2$ (note que N é o número médio de quanta de energia, $\hbar\omega_0$, do oscilador harmônico no instante inicial). Como estamos interessados em situações tais que $q_0 \gg \sigma$, temos $N \gg 1$ e podemos considerar o fator de atenuação como nulo a tempos longos. Na realidade, a interferência residual, $\exp -(N/2)$, quando $t \rightarrow \infty$, é devida ao fato de termos desprezado o "overlap" inicial dos pacotes de onda na normalização de $\tilde{\rho}(x', y', 0)$. Se levarmos em conta esta correção, a contribuição anômala da interferência residual irá desaparecer.

A análise que faremos de $g(\theta)$ envolve um estudo cuidadoso de

seu comportamento em alguns limites de interesse. Nesta seção, estaremos interessados em estudar a destruição de interferência nos limites de altas e baixas temperaturas e, em cada um dos casos, estudar ainda os limites de dissipação fraca e forte. O estudo detalhado de $g(\theta)$ nestas quatro situações, depende apenas da habilidade matemática de quem se candidate a tal tarefa. A apresentação explícita dos detalhes matemáticos serviria apenas para estender desnecessariamente esta seção sem acrescentar absolutamente nada à física do problema. Vamos, então, apresentar apenas os resultados finais desta análise aconselhando ao leitor a referência [25] para maiores detalhes.

Para todos os limites de interesse o termo de atenuação de interferência pode ser aproximado por

$$\exp - \frac{q_0^2}{8\sigma^2} \frac{\alpha I_R(\theta)}{Q(\theta)} \approx \exp -\Gamma t \quad , \quad (4b.12)$$

onde a constante de relaxação de interferência, Γ , é dada por

$$\Gamma = \begin{cases} \text{altas temperaturas } (\kappa \ll 1) & \left\{ \begin{array}{l} \frac{2NkT}{\hbar\omega_0} \gamma \text{ se } \gamma \ll \omega_0 \\ \frac{2NkT}{\hbar\omega_0} \frac{\omega_0^2}{2\gamma} \text{ se } \gamma \gg \omega_0 \end{array} \right. \\ \text{baixas temperaturas } (\kappa \gg 1) & \left\{ \begin{array}{l} N \gamma \text{ se } \gamma \ll \omega_0 \\ N \frac{\omega_0^2}{2\gamma} \text{ se } \gamma \gg \omega_0 \end{array} \right. \end{cases}$$

o que nos mostra que Γ é sempre dado pela constante de relaxação do pacote (γ se $\gamma \ll \omega_0$ e $\omega_0^2/2\gamma$ se $\gamma \gg \omega_0$) multiplicada por uma função da temperatura (N se $kT \ll \hbar\omega_0$ e $2NkT/\hbar\omega_0$ se $kT \gg \hbar\omega_0$). Como estamos tratando o caso $N \gg 1$ vemos que o tempo necessário para a destruição do termo de interferência é muito menor que o tempo gasto pelos pacotes

para atingir a situação de equilíbrio. Dependendo da preparação do estado inicial do oscilador, vemos que este tempo pode, inclusive, ser bem menor que o período de oscilação natural do sistema. Desta forma os dois pacotes se comportariam como duas distribuições clássicas em movimento harmônico amortecido. A introdução do meio dissipativo serviu para destruir o efeito quântico em uma escala de tempo bem curta tornando o sistema "mais clássico".

A interpretação física deste fenômeno é bem simples. Vamos considerar um oscilador harmônico, preparado como uma superposição de dois pacotes centrados na origem e em um ponto z , fracamente acoplado a um banho de osciladores a $T = 0$.

O estado inicial do sistema composto pode ser aproximado por

$$|\phi_1\rangle \approx \left\{ |\psi_0\rangle + |\psi_z\rangle \right\} \otimes |0\rangle \quad , \quad (4b.15)$$

onde $|0\rangle$ é o estado fundamental do banho de osciladores e $|\psi_0\rangle$ e $|\psi_z\rangle$ os dois pacotes do oscilador de interesse. Vamos ainda assumir que $|\psi_0\rangle$ seja o estado fundamental do oscilador quando desacoplado e que $|\psi_z\rangle$ contenha um número médio N de quanta de energia.

Depois de decorrido um tempo τ (tempo de relaxação do sistema de interesse) o sistema composto está no estado final

$$|\phi_f\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |N\rangle \quad , \quad (4b.16)$$

onde $|N\rangle$ é o estado do reservatório que contém N quanta de energia $\hbar\omega_0$.

Vamos, agora, investigar o estado do sistema composto após o oscilador ter emitido o equivalente a um quantum de energia $\hbar\omega_0$ para o reservatório. Como a emissão de N quanta de energia dá-se em τ , a emissão de um único quantum dar-se-á em τ/N . Por outro lado, como a hamiltoniana de interação envolve, explicitamente, a coordenada do oscilador, o estado do sistema em τ/N pode ser aproximado por

$$|\phi_1\rangle \approx |\tilde{\psi}_z\rangle \otimes |1\rangle + |\tilde{\psi}_0\rangle \otimes |0\rangle \quad , \quad (4b.17)$$

ou seja, a forma da hamiltoniana de interação faz com que estados do

oscilador centrados em posições distintas se correlacionem com diferentes estados do reservatório. Usando então a ortogonalidade entre $|0\rangle$ e $|1\rangle$ podemos escrever o operador densidade reduzido do oscilador como

$$\tilde{\rho} \equiv \text{tr}_R |\phi_1\rangle\langle\phi_1| = |\tilde{\psi}_z\rangle\langle\tilde{\psi}_z| + |\tilde{\psi}_0\rangle\langle\tilde{\psi}_0| \quad , \quad (4b.18)$$

que é uma mistura estatística na representação de coordenadas. Portanto, os termos responsáveis pela interferência entre os dois pacotes decaem em um intervalo de tempo da ordem de τ/N , de acordo com (4b.14) que foi obtida sem qualquer hipótese sobre a intensidade do acoplamento com o banho.

Um raciocínio bem semelhante pode ser usado a temperatura finita. A única diferença é que, neste caso, devemos considerar as transições induzidas pelo reservatório como função da temperatura. Tentemos entender este mecanismo de uma forma bem simples.

Como vimos anteriormente, a perda (em média) de um quantum de energia é suficiente para que haja a destruição da interferência entre os dois pacotes. Por outro lado, sabemos que tanto $|\tilde{\psi}_z\rangle$, que evolui de $|\psi_z\rangle$ em τ/N , quanto o próprio $|\psi_z\rangle$ estão centrados em posições $\tilde{z}$ e z , respectivamente, e, portanto, não são auto estados de energia do oscilador. Todavia, como estamos apenas procurando entender o mecanismo que nos leva a (4b.13), vamos assumir que na expansão de $|\psi_z\rangle$ ($|\tilde{\psi}_z\rangle$) em auto estados de energia predominem as componentes de energia E_1 (E_2) e que $E_1 - E_2 \cong \hbar\omega_0$. A evolução temporal do número de ocupação destes dois estados é dada pelo sistema [26]

$$\begin{aligned} \dot{n}_1 &= -An_1 - B U(\omega_0)(n_1 - n_2) \\ \dot{n}_2 &= An_1 + B U(\omega_0)(n_1 - n_2) \end{aligned} \quad , \quad (4b.19)$$

onde, obviamente, desprezamos a influência dos demais estados (E_1) na escala de tempo em que estamos interessados. O fator A é da ordem de $(\tau/N)^{-1}$ (taxa de emissão espontânea de 1 quantum de energia a $T = 0$) enquanto que

$$U(\omega_0) = \frac{A}{B} \left(\frac{1}{\exp \frac{\hbar \omega_0}{kT} - 1} \right) = \frac{A}{B} n(\omega_0) \quad (4b.20)$$

A solução de (4b.19) é simples e resulta em

$$n_1 - n_2 \propto \exp -[2n(\omega_0) + 1]At \quad (4b.21)$$

e, consequentemente, o tempo de destruição de interferência reduz-se a

$$\tau_d \propto \frac{1}{2n(\omega_0) + 1} \tau \quad (4b.22)$$

que no limite de altas temperaturas pode ser aproximado por

$$\tau_d \approx \frac{\hbar \omega_0}{2NkT} \tau \quad (4b.23)$$

de acordo com o resultado obtido em (4b.13).

Vimos, então, que a rápida destruição da interferência entre pacotes de onda em um meio dissipativo é consequência do acoplamento do sistema com seu reservatório que faz com que pacotes centrados em posições distintas possam se correlacionar com estados mutuamente ortogonais do reservatório, causando, assim, a relaxação dos termos não diagonais do operador densidade reduzido do sistema. A temperatura finita, este processo é acelerado devido às transições induzidas pelo reservatório.

Obviamente, as aproximações e hipóteses usadas nos últimos parágrafos não são, de forma alguma, rigorosas. Nossa intenção foi apenas entender com argumentos simples os resultados (4b.13) e (4b.14) que, por sua vez, surgem de um cálculo bem mais cuidadoso.

c) Tunelamento de uma Partícula Browniana (decaimento)

Nesta seção, pretendemos deduzir uma expressão que nos permita calcular a taxa de decaimento (por tunelamento) de uma partícula Browniana sujeita ao potencial

$$V(q) = \frac{1}{2} M \omega_o^2 q^2 - \lambda q^3 \quad (\lambda > 0) \quad (4c.1)$$

quando a partícula encontra-se, inicialmente, no mínimo local, $q = 0$, deste potencial. Evidentemente, precisamos definir com mais precisão o problema que vamos atacar, devido às inúmeras questões relativas a tunelamento que podem ser levantadas neste mesmo problema. Nosso interesse particular será responder às seguintes perguntas:

- i) Considerando que a partícula browniana encontre-se em equilíbrio com seu reservatório a $T = 0$ na posição metaestável $q = 0$, qual é a probabilidade dela deixar esta posição via tunelamento quântico?
- ii) Será possível descrever a taxa de tunelamento apenas em função das constantes fenomenológicas da equação de movimento clássica?

A fim de estabelecer um critério de comparação das nossas futuras expressões com outras já conhecidas, vamos rever a fórmula de tunelamento de uma partícula no mesmo potencial quando $\eta = 0$.

No apêndice III, introduzimos um método para abordar este problema via integrais funcionais. Apesar do método ser um tanto sofisticado para o caso não dissipativo, ele será de grande utilidade quando aplicado para $\eta \neq 0$.

O ponto central do nosso cálculo é a fórmula A(III.34) que nos dá diretamente a taxa de tunelamento por unidade de tempo,

$$\Gamma_o = \left(\frac{B_o}{2\pi m \hbar} \right)^{1/2} \left| \frac{\det(-m\partial_t^2 + m\omega_o^2)}{\det'(-m\partial_t^2 + V''(q_c^{(0)}))} \right|^{1/2} e^{-B_o/\hbar}, \quad (4c.2)$$

onde B_o é a ação da "bounce" que também foi introduzida no apêndice III. Como vimos, esta é solução da equação (AIII.10), que pode ser facilmente integrada com as condições de contorno $q_c^{(0)}(-\infty) = q_c^{(0)}(\infty) = 0$. (ver eq. (4c.3) abaixo).

Multiplicando a (AIII.10) por $\dot{q}_c$ temos:

$$\frac{1}{2} M \dot{q}_c^{(0)2} - V(q_c^{(0)}) = 0, \quad (4c.3)$$

onde $V(q)$ é o potencial (4c.1). Integrando (4c.3) temos

$$q_c^{(0)}(\tau) = \frac{M\omega_o^2}{2} \operatorname{sech}^2 \frac{\omega_o \tau}{2} \quad , \quad (4c.4)$$

e, portanto,

$$B_o = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} M \dot{q}_c^2 + V(q_c) \right\} d\tau = \frac{36}{5} \frac{V_o}{\omega_o} \quad , \quad (4c.5)$$

onde V_o é a altura da barreira de potencial (ver figura 4),

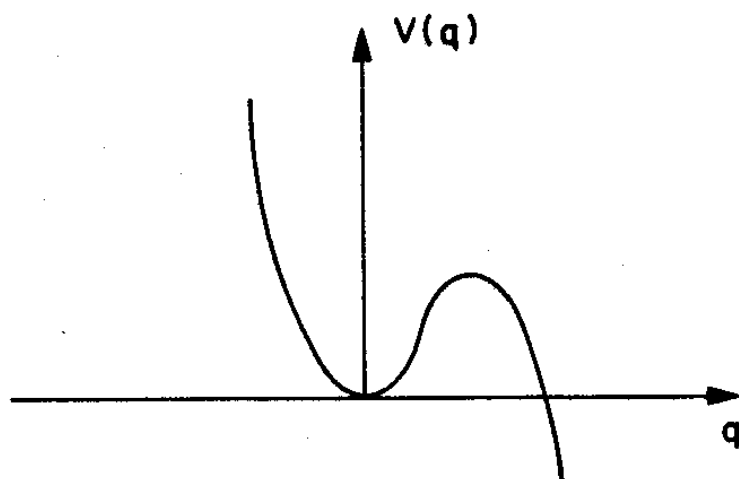


Fig. 4: O potencial (4c.1)

que em termos dos demais parâmetros de $V(q)$ escreve-se

$$V_o = \frac{M^3 \omega_o^6}{54\lambda} \quad (4c.6)$$

Computando-se os demais termos de (4c.2) podemos escrever Γ_o como

$$\Gamma_o = A_o \exp - \frac{36}{5} \frac{V_o}{\hbar \omega_o} \quad , \quad (4c.7)$$

onde

$$A_0 = 6\omega_0 \sqrt{\frac{6}{\pi} \frac{V_0}{\hbar\omega_0}} \quad (4c.8)$$

que, como era de se esperar, coincide com a expressão de Γ calculada na aproximação WKB. Apesar de não termos explicitado o cálculo da razão dos determinantes em (4c.2), este pode ser encontrado em [28].

No caso $\eta \neq 0$ o ponto de partida para a obtenção de Γ é muito semelhante ao que usamos no apêndice III. Consideremos o operador densidade do sistema composto em equilíbrio a uma dada temperatura $(k\beta)^{-1}$. De forma análoga a AIII.7 (apêndice III) temos

$$\rho_{eq}(x, \vec{R}; y, \vec{Q}, \beta) = \sum_n \psi_n(x, \vec{R}) \psi_n^*(y, \vec{Q}) \exp -\beta E_n \quad (4c.9)$$

O operador densidade reduzido da partícula é, então,

$$\tilde{\rho}_{eq}(x, y, \beta) = \int d\vec{R} \rho_{eq}(x\vec{R}; y\vec{R}) = \int d\vec{R} \sum_n \psi_n(x, \vec{R}) \psi_n^*(y, \vec{R}) \exp -\beta E_n \quad (4c.10)$$

ou ainda, usando a representação de integrais funcionais temos

$$\tilde{\rho}_{eq}(x, y, \beta) = \int d\vec{R} \langle x\vec{R} | e^{-\beta H} | y\vec{R} \rangle = \int d\vec{R} \int_{y, \vec{R}}^{x, \vec{R}} Dq(\tau') D\vec{R}(\tau') \exp -\frac{S_E}{\hbar}[q(\tau'), \vec{R}(\tau')], \quad (4c.11)$$

onde H é a hamiltoniana do sistema composto e S_E a ação Euclídeana correspondente. Usando exatamente o mesmo tipo de argumentação que a do início do apêndice III, podemos calcular a energia do estado metaestável do sistema composto tomando o limite quando $\beta \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$) de (4c.10) quando $x = y = 0$. Definindo $\tau = \hbar\beta$ temos

$$\int d\vec{R} |\psi_0(0, \vec{R})|^2 e^{-\tau E_0/\hbar} \approx \int d\vec{R} \int_{0, \vec{R}}^{0, \vec{R}} Dq(\tau') D\vec{R}(\tau') \exp -\frac{S_E}{\hbar}[q(\tau'), \vec{R}(\tau')] \quad (4c.12)$$

Por outro lado, o traço da integral funcional em $\vec{R}(\tau')$ em (4c.12) já foi tomado na seção 3c e o resultado final apresentado nas fórmulas (3c.14-16); aqui reescrevemos por mera conveniência:

$$\tilde{\rho}(0,0,\beta) = \tilde{\rho}_0(\beta) \int_0^0 Dq(\tau') \exp - \frac{S_{\text{eff}}}{\hbar}[q(\tau')] \quad , \quad (4c.13)$$

onde

$$S_{\text{eff}}[q(\tau')] = \int_0^\tau \left\{ \frac{1}{2} M \dot{q}^2 + V(q) \right\} d\tau' + \frac{\eta}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \int_0^\tau d\tau' \frac{\{q(\tau') - q(\tau'')\}^2}{(\tau' - \tau'')^2} \quad (4c.14)$$

Temos, então, um problema análogo ao que tratamos no apêndice III, com a diferença que a ação no expoente do integrando contém uma influência efetiva do banho de osciladores no estado de equilíbrio da partícula. Outro ponto em variância com o exemplo do apêndice III reside na interpretação da parte imaginária da energia em (4c.12). No presente exemplo, E_0 é a energia do estado metaestável do sistema composto partícula-reservatório. Aqui também podemos mostrar (ver abaixo) que existem auto valores nulo e negativo na diagonalização da 2ª derivada funcional da ação e, portanto, $\text{Im}E_0 \neq 0$. Como devemos interpretar esta quantidade?

O sistema composto partícula-reservatório está sujeito a um potencial N+1 dimensional (3a.20) que possui além do mínimo metaestável em $(q, \vec{R}) = (0,0)$, um ponto de sela em $(q, \vec{R}) = \left(\frac{M\omega_0^2}{3\lambda}, \dots, -\frac{C_k}{3} \frac{M}{m_k} \frac{\omega_0^2}{\omega_k}, \dots \right)$. Como estamos tratando o sistema composto a $T = 0$, a única interpretação cabível para $\text{Im}E_0$ é que esta quantidade seja proporcional à taxa de tunelamento deste sistema N+1 dimensional para fora da configuração (0,0). Por outro lado, como a partícula de interesse é a única das N+1 capaz de tunelar, vamos associar $\text{Im}E_0$ à taxa de tunelamento desta partícula sujeita à influência do banho de N osciladores. Desta forma, o cálculo de $\text{Im}E_0$ responde (ou deve responder) às questões originais desta seção.

Nosso próximo passo é, então, mostrar que apesar de termos que

tratar com uma ação efetiva bem mais complexa que a do caso $\eta = 0$, nosso problema é exatamente o mesmo que resolvemos no apêndice III.

Quando $\tau \rightarrow \infty$ (ou seja, $T \rightarrow 0$), a derivada funcional da ação $S_{\text{eff}}[q(\tau')]$ em $q_c(\tau')$ é dada por

$$\left. \frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta q} \right|_{q_c} = M\ddot{q}_c - \frac{\partial V}{\partial q_c} - \frac{\eta}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau'' \frac{[q_c(\tau') - q_c(\tau'')]}{(\tau' - \tau'')^2} = 0, \quad (4c.15)$$

onde a última igualdade segue do fato de estarmos trabalhando com a aproximação de fase estacionária. Esta equação de movimento, assim como no caso $\eta = 0$, é invariante por inversão temporal ($\tau' \rightarrow -\tau'$) e por translação da origem do tempo τ' ($\tau' \rightarrow \tau' + \tau_0$), o que nos permite mostrar a existência de uma solução do tipo "bounce" quando $\tau \rightarrow \infty$. Multiplicando a (4c.15) por $\dot{q}_c$, temos

$$\frac{d}{d\tau'} \left[\frac{1}{2} M \dot{q}_c^2 - V(q_c) \right] = \dot{q}_c(\tau') \frac{\eta}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau'' \frac{[q_c(\tau') - q_c(\tau'')]}{(\tau' - \tau'')^2}, \quad (4c.16)$$

que é uma fórmula explícita da variação da "energia euclídeana" com o tempo. Desta forma, se tomarmos $q_c(-\infty) = 0^+$ (topo do potencial da fig. A2), a solução $q_c(\tau')$ começa a aumentar sua "energia total" à medida que $\dot{q}_c(\tau')$ aumenta, até o ponto de retorno $\bar{q}$ em $\bar{\tau} = 0$. A partir deste instante, $\dot{q}_c(\tau') < 0$, e consequentemente toda a "energia" ganha de $q_c = 0$ a $q_c = \bar{q}$ será dissipada na mesma taxa em que foi ganha, o que implica em $q_c(+\infty) = 0$. Portanto, quando $\tau \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$), a (4c.14) admite uma solução do tipo "bounce".

Uma vez que o leitor tenha se convencido com esta argumentação, o mesmo tipo de análise que fizemos no apêndice II segue trivialmente. Por exemplo, a fim de estudar a estabilidade de $q_c(\tau')$ devemos analisar a 2ª variação de $S_{\text{eff}}[q_c]$, que é o mesmo que estudar o seguinte problema de autovalores

$$\hat{D} q(\tau') = \lambda q(\tau') \quad , \quad (4c.17)$$

onde o operador diferencial $\hat{D}$ atuando em $q(\tau')$ é dado por

$$\hat{D} q(\tau') = -M \frac{d^2 q(\tau')}{d\tau'^2} + V''(q_c) q(\tau') + \frac{\eta}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q(\tau') - q(\tau'')}{(\tau' - \tau'')^2} d\tau'' \quad (4c.18)$$

Derivando a (4c.15) com relação a τ' pode-se também mostrar que $\dot{q}_c$ é uma auto-função de (4c.18) com auto-valor nulo. Por $q_c(\tau')$ ser uma função par (e bem comportada sobre toda a reta) $\dot{q}_c(0) = 0$ e, portanto, a solução de $\lambda = 0$ possui um zero para $\tau' \neq \pm \infty$. Podemos, então, concluir que existe uma auto-função $q_o(\tau')$ com $\lambda < 0$.

Devido a esta análise podemos escrever diretamente o resultado correspondente ao tunelamento da partícula acoplada a um reservatório;

$$\Gamma = \left(\frac{\|\dot{q}_c\|}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} \left| \frac{\det \hat{D}_o}{\det' \hat{D}} \right|^{1/2} \exp \frac{B}{\hbar} \quad (4c.19)$$

onde $\|\dot{q}_c\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \dot{q}_c^2(\tau') d\tau'$ (note que, em geral, $\|\dot{q}_c\|^2 \neq \frac{B}{M}$ só valendo a igualdade quando a "energia" se conserva),

$$B \equiv S_{\text{eff}}[q_c] = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} M \dot{q}_c^2 + V(q_c) \right\} d\tau' + \frac{\eta}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_{-\infty}^{\infty} d\tau'' \frac{(q_c(\tau') - q_c(\tau''))^2}{(\tau' - \tau'')^2} \quad (4c.20)$$

e $\hat{D}_o$ é o mesmo operador que $\hat{D}$, substituindo-se $V''(q_c)$ por $M\omega_o^2$.

Antes mesmo de tentarmos resolver a (4c.15) para, então, calcular B em (4c.20), uma importante conclusão qualitativa pode ser imediatamente tirada desta última expressão. Devido a B ser escrita como a soma de B_o (ver (4c.5)) com um termo puramente quadrático, e, portanto, positivo definido, a correção dependente de η irá sempre aumentar B , o que se traduz no decréscimo de Γ com relação a Γ_o . Ou seja, já podemos concluir que a dissipação tende a reduzir a taxa de tunelamento da partícula browniana. Neste ponto, cabe enfatizar um fato muito importante; a dissipação, ou melhor, o acoplamento a um reservatório, nem sempre tende a inibir o tunelamento. A forma (4c.20) é resultante de um modelo muito específico de interação partícula-banho.

Na realidade, existem outras formas de acoplamento que tendem a assistir o processo de tunelamento mesmo que seu efeito na equação de movimento clássica da partícula seja o de uma força dissipativa. Dá-se o nome de "dissipação anômala" [23] a este caso particular. Apesar de extremamente interessantes, estes exemplos não são o objetivo de nosso curso, onde estamos tratando apenas do modelo de acoplamento para o movimento browniano (dissipação ôhmica).

Vamos inicialmente estudar a correção a B_0 em função de η . Apesar deste problema ser de extrema complexidade, dois limites particularmente importantes podem ser resolvidos analiticamente, a saber, os limites $\eta \rightarrow 0$ e $\eta \rightarrow \infty$.

No caso $\eta \rightarrow 0$, suponhamos que a solução $q_c(\tau')$ seja do tipo

$$q_c(\tau') = q_c^{(0)}(\tau') + \eta q_c^{(1)}(\tau') \quad , \quad (4c.21)$$

onde $q_c^{(0)}$ é a solução da equação quando $\eta = 0$ (4c.4). Ao substituirmos (4c.21) em (4c.20) vemos que para obter correções $O(\eta)$ à ação B devemos apenas computar a integral dupla em (4c.20) para $q_c(\tau') = q_c^{(0)}(\tau')$. Os demais termos serão $O(\eta^2)$. A integral acima mencionada pode ser resolvida em duas etapas. Em primeiro lugar, definimos novas variáveis de integração $u = \tau' - \tau''$ e $v = (\tau' + \tau'')/2$, o que nos permite reduzi-la à seguinte integral

$$\Delta B = B - B_0 = \frac{2\eta}{3\pi} q^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2} \left\{ \frac{\sinh^2 x - 3x \coth x + 3}{\sinh^2 x} \right\} \quad , \quad (4c.22)$$

que pode ser resolvida por resíduos resultando em

$$\Delta B = \frac{45}{\pi^3} \zeta(3) \alpha B_0 = \frac{12}{\pi^3} \zeta(3) \eta q^{-2} \quad (4c.23)$$

onde $\alpha = \eta/2M\omega_0$ e $\zeta(3) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3}$.

De forma a investigar o limite $\eta \rightarrow \infty$, vamos escrever a equação de movimento (4c.15) em função da transformada de Fourier $q(\omega)$ de $q(\tau')$. Usando que

$$q(\tau') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} q(\omega) e^{-i\omega\tau'} d\omega \quad (4c.24)$$

temos

$$\left\{ M\omega^2 + \eta|\omega| + M\omega_0^2 \right\} q(\omega) - \frac{3\lambda}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} q(\omega - \omega') q(\omega') d\omega' = 0 \quad (4c.25)$$

Como estamos particularmente interessados em soluções super-amortecidas esperamos que a contribuição principal em $q(\omega)$ seja devida a frequências baixas e, portanto, devemos desprezar o termo em ω^2 em (4c.25). Assim, assumindo que $q_c(\omega)$ seja da forma

$$q_c(\omega) = A e^{-\kappa|\omega|} \quad (4c.26)$$

temos

$$\eta|\omega| A e^{-\kappa|\omega|} + M\omega_0^2 A e^{-\kappa|\omega|} - \frac{3\lambda A^2}{2\pi} \left| \frac{1}{\kappa} + |\omega| \right| e^{-\kappa|\omega|} = 0 \quad (4c.27)$$

o que implica em

$$A = \frac{2\pi\eta}{3\lambda} \quad e \quad \kappa = \frac{2\alpha}{\omega_0} \quad (4c.28)$$

A expressão para κ em (4c.28) realmente nos mostra que a contribuição principal em $q(\omega)$ vem de frequências $\omega \ll \omega_0$. Já que $\alpha \gg 1$, justificando de forma auto-consistente o fato de termos ignorado o termo $M\omega^2$ em (4c.25).

Substituindo a (4c.26) em (4c.24), usando a (4c.28) e efetuando a integração, chega-se a

$$q_c(\tau') = \frac{4}{3} \bar{q} \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega_0^2 \tau'}{2\gamma} \right)^2} \quad (4c.29)$$

A ação correspondente a $q_c(\tau')$ é, então,

$$B = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} \left(M\omega^2 + \eta|\omega| + M\omega_0^2 \right) q_c^2(\omega) + \frac{\lambda}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' q_c(\omega) q_c(\omega - \omega') q_c(\omega') \right\} d\omega =$$

$$= \frac{2\pi}{9} \eta \omega_0^{-2} + O\left(\frac{\omega_0}{\gamma}\right) \quad (4c.30)$$

Concluimos, então, que a dissipação sempre aumenta a ação da "bounce", o que implica na diminuição de Γ . Mais ainda, a correção que surge devida ao acoplamento com o banho, pode ser escrita em função da dissipação fenomenológica η . Apesar de ainda termos que analisar o pré-fator, podemos seguramente afirmar que há um decréscimo em Γ já que a exponencial dá a contribuição principal para a taxa de tunelamento.

Para valores intermediários de η , não é possível obtermos uma solução analítica para (4c.25). Entretanto, argumentos de cálculo variacional podem ser usados caso desejemos encontrar limites superiores e inferiores para $B(\eta)$. Apesar de não apresentar os referidos métodos neste trabalho, gostaríamos de sugerir a referência [11] para maiores detalhes do que foi acima mencionado.

Outro ponto que não será abordado nesta seção é o decaimento com dissipação a temperaturas finitas. Neste caso, três abordagens básicas são usadas na generalização do que aqui vimos. A primeira delas é muito semelhante ao que fizemos para temperatura zero com a diferença de atribuímos à parte imaginária da energia livre, F , uma interpretação de constante de decaimento. Assim a expressão para Γ deve ser generalizada para

$$\Gamma = \frac{2\text{Im}F}{\hbar} \quad (4c.31)$$

onde a expressão para F calcula-se exatamente como para E_0 com a diferença de que os limites de integração em (4c.14) são todos mantidos finitos [29,30,31].

A segunda abordagem é uma generalização do caso $T = 0$ onde o autor faz uso explícito das funções de onda WKB no potencial metaestável [32], enquanto que a terceira abordagem [33] é uma aplicação direta dos

métodos de Feynman e Vernon [19,20].

Em qualquer um dos três casos as soluções analíticas não são, em geral, acessíveis exceto nos limites de temperaturas muito baixas, onde computa-se uma correção proporcional a T^2 ao resultado de $T = 0$, ou no limite de altas temperaturas onde o resultado clássico de Kramers [34] é reobtido.

O teste experimental da validade desta teoria foi feito inicialmente [35] medindo-se a probabilidade de se obter uma voltagem finita entre os terminais de uma junção Josephson sujeita a uma fonte de corrente. Antes de se atingir a corrente crítica I_c existe uma probabilidade finita de geração de voltagem evidenciando, então, a possibilidade de haver tunelamento de linhas de fluxo pela junção. Apesar desta experiência não ser exatamente a proposta na introdução, a física envolvida é basicamente a mesma. Experiências mais recentes indicam que nos SQUIDS os resultados são os mesmos em função dos parâmetros do circuito supercondutor.

As taxas de tunelamento medidas a temperaturas ultra-baixas (≈ 5 mK) e sua extrapolação para $T = 0$ concordam plenamente com as previsões teóricas no que diz respeito à contribuição dominante em Γ , ou seja, sua parte exponencial. Quando ao pré-fator, o problema ainda encontra-se em aberto.

V. Conclusões

Neste curso vimos que é possível descrever a dinâmica quântica de uma "partícula browniana" sem precisar recorrer a novos métodos de quantização. Levando em conta explicitamente o acoplamento da partícula com um reservatório convenientemente escolhido fomos capazes de descrever inúmeros efeitos puramente quânticos desta partícula e, consequentemente, estudar a influência da dissipação nestes processos.

A conclusão imediata que trivialmente chegamos é que a dissipação da forma $\eta \dot{q}$ na equação clássica de movimento influi de forma a destruir efeitos quânticos tais como interferência ou tunelamento. E mais, as expressões matemáticas que refletem esta influência podem ser univocamente descritas em função da constante de dissipação η . Portanto, poderíamos dizer que a dissipação força o sistema a ser "mais clássico".

Apesar de termos usado um modelo extremamente simples para o reservatório, podemos argumentar que, por mais complexo que possa ser este reservatório, sua interação efetiva com a partícula externa pode ser descrita por (3a.1-3). Um argumento bem geral nesta direção pode ser encontrado em [11] enquanto que exemplos específicos de reservatórios não harmônicos podem ser encontrados em [36,37]. Entretanto, em todos os casos de interesse, a parte relevante da lagrangeana do sistema composto quase sempre reduz-se a (3a.1-3) com a função espectral $J(\omega)$ dada por (3a.10-11). Convém notar que o comportamento linear de $J(\omega)$ para baixas frequências é fundamental para que possamos obter um termo dissipativo da forma $\eta\dot{q}$.

Obviamente, o estudo da dinâmica quântica de sistemas não-isolados ainda é um campo extremamente fértil para futuras pesquisas. A abordagem aqui apresentada é apenas uma direção (que mostrou-se ser suficientemente confiável) a ser possivelmente tomada na investigação de sistemas mais complexos.

Gostaria de finalizar agradecendo ao Prof. L.E.M.C. de Oliveira por inúmeras sugestões feitas à redação deste manuscrito e à Sra. Rosa Yukiko Kawaguchi pelo trabalho de datilografia.

APÊNDICE I

Neste apêndice, nossa intenção é introduzir a representação de integrais funcionais para o propagador $K(x, t; x', 0)$. Como sabemos,

$$K(x, t; x', 0) = \langle x | e^{-iHt/\hbar} | x' \rangle \quad , \quad (AI.1)$$

onde $H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$.

Se agora subdividirmos o intervalo de tempo $[0, t]$ em $[0, t_1] \cup [t_1, t_2] \cup \dots \cup [t_{N-1}, t]$ podemos escrever (AI.1) como

$$K(x, t; x', 0) = \langle x | e^{-iH(t-t_{N-1})/\hbar} \dots e^{-iH(t_k-t_{k-1})/\hbar} \dots e^{-iHt_1/\hbar} | x' \rangle \quad , \quad (AI.2)$$

onde temos N exponenciais. Se introduzirmos a relação de completeza

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_k |x_k\rangle \langle x_k| = I \quad (1 \leq k \leq N-1) \text{ entre cada exponencial temos}$$

$$K(x, t; x', 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_{N-1} \langle x | e^{-iH(t-t_{N-1})/\hbar} | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | \dots \dots | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-iHt_1/\hbar} | x' \rangle \quad . \quad (AI.3)$$

Fazendo o comprimento ϵ de cada um dos intervalos $[t_k, t_{k-1}]$ tender a zero ($N \rightarrow \infty$), podemos escrever para o k -ésimo intervalo,

$$K(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) \approx \langle x_k | 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} H | x_{k-1} \rangle \quad , \quad (AI.4)$$

com $x_N = x$ e $x_0 = x'$, ou ainda

$$K(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) \approx \langle x_k | x_{k-1} \rangle - \frac{i\epsilon}{\hbar} \langle x_k | \frac{p^2}{2m} | x_{k-1} \rangle - \frac{i\epsilon}{\hbar} \langle x_k | V(q) | x_{k-1} \rangle \quad . \quad (AI.5)$$

Usando, então, que $\int dp_k |p_k\rangle \langle p_k| = I$ temos

$$K(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) \approx \int dp_k \langle x_k | p_k \rangle \langle p_k | x_{k-1} \rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \int dp_k \frac{p_k^2}{2m} \langle x_k | p_k \rangle \langle p_k | x_{k-1} \rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \int dp_k V(x_k) \langle x_k | p_k \rangle \langle p_k | x_{k-1} \rangle \quad (A1.6)$$

Mas, como

$$\langle x_k | p_k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_k x_k / \hbar} \quad (A1.7)$$

a equação (A1.6) pode ser reescrita como

$$K(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) \approx \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_k \exp \frac{ip_k}{\hbar} (x_k - x_{k-1}) \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{p_k^2}{2m} + V(x_k) \right) \right) \quad (A1.8)$$

que quando tem seu integrando exponenciado nos dá

$$K(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) \approx \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_k \exp \frac{ip_k}{\hbar} (x_k - x_{k-1}) \exp - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{p_k^2}{2m} + V(x_k) \right) \quad (A1.9)$$

A integral em p_k pode ser resolvida trivialmente, tendo como resultado

$$K(x_k, t_k; x_{k-1}, t_{k-1}) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \exp \frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{(x_k - x_{k-1})^2}{\varepsilon} - V(x_k) \right) \quad (A1.10)$$

Substituindo (A1.10) em (A1.3), temos finalmente

$$K(x, t; x', 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_{N-1} \left\{ \prod_{k=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \right\} \exp \sum_k \frac{i\epsilon}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \frac{(x_k - x_{k-1})^2}{\epsilon^2} - V(x_k) \right) \quad (A1.11)$$

Tomando o limite $\epsilon \rightarrow 0$ e lembrando que $\epsilon = \Delta t_k = t_k - t_{k-1}$ podemos escrever (A1.11) da seguinte forma simbólica:

$$K(x, t; x', 0) = \prod_{t'=0}^t \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx(t')}{N} \exp \frac{i}{\hbar} S[x(t')] \quad (A1.12)$$

onde $S[x(t')] = \int_0^t \left\{ \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right\} dt'$, ou ainda

$$K(x, t; x', 0) = \int_{x'}^x Dx(t') \exp \frac{i}{\hbar} S[x(t')] \quad (A1.13)$$

que já tem em $Dx(t')$ o fator de normalização N de (A1.12). Portanto, conseguimos escrever o propagador como uma soma das exponenciais das ações sobre cada trajetória ligando os pontos x' e x . Esta é a famosa representação de "integrals de trajetórias" que é devida a Feynman [19].

Nosso próximo passo, será resolver dois exemplos específicos; a partícula livre e a Lagrangeana quadrática. [19]

1) Partícula livre:

Neste caso, $V(q) = 0$, o que implica em

$$K(x, t; x', 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_{N-1} \prod_{k=1}^N \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar}} \exp \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} (x_k - x_{k-1})^2 \quad (A1.14)$$

Usando o resultado conhecido de integrals Gaussianas,

$$\int_{-\infty}^{\infty} du \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-a(x-u)^2} \sqrt{\frac{b}{\pi}} e^{-b(u-y)^2} = \sqrt{\frac{ab}{\pi(a+b)}} e^{-\frac{ab}{a+b}(x-y)^2}, \quad (\text{AI.15})$$

temos, por exemplo,

$$\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \int dx_1 e^{\frac{im}{2\hbar \epsilon}(x_2 - x_1)^2} e^{\frac{im}{2\hbar \epsilon}(x_1 - x')^2} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (2\epsilon)}} e^{\frac{im}{2\hbar (2\epsilon)}(x_2 - x')^2} \quad (\text{AI.16})$$

Efetuada a integral em x_3 e assim sucessivamente até x_N é simples mostrar que

$$K(x, t; x', 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(x-x')^2}{t}} \quad (\text{AI.17})$$

ii) Lagrangeana quadrática:

Consideremos um sistema cuja dinâmica seja regida por uma lagrangeana da forma

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + b(t) \dot{x} - \frac{1}{2} c(t) x^2 - e(t) x \quad (\text{AI.18})$$

Queremos computar o propagador quântico deste sistema através da integral funcional

$$K(x, t; x', 0) = \int_{x'}^x Dx(t') \exp \frac{i}{\hbar} S[x(t')] \quad (\text{AI.19})$$

Para tal, vamos fazer uma mudança de variáveis

$$y(t') = x(t') - \bar{x}(t') \quad (\text{AI.20})$$

onde $\bar{x}(t')$ é a solução da equação de Euler-Lagrange de (AI.18):

$$m\ddot{\bar{x}} + (c+b)\bar{x} + e = 0 \quad (\text{AI.21})$$

Substituindo (AI.20) em $S = \int_0^t L dt$, integrando por partes e usando (AI.21), tem-se:

$$K(x, t; x', 0) = e^{i/\hbar \bar{S}(x, x', t)} G(t) \quad (AI.22)$$

onde $\bar{S}(x, x', t)$ é a ação ao longo da trajetória clássica $\bar{x}(t)$ e

$$G(t) = \int_0^t Dy(t') e^{i/\hbar \int_0^t \left\{ \frac{1}{2} m \dot{y}^2 - \frac{1}{2} \tilde{c}(t') y^2 \right\} dt'} \quad ; \quad \tilde{c} = c + b \quad (AI.23)$$

é uma integral sobre trajetórias $y(t')$ tais que $y(t) = y(0) = 0$. Esta integral funcional pode ser resolvida em sua versão discretizada como veremos no que segue.

Com o auxílio de (AI.11) a (AI.23) se reduz a

$$G(t) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0 \\ N\varepsilon = t}} \int \dots \int dy_1 \dots dy_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N/2} \exp \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{m}{2} (y_j - y_{j-1})^2 - \frac{1}{2} \varepsilon \tilde{c}_{j-1} y_{j-1}^2 \right\} \quad (AI.24)$$

onde $\tilde{c}_j = \tilde{c}(t_{j-1})$. Definindo então o vetor

$$\eta = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{N-1} \end{bmatrix} \quad (AI.25)$$

e a matriz

$$\sigma = \frac{m}{2i\hbar} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ 0 & -1 & 2 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix} + \frac{1\epsilon}{2\hbar} \begin{bmatrix} \tilde{c}_1 & & 0 & & \\ & \ddots & & & \\ & & \tilde{c}_{N-1} & & \\ 0 & & & & \end{bmatrix}, \quad (\text{AI.26})$$

pode-se escrever (AI.24) como

$$G(t) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0 \\ N\epsilon = t}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{N/2} \int d^{N-1} \eta \exp -\eta^T \sigma \eta \quad (\text{AI.27})$$

A matriz σ pode ser diagonalizada através de uma transformação de similaridade

$$\sigma = U^+ \sigma_D U, \quad (\text{AI.28})$$

onde U é tal que $U^+ U = I$. Seja $\xi = U\eta$; então,

$$\int d^{N-1} \eta \exp -\eta^T \sigma \eta = \int d^{N-1} \xi \exp -\xi^T \sigma_D \xi = \prod_{\alpha=1}^{N-1} \sqrt{\frac{\pi}{\sigma_\alpha}} = \frac{\pi^{(N-1)/2}}{\sqrt{\det \sigma}}, \quad (\text{AI.29})$$

desde que $\det \sigma \neq 0$.

Substituindo (AI.29) em (AI.27) obtém-se

$$G(t) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0 \\ N\epsilon = t}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar} \right) \frac{1}{\epsilon} \frac{1}{\left(\frac{2i\hbar\epsilon}{m} \right)^{N-1} \det \sigma}^{1/2}, \quad (\text{AI.30})$$

e o nosso problema passa a ser o cálculo de

$$f(t) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \left(\epsilon \left(\frac{2i\hbar\epsilon}{m} \right)^{N-1} \det \sigma \right) \quad (A1.31)$$

que, por sua vez, nos obriga a efetuar o seguinte determinante:

$$\left(\frac{2i\hbar\epsilon}{m} \right)^{N-1} \det \sigma = \det \left\{ \begin{bmatrix} 2-1 & & 0 \\ -1 & 2 & \\ & & \ddots \\ & & 2-1 \\ 0 & & -1 & 2 \end{bmatrix} - \frac{\epsilon^2}{m} \begin{bmatrix} c_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \tilde{c}_{N-1} \end{bmatrix} \right\}$$

$$= \det \tilde{\sigma}_{N-1} = p_{N-1} \quad (A1.32)$$

Usando a expressão de $\tilde{\sigma}_{j+1}$ em menores pode-se mostrar que

$$p_{j+1} = \left(2 - \frac{\epsilon^2}{m} \tilde{c}_{j+1} \right) p_j - p_{j-1} \quad , \quad j = 1, \dots, N-2 \quad (A1.33)$$

onde $p_1 = 2 - \epsilon^2 c_1 / m$ e $p_0 = 1$. Reescrevendo (A1.33) como

$$\frac{p_{j+1} - 2p_j + p_{j-1}}{\epsilon^2} = - \frac{\tilde{c}_{j+1} p_j}{m} \quad (A1.34)$$

e definindo $\varphi(t) = \epsilon p_j$, vemos facilmente que quando $\epsilon \rightarrow 0$ esta equação de diferenças finitas transforma-se em

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = - \frac{\tilde{C}(t) f(t)}{m} \quad (A1.35)$$

com condições iniciais que podem ser obtidas através de

$$\varphi(0) = \epsilon p_0 \rightarrow 0 \quad (A1.36)$$

$$\left. \frac{d\varphi}{dt} \right|_{t=0} = e \left(\frac{p_1 - p_0}{\varepsilon} \right) = 2 - \frac{e^2 c_1}{m} - 1 \rightarrow 1 \quad (\text{AI.37})$$

Consequentemente, a função $f(t)$ definida em (AI.31) é solução de

$$m \frac{d^2 f(t)}{dt^2} + \tilde{c}(t) f(t) = 0 \quad (\text{AI.38})$$

com $f(0) = 0$ e $\frac{df(0)}{dt} = 1$ e, finalmente, podemos escrever o propagador (AI.22) como

$$K(x, t; x', 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar f(t)}} \exp \frac{i}{\hbar} \bar{S}(x, x', t) \quad (\text{AI.39})$$

No caso particular de um oscilador harmônico, $c(t) = m\omega^2$ e, portanto, $f(t)$ é tal que

$$\frac{d^2 f}{dt^2} + \omega^2 f = 0 \quad (\text{AI.40})$$

com as condições iniciais de (AI.38), o que nos leva a

$$f(t) = \frac{\sin \omega t}{\omega} \quad (\text{AI.41})$$

A representação do elemento de matriz $\langle x | \exp - i \frac{Ht}{\hbar} | x' \rangle$ por uma integral funcional (AI.13) pode ser também usada para o operador densidade, $\rho(x, x', \beta)$, do sistema em equilíbrio. Como sabemos,

$$\langle x | \rho | x' \rangle = \langle x | e^{-\beta H} | x' \rangle \quad (\text{AI.42})$$

o que nos permite visualizar o elemento de matriz do operador densidade como sendo o propagador do mesmo sistema para tempos complexos, ou seja,

$$t = -i\beta\hbar \quad (\text{AI.43})$$

Usando, então, a eq. AI.13 e efetuando a mudança de variáveis (AI.43) tem-se

$$\rho(x, x'; \beta) = \int_{x'}^x Dx(\tau) \exp - \frac{1}{\hbar} S_E[x(\tau)] \quad , \quad (\text{AI.44})$$

onde

$$S_E[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} \left\{ \frac{1}{2} m \dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau)) \right\} d\tau \quad (\text{AI.45})$$

é a chamada "ação Euclideana" do sistema.

Finalmente, devemos enfatizar que ambas as representações podem ser generalizadas nas formas (AI.13) e (AI.44,45) para um número arbitrário de componentes e/ou dimensões do sistema.

APÊNDICE II

Ao longo do capítulo 3 do nosso curso mostramos que o operador densidade reduzido de uma partícula em um determinado instante t pode ser escrito como em (3b.8) com $J(x,y,t;x',y',0)$ dado por (3b.31), no caso específico do banho de osciladores. Conforme mencionamos anteriormente, estamos interessados em deduzir uma equação diferencial para $\tilde{\rho}(x,y,t)$ no limite clássico, ou seja, quando a expressão para $J(x,y,t;x',y',0)$ reduz-se àquela dada por (3b.33). Para tal, devemos escrever a evolução de $\tilde{\rho}(x,y,t)$ ao longo de um intervalo de tempo infinitesimal,

$$\tilde{\rho}(x,y,t+\epsilon) = \int dx' dy' J(x,y,t+\epsilon;x',y',t) \tilde{\rho}(x',y',t) \quad (\text{AII.1})$$

onde a função $J(x,y,t,t+\epsilon;x',y',t)$ pode ser aproximada por

$$J(x,y,t+\epsilon;x',y',t) \approx \frac{1}{A^2} \exp - \frac{1}{\hbar} f(x,y,x',y') \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ \int_t^{t+\epsilon} \left(\frac{1}{2} M \dot{x}^2 - V_0(x) \right) dt' - \int_t^{t+\epsilon} \left(\frac{1}{2} M \dot{y}^2 - V_0(y) \right) dt' - \int_t^{t+\epsilon} M \gamma (\dot{x} \dot{y} - y \dot{x}) dt' \right\} \exp - \frac{2M\gamma kT}{\hbar^2} \int_t^{t+\epsilon} (x-y)^2 dt' \quad (\text{AII.2})$$

onde A é uma constante de normalização. Em (AII.2) usamos o fato que qualquer caminho regular num intervalo de tempo infinitesimal pode ser aproximado por uma linha reta e, portanto, a integral funcional sobre caminhos em um intervalo de tempo curto deve ser igual ao integrando multiplicado por uma constante de normalização.

As integrais em (AII.2) serão aproximadas, quando $\epsilon \rightarrow 0$, com o auxílio de

$$\dot{x} \approx \frac{x-x'}{\epsilon}, \quad \dot{y} \approx \frac{y-y'}{\epsilon} \quad \text{e} \quad \int_t^{t+\epsilon} f(x(t')) dt' \approx \epsilon f\left(\frac{x+x'}{2}\right) \quad (\text{AII.3})$$

onde $x = x(t+\epsilon)$, $y = y(t+\epsilon)$, $x' = x(t)$ e $y' = y(t)$. Desta forma temos

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(x, y, t+\epsilon) = & \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\beta_1 d\beta_2}{A^2} \exp \left\{ \frac{1M\beta_1^2}{2\epsilon\hbar} - i \frac{\epsilon V_0}{\hbar} \left(x - \frac{\beta_1}{2} \right) - \frac{1M\beta_2^2}{2\epsilon\hbar} \right. \\ & + i \frac{\epsilon V_0}{\hbar} \left(y - \frac{\beta_2}{2} \right) - i \frac{M\gamma}{\hbar} \left(x - \frac{\beta_1}{2} \right) \beta_2 + i \frac{M\gamma}{\hbar} \left(y - \frac{\beta_2}{2} \right) \beta_1 - i \frac{M\gamma}{\hbar} \left(x - \frac{\beta_1}{2} \right) \beta_1 \\ & + i \frac{M\gamma}{\hbar} \left(y - \frac{\beta_2}{2} \right) \beta_2 - \frac{2M\gamma k T \epsilon}{\hbar^2} (x-y)^2 - \frac{2M\gamma k T \epsilon}{\hbar^2} (x-y)(\beta_1 - \beta_2) \\ & \left. - \frac{M\gamma k T}{\hbar^2} (\beta_1 - \beta_2)^2 \right\} \tilde{\rho}(x - \beta_1, y - \beta_2, t) \quad , \end{aligned} \quad (\text{AII.4})$$

onde $\beta_1 = x - x'$ e $\beta_2 = y - y'$.

Agora, devemos efetuar a integral (AII.4) quando $\epsilon \rightarrow 0$. Neste limite, vemos que o primeiro e terceiro termos do integrando oscilam rapidamente e, portanto, a contribuição principal para a integral é proveniente de regiões onde $\beta_1 \approx \beta_2 \approx (\epsilon\hbar/M)^{1/2}$. Então, definindo novas variáveis $\beta'_1 = \beta_1 - \gamma(x-y)\epsilon$ e $\beta'_2 = \beta_2 + \gamma(x-y)\epsilon$ e expandindo todos os termos do integrando (exceto, é claro, o primeiro e o terceiro) em β'_1 , β'_2 e ϵ até $O(\epsilon)$ temos

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(x, y, t) + \epsilon \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = & \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\beta'_1 d\beta'_2}{A^2} \exp \frac{1}{\hbar} \frac{M\beta_1'^2}{2\epsilon} \exp - \frac{1}{\hbar} \frac{M\beta_2'^2}{2\epsilon} \left[\tilde{\rho}(x, y, t) - \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial x} \beta'_1 \right. \\ & - \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial y} \beta'_2 - \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial x} (x-y)\gamma\epsilon + \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial y} (x-y)\gamma\epsilon + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial x^2} \beta_1'^2 + \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial x \partial y} \beta'_1 \beta'_2 \\ & \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial y^2} \beta_2'^2 - \frac{1\epsilon}{\hbar} V_0(x) \tilde{\rho} + \frac{1\epsilon}{\hbar} V_0(y) \tilde{\rho} - \frac{2M\gamma k T \epsilon}{\hbar} (x-y)^2 \tilde{\rho} \right] \end{aligned} \quad (\text{AII.5})$$

As integrais são extendidas de $-\infty$ a $+\infty$ porque sabemos que sua contribuição principal provém das regiões $\beta_1 \approx \beta_2 \approx (\epsilon\hbar/M)^{1/2}$. Efetuando as integrais temos que:

a) O termo independente de ϵ nos dá a constante de normalização;

$$A^2 = 2\pi\epsilon\hbar/M$$

b) O termo proporcional a ϵ nos fornece a equação desejada

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = & -\frac{\hbar}{2M1} \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2M1} \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial y^2} - \gamma(x-y) \left[\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial y} \right] + \\ & + \frac{[V_o(x) - V_o(y)]}{i\hbar} \tilde{\rho} - \frac{2M\gamma kT}{\hbar^2} (x-y)^2 \tilde{\rho} \end{aligned} \quad (\text{AII.6})$$

APÊNDICE III

Nosso objetivo neste apêndice é resolver o problema do tunelamento de uma partícula situada, inicialmente, em um mínimo metaestável de um dado potencial, via integrais funcionais.

Suponha que uma partícula de massa m encontra-se no entorno do mínimo local ($q = 0$) do potencial da figura abaixo. Sua hamiltoniana é

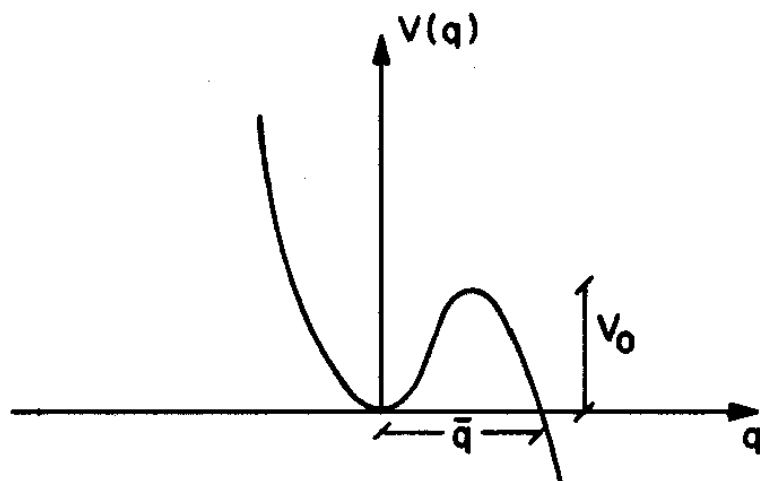


Fig. A1: O potencial $V(q) = q^2 - \lambda q^3$

dada pela expressão usual

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad , \quad (\text{AIII.1})$$

onde $V(q)$ pode, por exemplo, ser aproximado por uma função da forma $q^2 - q^3$.

Para que possamos calcular a taxa de tunelamento desta partícula vamos elaborar um método que nos possibilite computar a parte imaginária da energia do estado quântico da partícula no poço metaestável, pois desta forma

$$\psi(q, t) \propto e^{-i(E_R + iE_I)t/\hbar} \quad , \quad (\text{AIII.2})$$

o que implica em ($E_I < 0$)

$$\psi^*(q,t)\psi(q,t) \propto e^{-2|E_I|t/\hbar} \quad (\text{AIII.3})$$

e, portanto,

$$\Gamma = \frac{2|\text{Im}E|}{\hbar} \quad (\text{AIII.4})$$

é a taxa de tunelamento que queremos computar.

O ponto de partida para a obtenção de $\text{Im}E$ é a expressão para o operador densidade da partícula a temperatura $(k\beta)^{-1}$ (ver (AI.42-45))

$$\rho(x,y,\beta) = \langle x | e^{-\beta H} | y \rangle = \int_y^x Dq e^{-S_E[q]/\hbar} \quad (\text{AIII.5})$$

que no caso de $x = y = 0$ assume a forma

$$\rho(0,0,\beta) = \langle x=0 | e^{-\beta H} | y=0 \rangle = \int_0^0 Dq e^{-S_E[q]/\hbar} ; \quad (\text{AIII.6})$$

nosso segundo passo, será encontrar outra representação para $\rho(x,y,\beta)$ que relacione a resolução da integral funcional em (AIII.6) com o cálculo de Γ em (AIII.4). Para tal, vamos imaginar que o potencial da fig. (A1) seja função de um certo parâmetro ϵ de tal forma que quando $\epsilon > 0$, $V_\epsilon(q)$ seja um potencial com um único mínimo (absoluto) e que ao variarmos ϵ o potencial seja deformado continuamente. Vamos supor, ainda mais, que quando ϵ assume valores negativos, o mínimo absoluto que mencionamos acima transforme-se no mínimo relativo da fig. (A1). Desta forma, quando $\epsilon > 0$, podemos escrever

$$\rho_\epsilon(x,y,\beta) = \langle x | e^{-\beta H(\epsilon)} | y \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^{(\epsilon)}(x) \psi_n^{(\epsilon)*}(y) e^{-\beta E_n^{(\epsilon)}} \quad (\text{AIII.7})$$

onde usamos a relação de completeza $\sum_n |\psi_n^{(\epsilon)}\rangle \langle \psi_n^{(\epsilon)}| = I$ na passagem do 2º para o 3º termo. Temos então, com o auxílio de (AIII.6)

$$\int_0^0 Dq e^{-\frac{1}{\hbar} S_E^{(\epsilon)}[q]} = \sum_{n=0}^{\infty} |\psi_n^{(\epsilon)}(0)|^2 e^{-\beta E_n^{(\epsilon)}} \quad (\text{AIII.8})$$

A expressão (AIII.8) pode ser muito útil se desejarmos estimar a energia do estado fundamental do sistema (ainda para $\epsilon > 0$). Basta que tomemos $\beta \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$), pois neste caso o termo dominante na soma em (AIII.8) corresponde a $n = 0$ e, portanto,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_0^0 Dq e^{-\frac{1}{\hbar} S_E^{(\epsilon)}[q]} \approx |\psi_0^{(\epsilon)}(q)|^2 e^{-\beta E_0^{(\epsilon)}}, \quad (\text{AIII.9})$$

fazendo com que a determinação de $E_0^{(\epsilon)}$ se reduza à resolução de uma integral funcional, onde, em geral, usamos a aproximação de fase estacionária (limite semi-clássico).

A expressão (AIII.9) é bem plausível quando $\epsilon > 0$. Entretanto, nosso problema é que queremos usá-la quando $\epsilon < 0$ e nesta região do espaço de parâmetros sua obtenção não é plenamente justificável. A saída para este impasse é fazer um prolongamento analítico da integral em (AIII.9) para valores negativos de ϵ . Assim sendo, além de proceder de uma forma matematicamente aceitável, obteremos espontaneamente a parte imaginária de $E_0^{(\epsilon)}$ como desejamos.

De agora em diante iremos resolver a integral funcional em (AIII.9) pelo método de fase estacionária assumindo $\epsilon < 0$ (para simplificar a notação vamos omitir o parâmetro ϵ em nossas expressões) e os detalhes referentes ao prolongamento analítico acima mencionado só serão abordados no momento oportuno. Obviamente, o método de fase estacionária é uma boa aproximação à medida que possamos operar no limite $\hbar \rightarrow 0$, ou seja, quando a ação relevante para o nosso problema for bem maior que $\hbar$.

Vamos começar expandindo a ação euclídeana $S_E[q]$ no entorno da solução $q_c(\tau)$ da equação

$$\left. \frac{\delta S_E}{\delta q} \right|_{q_c} = -m\ddot{q}_c + V'(q_c) = 0 \quad (\text{AIII.10})$$

onde $q_c(0) = q_c(\tau) = 0$ ($\tau \rightarrow \infty$). Temos, então

$$S_E[q] \approx S_E[q_c] + \frac{1}{2} \int_0^\tau \int_0^\tau dt' dt'' \delta q(\tau') \delta q(\tau'') \left. \frac{\delta^2 S_E}{\delta q(\tau') \delta q(\tau'')} \right|_{q_c}, \quad (\text{AIII.11})$$

onde $\tau = \hbar\beta$ e

$$\left. \frac{\delta^2 S_E[q]}{\delta q(\tau') \delta q(\tau'')} \right|_{q_c} = -m \frac{d^2}{d\tau^2} \delta(\tau' - \tau'') + V''(q_c) \delta(\tau' - \tau''), \quad (\text{AIII.12})$$

e $\delta q(\tau') = q(\tau') - q_c(\tau')$, o que implica em $\delta q(\tau) = \delta q(0) = 0$. Com esta condição de contorno, podemos expandir as variações $\delta q(\tau')$ num conjunto ortonormal de funções $\{q_n(\tau')\}$ que se anulam nos mesmos pontos. Então,

$$\delta q(\tau') = \sum_n c_n q_n(\tau') \quad \text{com} \quad q_n(0) = q_n(\tau) = 0 \quad \text{e}$$

$$\int_0^\tau q_n(\tau') q_m(\tau') d\tau' = \delta_{mn} \quad (\text{AIII.13})$$

Usando a (AIII.13) e (AIII.12) em (AIII.11) temos:

$$S_E[q(\tau')] \approx S_E(c_0, \dots, c_n, \dots) = S_E[q_c] + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n c_n^2 \quad (\text{AIII.14})$$

Portanto, usando a expansão (AIII.13) podemos reduzir nossa integração funcional em (AIII.9) numa integral discreta no conjunto $\{c_n\}$ da seguinte forma

$$\int_0^0 Dq \exp - \frac{S_E[q]}{\hbar} \approx \exp - \frac{S_E[q_c]}{\hbar} \frac{J}{N} \int \dots \int dc_0 \dots dc_n \dots \exp - \sum_n \frac{\lambda_n c_n^2}{2\hbar} \quad (AIII.15)$$

onde, agora, as variações, δq , dos caminhos $q(\tau')$ foram substituídas por variações dos parâmetros $\{c_n\}$. Na expressão (AIII.15), J é o jacobiano da transformação $q(\tau') \rightarrow \{c_n\}$ e N é o já conhecido fator de normalização de integrais funcionais. Efetuando a (AIII.15) temos

$$\begin{aligned} \int_0^0 Dq \exp - \frac{S_E[q]}{\hbar} &\approx \exp - \frac{S_E[q_c]}{\hbar} \frac{J}{N} \prod_n \left(\frac{2\pi\hbar}{\lambda_n} \right)^{1/2} \\ &= \frac{1}{N_R} \left| \frac{1}{\det[-m\partial_t^2 + V''(q_c)]} \right|^{1/2} \exp - \frac{S_E[q_c]}{\hbar} \quad (AIII.16) \end{aligned}$$

onde $N_R = N/J \prod_n \sqrt{2\pi\hbar}$ e $\prod_n \lambda_n$ é, obviamente, o determinante do operador $\delta^2 S_E / \delta q(\tau') \delta q(\tau'')|_{q_c}$. Apesar de compacta e elegante a expressão (AIII.16) deve ser cuidadosamente analisada antes de tentarmos aplicá-la nos casos de interesse. No que segue, faremos esta análise em etapas.

Primeiramente, vamos investigar com mais detalhes a solução $q_c(\tau')$ de (AIII.10). Podemos constatar trivialmente que esta é a equação de uma partícula clássica sujeita a um potencial $-V(q)$ e sujeita à condição de contorno $q_c(0) = q_c(\tau) = 0$ no limite $\tau \rightarrow \infty$ (ver figura a seguir). O leitor poderá facilmente convencer-se de que existem dois tipos de soluções de (AIII.10) satisfazendo à condição de contorno apropriada. A primeira delas é a solução trivial $q_c = 0$, ou seja, a "partícula" permanece todo o tempo no topo de $-V(q)$ em $q = 0$. Entretanto, a substituição de $q_c = 0$ em (AIII.16) nos permitiria apenas estimar (através de (AIII.9)) a energia de ponto zero no fundo do poço da fig. A1. O segundo tipo de solução descreve uma partícula que deixa o topo de $-V(q)$ com "energia" nula, viaja até o ponto $\bar{q}$ em $\tau = \bar{\tau}$ (fig. A2) e retorna para $q = 0$ em $\tau \approx \infty$. É claro que o tempo de ida e volta de $\bar{q}$ é bem menor que o tempo que a partícula permanece no entorno de $q = 0$. Uma particularidade desta solução é que devido à invariância por translação temporal de (AIII.10) podemos escolher a origem dos "tempos" no ponto $\bar{\tau}$

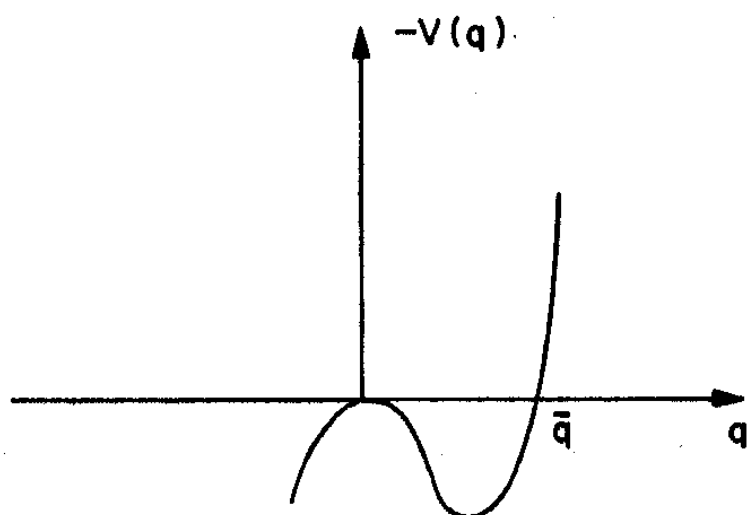


Fig. A2: O potencial invertido

e, portanto, trabalhar no intervalo $(+\infty, -\infty)$. Depois de transladar a origem dos "tempos" podemos ainda concluir que $q_c(\tau')$ é simétrica devido à invariância de (AIII.10) com respeito à inversão temporal. A forma de $q_c(\tau')$ está esboçada na fig. A3. De agora em diante iremos nos referir a este tipo de solução como a "bounce".

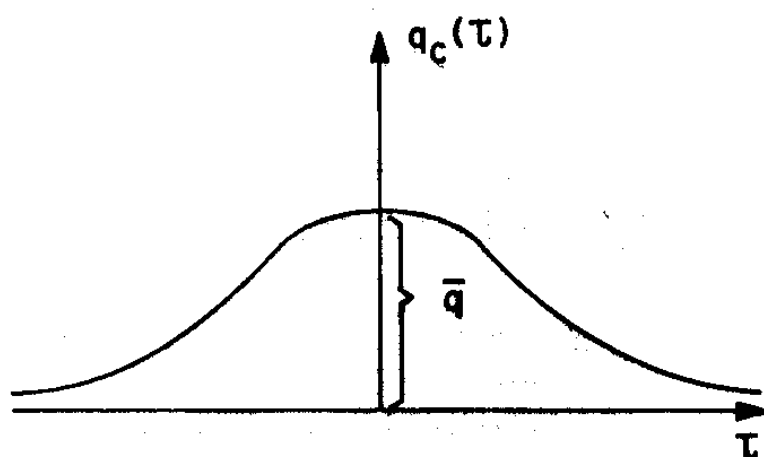


Fig. A3: A solução $q_c(\tau)$

Devido à "bounce" ser uma solução que passa um enorme intervalo de tempo em $q = 0$ e a excursão a $\bar{q}$ ser muito rápida, podemos concluir que N "bounces" suficientemente afastadas também formam uma solução de (AIII.10). Então, se estamos interessados em computar a ação $S_E[q_c]$, devemos levar em conta a possibilidade de existência de uma infinidade de "bounces" bem afastadas umas das outras (aproximação do gás diluído).

A fim de computar a ação total, devemos levar em conta três pontos fundamentais;

- a) Se a ação devida a apenas uma "bounce" é B , a ação devida a N "bounces" será NB . O cálculo de B é muito simples. Como a "bounce" é uma solução de "energia" nula temos

$$\frac{1}{2} m \dot{q}_c^2 - V(q_c) = 0 \quad , \quad (\text{AIII.17})$$

que nos permite escrever

$$S_E[q_c] = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} m \dot{q}_c^2 + V(q_c) \right\} d\tau' = \int_{-\infty}^{\infty} m \dot{q}_c^2 d\tau' \equiv B \quad , \quad (\text{AIII.18})$$

e portanto $NB/\hbar$ será o expoente de (AIII.16).

- b) O termo que envolve o determinante da 2^{a} derivada funcional de $S_E[q_c]$ pode também ser calculado de forma simples no caso de N "bounces". Neste caso, como a solução $q_c(\tau')$ é nula exceto por N rápidas excursões a $\bar{q}$ vamos assumir que o fator que multiplica a exponencial possa ser escrito como

$$\frac{1}{N_R} \left[\det \left(-m \delta_t^2 + V''(q_c) \right) \right]^{-1/2} = \frac{K}{N_R} \left[\det \left(-m \delta_t^2 + m \omega^2 \right) \right]^{-1/2} \quad , \quad (\text{AIII.19})$$

onde o termo envolvendo o determinante do lado direito é devido à solução $q_c = 0$. ($m \omega^2 \equiv V''(0)$).

- c) Finalmente, como não há restrição quanto aos N instantes τ_i quando cada uma das excursões atinge $\bar{q}$ (desde que estas não interfiram umas com as outras), devemos integrar sobre o centro de cada "bounce" individual, ou seja

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} d\bar{\tau}_1 \int_{-\tau/2}^{\bar{\tau}_1} d\bar{\tau}_2 \dots \int_{-\tau/2}^{\bar{\tau}_{N-1}} d\bar{\tau}_N = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\tau^N}{N!} \quad (\text{AIII.20})$$

Usando as conclusões que chegamos em a), b) e c) acima podemos escrever

$$\begin{aligned} \int_0^0 Dq \exp - \frac{S_E[q]}{\hbar} &\approx \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N_R} \left[\det(-m\delta_t^2 + m\omega^2) \right]^{-1/2} \frac{(K e^{-B/\hbar\tau})^N}{N!} \\ &= \frac{1}{N_R} \left[\det(-m\delta_t^2 + m\omega^2) \right]^{-1/2} \exp(K e^{-B/\hbar\tau}) \end{aligned} \quad (\text{AIII.21})$$

Por outro lado, o termo $N_R^{-1} [\det(-m\delta_t^2 + m\omega^2)]^{-1/2}$ pode ser calculado com o auxílio da forma explícita de $\rho(0,0,\beta)$ para o oscilador harmônico e resulta em

$$\frac{1}{N_R} \left[\det(-m\delta_t^2 + m\omega^2) \right]^{1/2} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp - \frac{\omega\tau}{2}, \quad (\text{AIII.22})$$

que, levada em (AIII.21), nos dá

$$\int_0^0 Dq \exp - \frac{S_E[q]}{\hbar} \approx \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{\omega\tau}{2} + K e^{-B/\hbar\tau} \right) \quad (\text{AIII.23})$$

Substituindo (AIII.23) em (AIII.9) podemos estimar E_0 como

$$E_0 = \left(\frac{\hbar\omega}{2} - \hbar K \exp - \frac{B}{\hbar} \right) (1 + O(\hbar)) \quad (\text{AIII.24})$$

Desta expressão podemos constatar que a correção à aproximação harmônica é exponencialmente pequena. Entretanto, esta correção irá se tornar extremamente importante por exibir uma parte imaginária como veremos abaixo.

A única coisa que nos resta fazer no momento é calcular o fator K . Para isto, vamos estudar a (AIII.16) para uma única "bounce". Inicialmente, notamos que $\dot{q}_c$ é um auto estado de $-m\delta_t^2 + V''(q_c)$ com auto valor nulo. A demonstração deste fato é trivial. Derivando a equação

(AIII.10) com relação ao "tempo" temos

$$-m\ddot{q}_c + V''(q_c)\dot{q}_c = -m\partial_t^2 \dot{q}_c + V''(q_c)\dot{q}_c = 0 \quad , \quad (\text{AIII.25})$$

que traduz exatamente o que mencionamos acima. Como o determinante deste operador aparece no denominador da (AIII.16), temos, aparentemente, um problema com a existência do auto valor nulo. No entanto, veremos como este problema pode ser contornado.

Tomemos a função q_1 em (AIII.13) como a que corresponde ao auto valor nulo. Neste caso, devido à normalização dos q_n 's temos

$$q_1 = \frac{\dot{q}_c}{\|\dot{q}_c\|} = \left(\frac{B}{m}\right)^{1/2} \dot{q}_c \quad , \quad (\text{AIII.26})$$

onde usamos a (AIII.18). A variação de qualquer função $q(\tau')$ na "direção" $q_1(\tau')$ pode ser escrita como

$$\delta q(\tau') = dc_1 q_1(\tau') = \frac{dq_c}{d\tau'} d\bar{\tau} \quad . \quad (\text{AIII.27})$$

Substituindo a (AIII.26) em (AIII.27) concluímos que

$$\frac{\delta c_1}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \left(\frac{B}{2\pi\hbar m}\right)^{1/2} d\bar{\tau} \quad , \quad (\text{AIII.28})$$

e portanto a integração em $\delta c_1/\sqrt{2\pi\hbar}$ nada mais é que a integração sobre o centro de uma única "bounce". Esta integração foi efetuada explicitamente em (AIII.20) para $N = 1$. Devemos então suprimir o auto valor zero do cálculo do determinante e multiplicar o resultado por $(B/2\pi\hbar m)^{1/2}$.

Outro problema que surge na (AIII.16) é devido à existência de um auto valor negativo. Como q_c é uma função simétrica, $\dot{q}_c$ é anti-simétrica e, portanto, possui um zero em $\tau' = 0$. Mas, $\dot{q}_c$ corresponde ao auto valor nulo e, portanto, existe uma função que não possui nenhum zero para $\tau \neq \pm \infty$ que é, necessariamente, um auto estado de auto valor negativo de (AIII.12). Tomemos a função $q_0(\tau')$ em

(AIII.13) como esta auto função. Então $\lambda_0 < 0$ em (AIII.15), o que implica na divergência da integral em c_0 naquela expressão.

A fim de contornar este novo problema, vamos retornar à argumentação do prolongamento analítico usada no início deste apêndice. Como a única direção no espaço de funções que ainda nos causa problemas é $q_0(\tau)$, vamos parametrizar um caminho neste espaço, $f_z(\tau)$, de tal forma que $f_0(\tau) = 0$, $f_1(\tau) = q_0(\tau)$ e $\delta f_z(\tau)/\delta z|_{z=1} = q_0(\tau)$. Estudemos, então, a integral

$$I = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp - \frac{S_E(z)}{\hbar} \quad (\text{AIII.29})$$

para potenciais da mesma forma que o da fig. A1. Para qualquer valor de $z > z_0$ ($S_E(z_0) = 0$) temos que $S_E(z) < 0$. Por outro lado, sabemos que $S_E(1) \equiv B$ é o máximo da ação euclídeana pois $d^2 S_E(1)/dz^2 < 0$. Então, para que a (AIII.29) seja efetuada, devemos deformar o contorno de integração a fim de seguir o caminho de maior declive de $S_E(z)$ no plano complexo (ver figura abaixo). Como estamos interessados apenas na parte

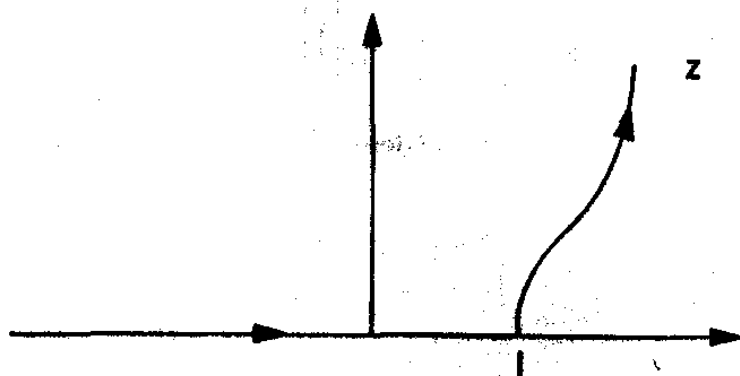


Fig. A4: O contorno de integração

imaginária de I , podemos aplicar o método do ponto de sela para obter

$$|m| = \int_1^{1+i\infty} \exp - \frac{S_E''(1)}{2\hbar} (z-1)^2 \exp - \frac{S_E(1)}{\hbar} \frac{dz}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$= \frac{|S''(1)|^{-1/2}}{2} \exp - \frac{S_E(1)}{\hbar} \quad (\text{AIII.30})$$

O fator 1/2 surge devido ao fato de integrarmos apenas metade do pico gaussiano. Um fato muito importante em (AIII.30) é que $\text{Im} I$ depende apenas da ação e de sua segunda derivada em $z = 1$, ou seja, a ação da "bounce". Extendendo este resultado para todo o espaço de funções temos

$$\text{Im} \int Dq \exp - \frac{S_E[q]}{\hbar} = \frac{1}{2N_R} \left(\frac{B}{2\pi\hbar m} \right)^{1/2} \tau \left| \det' \left(-m\partial_t^2 + V''(q_c) \right) \right|^{-1/2} \exp - \frac{B}{\hbar}, \quad (\text{AIII.31})$$

onde $\det'$ omite o auto valor nulo.

Como (AIII.31) foi calculada para uma única "bounce" podemos, com o auxílio de (AIII.19), escrever

$$\frac{\tau}{N_R} \left[\det \left(-m\partial_t^2 + m\omega^2 \right) \right]^{-1/2} \text{Im} K e^{-B/\hbar} = \text{Im} \int Dq \exp \frac{S_E[q]}{\hbar}, \quad (\text{AIII.32})$$

e consequentemente

$$\text{Im} K = \frac{1}{2} \left(\frac{B}{2\pi\hbar m} \right)^{1/2} \left| \frac{\det \left(-m\partial_t^2 + m\omega^2 \right)}{\det' \left(-m\partial_t^2 + V''(q_c) \right)} \right|^{1/2}. \quad (\text{AIII.33})$$

Substituindo a (AIII.33) em (AIII.24) podemos, finalmente, computar

$$\Gamma = \frac{2\text{Im} E_0}{\hbar} = 2\text{Im} K e^{-B/\hbar} = \left(\frac{B}{\sqrt{2\pi\hbar m}} \right)^{1/2} \left| \frac{\det \left(-m\partial_t^2 + m\omega^2 \right)}{\det' \left(-m\partial_t^2 + V''(q_c) \right)} \right|^{1/2} e^{-B/\hbar}. \quad (\text{AIII.34})$$

que coincide com o já conhecido resultado da aproximação WKB. A expressão para Γ escrita nesta forma é muito útil em teoria de campos no estudo do decaimento de um vácuo falso [27,28].

REFERENCIAS

1. Selected Papers on Noise and Stochastic Processes; Nelson Wax ed. (Dover, N.Y., 1954).
2. D.R. Tilley and J. Tilley; Superfluidity and Superconductivity (Van Nostrand-Reinhold 1974).
3. E. Kanai; Prog. Theo. Phys. 3 (1948) 440.
4. M.D. Kostin; J. Chem. Phys. 57 (1972) 3589.
5. E. Nelson; Phys. Rev. 150 (1966) 1079.
6. K. Yasue; Annals of Physics 114 (1978) 479.
7. H. Dekker; Phys. Rev. A 16 (1977) 2116.
8. I.R. Senitzky; Phys. Rev. 119 (1960) 670.
9. A.O. Caldeira and A.J. Leggett; Physica 121A (1983) 587; E 130 A (1985) 374.
10. A.O. Caldeira and A.J. Leggett; Phys. Rev. A 31 (1985) 1059.
11. A.O. Caldeira and A.J. Leggett; Annals of Physics 149 (1983) 374; E 153 (1984) 445.
12. A.J. Leggett, S. Chakravarty, A.T. Dorsey, M.P.A. Fisher, A. Garg and W. Zwerger; Rev. Mod. Phys. 59 (1987) 1.
13. M.P.A. Fisher and W. Zwerger; Phys. Rev. B 32 (1985) 6190.
14. L.E. Reichl; A Modern Course in Statistical Physics (University of Texas Press 1980).
15. R.L. Stratonovich; Topics in the Theory of Random Noise, vol. I (Gordon and Breach, Science Publishers, Inc. 1963).
16. M. Tinkham; Introduction to Superconductivity (McGraw-Hill 1975).
17. J. Kurkijärvi; Phys. Rev. B 6 (1972) 832.
18. V. Hakim and V. Ambegaokar; Phys. Rev. A 32 (1985) 423.
19. R.P. Feynman and A.R. Hibbs; Quantum Mechanics and Path Integrals (McGraw-Hill, Inc., 1965).
20. R.P. Feynman and F.L. Vernon Jr.; Annals of Physics (N.Y.) 24 (1963) 118.
21. R.P. Feynman; Statistical Mechanics (Benjamin 1972).
22. D. Forster; Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions (Benjamin, New York, 1975).
23. A.J. Leggett; Phys. Rev. B 30 (1984) 1208.

24. K. Möring and U. Smilansky; Nucl. Phys. A 338 (1980) 227.
25. A.O. Caldeira and A.J. Leggett; Phys. Rev. A 31 (1985) 1059.
26. M. Sargent III, M.O. Scully and W.E. Lamb Jr; Laser Physics (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1974).
27. C.G. Callan and S. Coleman; Phys. Rev. D 16 (1977) 1762.
28. S. Coleman; "The Uses of Instantons", International School of Subnuclear Physics "Ettore Majorana" 1977.
29. A. Larkin and Y. Ovchinnikov; JETP Lett. 37 (1983) 382 e Sov. Phys. JETP 57 (1983) 876.
30. U. Weiss and W. Haeflner; Phys. Rev. D 27 (1983) 2916.
31. H. Grabert, U. Weiss and P. Hänggi; Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 2193 e Z. Phys. B 56 (1984) 171.
32. D. Waxman and A.J. Leggett; Phys. Rev. B 32 (1985) 4450.
33. W. Zwerger; Phys. Rev. A 31 (1985) 1745.
34. H.A. Kramers; Physica (I trecht) 7 (1940) 284.-
35. R.F. Voss and R.A. Webb; Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 697.
36. V. Ambegaokar, U. Eckern and G. Schön; Phys. Rev. Lett. 48 (1982) 1745.
37. P. Hedegard and A.O. Caldeira; Physica Scripta 35 (1987) 609.