

ANDRÉ CIDRIM SANTOS

Decoerência de Pacote Gaussiano em um Potencial Harmônico

Campinas 2013



Universidade Estadual de Campinas

INSTITUTO DE FÍSICA Gleb Wataghin

André Cidrim Santos

Decoerência de Pacote Gaussiano em um Potencial Harmônico

Orientador: Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira

TESE DE MESTRADO APRESENTADA AO INSTI-TUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN DA UNICAMP PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM FÍ-SICA.

Este exemplar corresponde à versão final da dissertação de mestrado defendida pelo aluno André Cidrim Santos e orientada pelo Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira.

Amir Ordacgi Caldeira

Campinas 2013

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA POR VALKÍRIA SUCCI VICENTE – CRB8/5398 - BIBLIOTECA DO IFGW UNICAMP

Sa59d

Santos, André Cidrim, 1989-

Decoerência de pacote gaussiano em um potencial harmônico / André Cidrim Santos. -- Campinas, SP : [s.n.], 2013.

Orientador: Amir Ordacgi Caldeira. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Dissipação quântica. 2. Decoerência. I. Caldeira, Amir Ordacgi, 1950- II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: Decoherence of gaussian packet in a harmonic potential Palavras-chave em inglês: Quantum dissipation Decoherence Área de Concentração: Física Titulação: Mestre em Física Banca Examinadora: Amir Ordacgi Caldeira [Orientador] José Abel Hoyos Neto Marcus Aloizio Martinez de Aguiar Data da Defesa: 08-05-2013 Programa de Pós-Graduação em: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE ANDRÉ CIDRIM SANTOS – R.A. 070142 APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 08/05/2013.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira Orientador do Candidato - DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto IFSC/USP

Prof. Dr. Mareus Aloizio Martinez de Aguiar DFMC/IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

Acima de tudo, meu maior agradecimento é naturalmente aos meus amados pais, Gilce e Auzier. Até hoje me impressiona o apoio incondicional que dão a mim e a minha irmã. Com eles aprendi na prática a máxima moral de só fazer aos outros o que se espera para si mesmo. Aprendi que errar pode ser mais instrutivo que acertar, desde que se admita com sinceridade o erro e evite refazê-lo. Com minha mãe entendi de cedo a importância do estudo, com sua saudável insistência em nos apoiar desde a escola. Também com ela tive meu maior exemplo de comprometimento e responsabilidade, de como se entregar a algo intensamente e aprendi o enorme valor em fazer pequenos sacrifícios para ajudar alguém que se ama. No meu pai sempre tive um mentor em vários aspectos, aquele que me ensinou a enxergar racionalmente problemas que se aparentavam complicados, sempre pronto para me dar os melhores conselhos que posso pedir a alguém. É também por sua culpa que tenho que dividir a física com a paixão pela música.

Em seguida, agradeço à minha melhor amiga, minha irmã, Adriana. Ela que dividiu comigo os melhores momentos do meu crescimento como pessoa e contribuiu muito pra isso. Sempre do meu lado, mesmo com a separação geográfica, é a pessoa com quem posso contar a qualquer momento e que desejo o melhor.

Agradeço a ambas as famílias, Cidrim e Santos, pelo constante apoio. Também aos muitos amigos que direta ou indiretamente tiveram influência em mim, em especial os que se seguem. Ao meu segundo irmão, o Raphael, que me aturou por seis anos e me ajudou incrivelmente nos momentos mais difíceis. Além disso, muito contribuiu para o meu aprendizado extra-acadêmico, gastando inúmeras horas em discussões que refinaram minha visão de mundo e me fizeram uma pessoa mais crítica. Ao Felipe, Fefê, que me acompanhou e ajudou imensamente durante o mestrado, discutindo de física à música. Aproveitando também seu papel como baterista na nossa banda Dirac and the Spinors, agradeço ao Franz, Galvão e Mathews, pelas risadas e divertidas horas no estúdio. Ao Elijah Tasca por compartilhar seus conhecimentos musicais. Ao Prof. César Peixoto, a quem devo horas de preciosas discussões sobre fundamentos da ciência e um livro de presente. Ao querido amigo Daniel (Danny), pela sincera amizade desde os primórdios da graduação. Também dos tempos de graduação, agradeço ao inspirador físicomatemático, Rodrigo Barbosa, o Rodrigeuler. Ao pessoal da república Soca Porva, a todos que passaram pela casa, desde 2007. Ao Lucas (Korn) pela amizade e discussões filosóficas e a todos do futebol maroto do Filosofísica. Também agradeço a todos os colegas que passaram pela sala de estudos do DFMC.

Aos queridos amigos de BH, começando pelo eterno time André Diniz, Diego, Anderson e Edson, aos quais devo a amizade sincera e as melhores horas de diversão. Às representantes femininas do [A.S.]: Amanda, Clarisse, Débora e Laís. Aos grandes companheiros de Lafaiete, a começar pelo André Marinho, amigo do peito a quem desejo a maior sorte na nova empreitada em Chicago. Ao Luís Fernando Bananêra, meu amigo trekker, pela inabalável consideração. Ao Samuel, o ninja, por me ensinar a desaparecer sem ser percebido.

Não menos importante, ao meu orientador, Amir Caldeira, que me deu a oportunidade de estudar assuntos interessantíssimos e compartilhou comigo sua extraordinária erudição em física.

Finalmente, agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro nesse projeto.

Resumo

Nesse trabalho estudamos o problema quântico dissipativo de um pacote gaussiano aprisionado num potencial harmônico. Seguimos uma abordagem fenomenológica de dissipação, à luz do modelo Caldeira-Leggett, onde o ambiente é caracterizado por um banho osciladores harmônicos.

Sendo um dos efeitos do acoplamento com o banho transformar o pacote inicialmente puro em uma mistura estatística num processo de decoerência, estimamos o tempo característico em que isso ocorre em diferentes regimes de temperatura e acoplamento.

Abstract

In this work we have studied the quantum dissipative problem of a gaussian packet under the influence of a harmonic potential. A phenomenological approach to dissipation is taken, in the light of the Caldeira-Leggett model, in which the environment is characterized by a bath of harmonic oscillators.

As one of the effects of the coupling to the bath being leading the initially pure packet into a statistical mixture, we estimate the characteristic time elapsed for this to occur in different regimes of temperature and coupling.

"I'd take the awe of understanding over the awe of ignorance any day."

Douglas Adams, The Salmon of Doubt.

Sumário

R	esumo	ix
Abstract		xi
1	Introdução	1
2	O Movimento Browniano	3
	2.1 O problema clássico	3
	2.2 O modelo Caldeira-Leggett	5
	2.3 O problema quântico	10
3	A abordagem de Feynman-Vernon	12
4	Sistemas Quânticos Dissipativos	15
5	A decoerência e pureza	20
	5.1 O tempo de relaxação e o tempo de decoerência	20
6	Pacotes Gaussianos em um Potencial Harmônico	29
	6.1 Um pacote Gaussiano no Potencial Harmônico	29

SUMÁRIO

	6.2 Decoerência de dois pacotes gaussianos num potencial harmônico $\ldots \ldots \ldots$	35
	6.3 Decoerência Interna de um Pacote Gaussiano	39
7	Conclusões e Perspectivas	63
Bi	Bibliografia	
A	pêndices	69
A	Transformada de Laplace	70
в	Introdução de uma função de convergência no caso ôhmico	71

1

Introdução

O último século foi palco do enorme desenvolvimento da mecânica quântica, desde o nascimento até o seu estabelecimento como uma das mais importantes teorias científicas. As suas previsões alteraram nossos paradigmas no âmbito prático, tecnológico, e também abalaram convicções antigas sobre o comportamento da matéria em escalas microscópicas, compondo um mundo contra-intuitivo, repleto de novos fenômenos estranhos com limitada ou nenhuma analogia clássica.

Contudo, estamos longe de ver exaurirem-se as novas aplicações da teoria, em particular, o advento da computação quântica, que traria uma mudança radical na forma em que processamos informação. Durante as últimas três décadas vimos uma intensificação notável do estudo de inúmeros sistemas físicos capazes de criar a unidade básica de informação quântica, o *q-bit*. Isso nos possibilitaria explorar propriedades quânticas em escalas cada vez maiores, a ponto de sermos capazes de construir um computador com poder de processamento exponencialmente maior do que o que conhecemos da tecnologia atual.

Apesar do grande esforço científico nessa direção e de termos uma promessa teórica bem estabelecida, umas das maiores dificuldades do avanço é manter as propriedades quânticas nesses sistemas por tempos consideravelmente longos. A dificuldade mora exatamente no efeito

1. Introdução

dissipativo da interação entre o sistema e o ambiente, cuja ação é geralmente extinguí-las. O problema torna-se ainda mais crítico caso lidemos com sistemas de escalas meso/macroscópicas.

Tendo isso em vista, fica clara a importância do estudo da dissipação. Conhecer os mecanismos envolvidos na interação de um sistema de interesse com inúmeros graus de liberdade de um meio, mesmo que qualitativamente, traz luz a questões como a perda de coerências quânticas e até a discussões mais fundamentais como a emergência de propriedades clássicas em sistemas que inicialmente eram descritos pela mecânica quântica.

Nesse trabalho nos propomos a estudar um problema específico da perda de coerência interna de um pacote gaussiano num potencial harmônico, seguindo o modelo fenomenológico dissipativo Caldeira-Leggett. O texto será dividido numa discussão inicial do modelo, que se estende do capítulo 2 a 4. A seguir, no capítulo 5, fazemos uma contextualização do problema da decoerência quântica, preparando uma breve base para a interpretação dos nossos resultados encontrados no capítulo 6. Ao fim, em 7 concluímos o trabalho com algumas sugestões de novas abordagens, assim como uma apreciação dos resultados frente ao encontrado na literatura.

O Movimento Browniano

2.1 O problema clássico

Frequentemente, para extrairmos leis fundamentais de um sistema físico de interesse simplificamos sua análise, ignorando interações com o meio em que se insere. Em problemas canônicos de cinemática é comum desprezarmos, por exemplo, a resistência imposta pelo ar ou por um fluido viscoso, que se opõem ao movimento de um corpo, e obtermos uma descrição qualitativa via equações de movimento. Entretanto, a física vista nas experiências diárias indica-nos uma complexidade muito maior e uma visão mais realista demanda-nos necessariamente a inclusão dos efeitos do ambiente.

Um caso em que a consideração do meio tem um papel fundamental é o famoso movimento browniano de uma partícula clássica. Para ilustrarmos esse movimento, imaginemos uma partícula de massa M e de dimensões macroscópicas imersa num recipiente preenchido por um fluido de viscosidade não-nula. As dimensões da partícula são macroscópicas no sentido de que são muito maiores do que as das que compõem o meio viscoso, assim como sua massa é muito maior. Se soltássemos a partícula no fluido sob ação somente do seu próprio peso e da interação com o meio, acompanhando sua trajetória, notaríamos um movimento errático, a princípio sem al-

2. O Movimento Browniano

guma previsibilidade evidente. Repetido esse experimento verificaríamos uma trajetória muito diferente da anterior. Essa falta de padrão aparente levou o biólogo escocês Robert Brown, em 1827, a supor erroneamente que os grãos de pólen que observava por microscópio imersos em água eram na verdade organismos vivos. Mais tarde o próprio verificou o mesmo fenômeno em partículas inorgânicas, descartando a hipótese.

A dificuldade encontrada na descrição desse tipo de movimento está na sua natureza estocástica. Sendo o meio um fluido, estamos lidando com um número enorme de partículas, da ordem de 10²³, assim como um número de colisões com a partícula de interesse muito próximo dessa ordem. Contudo, apesar de ser impraticável descrevermos o seu movimento através de cada colisão microscópica, podemos lançar mão de uma abordagem estatística, tratando o problema através de uma equação fenomenológica em que são feitas suposições básicas sobre a força aleatória envolvida.

Essa equação a que nos referimos é a conhecida equação de Langevin. Nela supomos que a partícula de interesse de coordenada q percebe o ambiente (o reservatório de partículas do fluido) por meio de duas forças de naturezas diferentes. Um deles vem na forma do atrito dinâmico, $-\eta \dot{q}$, sendo uma força sistemática de resistência, comum a um problema de dinâmica de fluidos. Já o segundo termo, f(t), adquire um caráter flutuante, que propriamente define o movimento browniano. A sua forma é dada por [1]

$$M\ddot{q} + \eta \dot{q} + V'(q) = f(t).$$
(2.1)

Por completeza, a força V'(q) foi introduzida caso supusermos ainda que a partícula está sujeita à ação de um potencial externo V(q) genérico.

A 2.1 não é exatamente uma equação de movimento comum devido à presença do termo de força aleatória, que impomos satisfazer as condições nas médias em posição,

$$\langle f(t) \rangle = 0, \tag{2.2}$$

e cuja correlação temporal é deltiforme dada por

$$\langle f(t)f(t')\rangle = 2\eta k_B T \delta(t-t'). \tag{2.3}$$

 k_B é a constante de Boltzmann. Esse comportamento deltiforme garante-nos que o meio, em equilíbrio térmico a uma tempertatura T, não guarde memória de tempos anteriores do movimento da partícula, sendo assim definido como um processo estocástico *Markoviano*. Essa suposição pode ser relaxada, introduzindo-se memória no coeficiente de atrito. A mudança daria origem a uma equação de Langevin generalizada. Entretanto, para nossos objetivos, trataremos somente de problemas Markovianos.

2.2 O modelo Caldeira-Leggett

O modelo Caldeira-Leggett [2] parte do intuito de se reproduzir num tratamento Lagrangeano o movimento Browniano clássico. Ele é caracterizado por um banho de osciladores harmônicos, seguindo a forma:

$$\mathcal{L} = \underbrace{\frac{M\dot{q}^2}{2} - V(q)}_{\mathcal{L}_S} + \underbrace{\sum_k \left\{ \frac{m_k \dot{q}_k^2}{2} - \frac{m_k \omega_k^2 q_k^2}{2} \right\}}_{k} + \underbrace{\sum_k C_k q_k q}_{\mathcal{L}_I} - \underbrace{\sum_k \frac{\mathcal{L}_{CT}}{2m_k \omega_k^2} q^2}_{\mathcal{L}_I}$$
(2.4)
$$= \mathcal{L}_S + \mathcal{L}_B + \mathcal{L}_I + \mathcal{L}_{CT}.$$

O termo \mathcal{L}_S decreve uma partícula de massa M e coordenada q sujeita a um potencial qualquer V(q). Os osciladores do banho são descritos por \mathcal{L}_B , cada qual rotulado com o índice k associado a um modo, com respectivas massa m_k , coordenada q_k e frequência de oscilação ω_k .

Através da chamada Lagrangeana de interação \mathcal{L}_I impomos mais uma suposição importante ao modelo: o acoplamento bilinear em coordenadas da partícula e do banho. Essa escolha particular justifica-se na intenção de tomarmos somente efeitos de resposta linear do reservatório ao sistema. Estamos aqui considerando um reservatório de escalas geometricamente macroscópicas. Uma vez que a interação do sistema com um modo qualquer do banho é proporcional ao inverso do volume desse reservatório, o acoplamento por modo do banho pode ser considerado fraco. Obviamente, como estamos acoplando ao sistema inúmeros (ou, como consideraremos mais à frente, infinitos) modos e a contribuição de cada é somada no termo de interação, nada nos impede de descrevermos assim até regimes fortemente dissipativos, dependendo agora da informação que as constantes de acoplamento C_k trazem para cada modo.

Por último, vemos um termo \mathcal{L}_{CT} ao qual nos referimos por contra-termo da Lagrangeana. É possível que à primeira vista a sua introdução na descrição do sistema-reservatório pareça arbitrária e possa causar certa estranheza. Como veremos, o termo cancela uma contribuição quadrática extra da coordenada partícula. Efetivamente, sua ação é centrar os osciladores do banho na coordenada da partícula, garantindo invariância translacional do problema.

Temos que ter em mente que nosso objetivo agora é recuperar, através dessa abordagem Lagrangeana, a fenomenologia descrita na equação de Langevin clássica. Ou seja, é claro aonde queremos chegar e estamos fazendo as suposições que sabemos nos levar a esse fim.

Do formalismo Lagrangeano, podemos escrever as respectivas equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = 0 \Longrightarrow M\ddot{q} + V'(q) - \sum_{k} C_{k}q_{k} + \sum_{k} \frac{C_{k}^{2}}{m_{k}\omega_{k}^{2}}q = 0$$
(2.5)

e, para cada modo,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q_k}} = 0 \Longrightarrow m_k \ddot{q}_k + m_k \omega_k^2 q_k - C_k q = 0.$$
(2.6)

Aplicando a transformada de Laplace na equação 2.6 temos:

$$\mathcal{L}_t[q_k](s) = \tilde{q}_k(s) = \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{sq_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{C_k\tilde{q}(s)}{m_k(s^2 + \omega_k^2)}.$$
(2.7)

(No que diz respeito à transformada de Laplace e suas propriedades a partir daqui utilizadas, recomendamos ao leitor que achar necessário consultar o apêndice A.)

Agora, tomando a transformada inversa de 2.7, podemos reescrever 2.5 da seguinte forma

$$M\ddot{q} + V'(q) + \sum_{k} \frac{C_{k}^{2}}{m_{k}\omega_{k}^{2}}q = \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \sum_{k} C_{k} \left\{ \frac{\dot{q}_{k}(0)}{s^{2} + \omega_{k}^{2}} + \frac{sq_{k}(0)}{s^{2} + \omega_{k}^{2}} \right\} e^{st} ds + \sum_{k} \frac{C_{k}^{2}}{m_{k}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \frac{\tilde{q}(s)}{(s^{2} + \omega_{k}^{2})} e^{st} ds.$$
(2.8)

Reparemos agora que com a relação

$$\frac{1}{s^2 + \omega_k^2} = \frac{1}{\omega_k^2} \left(1 - \frac{s^2}{s^2 + \omega_k^2} \right)$$
(2.9)

aplicada ao último termo de 2.8 ficamos com

$$\sum_{k} \frac{C_{k}^{2}}{m_{k}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \frac{C_{k}\tilde{q}(s)}{s^{2}+\omega_{k}^{2}} e^{st} ds = \sum_{k} \frac{C_{k}^{2}}{m_{k}\omega_{k}^{2}} q - \sum_{k} \frac{C_{k}^{2}}{m_{k}\omega_{k}^{2}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \frac{s^{2}\tilde{q}(s)}{s^{2}+\omega_{k}^{2}} e^{st} ds.$$
(2.10)

E é aqui que entra o papel do contra-termo, que se cancela com o primeiro termo do lado direito de 2.10, uma contribuição quadrática extra em posição da partícula.

Por fim, escrevemos

$$M\ddot{q} + V'(q) + \sum_{k} \frac{C_{k}^{2}}{m_{k}\omega_{k}^{2}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \frac{s^{2}\tilde{q}(s)}{s^{2} + \omega_{k}^{2}} e^{st} ds = = \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \sum_{k} C_{k} \left\{ \frac{\dot{q}_{k}(0)}{s^{2} + \omega_{k}^{2}} + \frac{sq_{k}(0)}{s^{2} + \omega_{k}^{2}} \right\} e^{st} ds.$$
(2.11)

Note que o terceiro termo de 2.11 pode ser reescrito como

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon - i\infty}^{\epsilon + i\infty} \frac{s\tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds \right).$$
(2.12)

Reparando-se que dentro da integral temos o produto de duas conhecidas transformadas de Laplace, a do $\cos \omega_k t$ e de q(t), e utilizando-nos da propriedade do produto de convolução (ver apêndice A), reescrevemos esse termo como

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos\left[\omega_k (t - t')\right] q(t') dt' \right).$$
(2.13)

Após uma certa manipulação, esse termo gera a força de arraste $\eta \dot{q}$ da equação de Langevin, acrescido de outro termo dependente da condição inicial da posição da partícula. Mas para isso, é interessante introduzirmos o conceito da função espectral, de teoria de resposta linear, definida como

$$J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k).$$
(2.14)

Usando essa definição podemos então transformar o somatório nos modos k em uma integral em frequência da forma:

$$\sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos\left[\omega_k(t-t')\right] \longrightarrow \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos\left[\omega(t-t')\right].$$
(2.15)

De fato, para reproduzirmos a física vista na equação de Langevin devemos tomar a função espectral na forma

$$J(\omega) = \eta \omega \theta(\Omega - \omega), \qquad (2.16)$$

onde $\theta(x)$ é a função degrau que satisfaz

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0\\ 1/2, & \text{se } x = 0\\ 1, & \text{se } x > 0. \end{cases}$$
(2.17)

Devido a essa forma de $J(\omega)$ dá-se o nome de banho ôhmico, numa analogia da equação de Langevin com um problema clássico de circuitos de dissipação ôhmica. Além da linearidade de $J(\omega)$ definimos um corte na frequência característica Ω . Essa frequência está intimamente ligada ao tempo microscópico de colisões entre o sistema e as partículas do banho. O apelo físico de Ω é particular para cada problema específico e corte mais sutis podem ser considerados (conferir apêndice B).

Substituindo-se a nova função espectral em 2.13, escrevemos então

$$\sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos\left[\omega_k(t - t')\right] = \frac{2}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \eta \cos\left[\omega(t - t')\right] = 2\eta \delta(t - t').$$
(2.18)

Usamos o fato de que para $t - t' \gg \Omega^{-1}$, podemos escrever

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin \Omega(t - t')}{t - t'} \approx \delta(t - t').$$
(2.19)

Essa aproximação é válida, uma vez que estamos considerando um limite em que Ω representa frequências muito mais altas que quaisquer outras frequências típicas do problemas.

Substituindo esse resultado no terceiro termo da equação 2.11 ficamos com

$$\frac{d}{dt} \int_{0}^{t} 2\eta \delta(t-t')q(t')dt' = 2\eta \frac{d}{dt} \left\{ -\theta(t-t')q(t') \Big|_{0}^{t} + \int_{0}^{t} \theta(t-t')\dot{q}(t')dt' \right\}
= 2\eta \frac{d}{dt} \left\{ -\theta(0)q(t) + \theta(t)q(0) + q(t) - q(0) \right\}
= \eta \dot{q}(t) + 2\eta \delta(t)q(0),$$
(2.20)

que de fato origina a força de arraste, acrescida de uma contribuição de um termo espúrio. Esse último componente deltiforme será agora incorporado ao resto da equação 2.11 para definir corretamente a força flutuante f(t).

Podemos tomar a transformada de Laplace inversa para último termo de 2.11 e obtermos

$$\tilde{f}(t) = \sum_{k} C_k \left\{ \frac{\dot{q}_k(0)}{\omega_k} \sin \omega_k t + q_k(0) \cos \omega_k t \right\},$$
(2.21)

que, juntamente com $2\eta\delta(t)q(0)$, originará a força flutuante f(t) correta.

Para isso, basta revertermos $2\eta\delta(t)q(0)$ para a sua forma discretizada em modos do banho, com o auxílio da definição da função espectral. Conseguimos então incorporar o termo espúrio para a definição da força flutuante, definindo

$$\bar{q}_k \equiv \frac{C_k q_k(0)}{m_k \omega_k^2},\tag{2.22}$$

que nos dará

$$\sum_{k} \frac{C_k^2 q_k(0)}{m_k \omega_k^2} \cos \omega_k t = \sum_{k} C_k \bar{q}_k(0) \cos \omega_k t.$$
(2.23)

Por fim encontramos

$$f(t) = \sum_{k} C_k \left\{ \frac{\dot{q}_k(0)}{\omega_k} \sin \omega_k t + (q_k(0) - \bar{q}_k) \cos \omega_k t \right\}$$
(2.24)

e reescrevemos a equação de movimento gerada pela Lagrangeana do modelo, depois de alguma manipulação algébrica, como

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + V'(q) = f(t).$$
(2.25)

Ainda falta-nos garantir que a nossa definição de f(t) reproduz o caráter estatístico da fenomenologia do Movimento Browniano.

Para isso, basta utilizarmos o teorema clássico de equipartição de energia e aplicá-lo às contribuições de

$$\langle q_k(0) \rangle = \bar{q}_k, \tag{2.26}$$

$$\langle \dot{q}_k(0) \rangle = \langle \dot{q}_k(0) \Delta q_k(0) \rangle = 0, \qquad (2.27)$$

$$\langle \dot{q}_k(0)\dot{q}_{k'}(0)\rangle = \frac{k_B T}{m_k}\delta_{kk'},\tag{2.28}$$

$$\langle \Delta q_k(0) \Delta q_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k \omega_k^2} \delta_{kk'}, \qquad (2.29)$$

onde $\Delta q_k(0) \equiv q_k(0) - \bar{q}_k(0)$.

Substituindo esses resultados em 2.24 ficamos com

$$\langle f(t) \rangle = 0 \tag{2.30}$$

$$\langle f(t)f(t')\rangle = 2\eta k_B T \delta(t-t'), \qquad (2.31)$$

e finalmente podemos afirmar que nosso modelo reproduz uma equação de movimento para a partícula do tipo Langevin.

A motivação por trás do modelo fenomenológico Caldeira-Leggett [2] é gerar uma descrição de um movimento browniano quântico que reproduza, no limite correto em que $\hbar \rightarrow 0$, o conhecido problema clássico. Ou seja, a questão agora gira em torno da quantização desse modelo clássico que acabamos de apresentar.

2.3 O problema quântico

Nós temos em mãos uma satisfatória descrição do problema do movimento browniano de uma partícula clássica, através da abordagem dada na última seção. Fomos capazes de modelar o problema no tratamento Lagrangeano e extrair a mesma física encontrada na equação fenomenológica de Langevin. Indo além, interessa-nos o que seria o análogo quântico desse mesmo problema. Seria possível de alguma forma quantizar o que sabemos do caso clássico, numa tentativa de sistematizar também a questão da dissipação quântica? A resposta naturalmente é sim e é o que abordaremos com detalhes a partir de agora.

A quantização do problema clássico pode ser realizada de mais de uma maneira. Uma tentativa seria diretamente, através de numa quantização canônica. Entretanto, a dificuldade

mora no fato de tratar-se de um sistema aberto, onde não há conservação de energia, caso olhemos somente para o sistema de interesse. Para resolver o impasse precisaríamos introduzir termos dependentes do tempo na Lagrangeana (ou Hamiltoniana) associada e a abordagem canônica precisaria de modificações [1].

Entre as possíveis escolhas de abordagens que obtiveram sucesso nessa tarefa está a atribuída a R. Feynman e F. Vernon em 1963 [3], que detalharemos no capítulo seguinte. Em suma, a abordagem aplica o formalismo de integrais de trajetória para efetuar a quantização, descrevendo o problema como um acoplamento entre sistema de interesse e reservatório (banho).

A abordagem de Feynman-Vernon

Obviamente, sistemas de interesse abertos, por definição, trocam energia com o ambiente. Qualquer tentativa de tratá-los deve levar em conta a não-conservação energética. Contudo, nada nos impede de encarar o problema através de uma descrição Hamiltoniana em que englobamos não somente o sistema de interesse, mas também os graus de liberdade do banho, através da decrição do universo (sistema+banho)

$$H = H_0(q, p) + H_B(q_k, p_k) + H_I(q, q_k),$$
(3.1)

em que $H_0(q, p)$ é a Hamiltoniana livre do sistema de interesse, $H_B(q_k, p_k)$ referindo-se somente ao graus de liberdade do banho e $H_I(q, q_k)$ é a Hamiltoniana de interação sistema-banho.

Na representação de Heisenberg o operador densidade em um instante t é

$$\rho(t) = e^{-iHt/\hbar} \rho(0) e^{iHt/\hbar}.$$
(3.2)

Como de costume em mecânica estatística, avalia-se a média de um operador O(q, p) genérico, definido no subespaço do sistema de interesse, através da relação

$$\langle O(q,p)\rangle = Tr_{BS}\left\{\rho(t)O\right\} = Tr_{S}\left\{\left[Tr_{B}\rho(t)\right]O\right\} = Tr_{S}\left\{\tilde{\rho}(t)O\right\},\tag{3.3}$$

onde

$$\tilde{\rho}(t) \equiv T r_B \rho(t) \tag{3.4}$$

é o chamado operador densidade reduzido, obtido tomando-se o traço nas variáveis do banho. Analogamente,

$$\tilde{\rho}_B(t) \equiv Tr_S \rho(t). \tag{3.5}$$

Em representação de coordenadas da partícula, $x \in y$, e do banho, **X** e **Y**, escrevemos o operador densidade do universo

$$\rho(x, \mathbf{X}, y, \mathbf{Y}, t) = \int \int \int \int dx' dy' d\mathbf{X}' d\mathbf{Y}' K(x, \mathbf{X}, t; x', \mathbf{X}', 0) K^*(y, \mathbf{Y}, t; y', \mathbf{Y}', 0)$$

$$\times \rho(x', \mathbf{X}', y', \mathbf{Y}', 0), \qquad (3.6)$$

onde K's são propagadores de Feynman definidos por

$$K(x, \mathbf{X}, t; x', \mathbf{X}', 0) \equiv \langle x, \mathbf{X} | e^{-iHt/\hbar} | x', \mathbf{X}' \rangle.$$
(3.7)

Aqui entrará o formalismo de integrais de trajetória, uma vez que o propagador de Feynman poderá ser escrito em termos de integrais funcionais nos caminhos do sistema e do banho.

A condição inicial para o universo é dada por

$$\rho(x', \mathbf{X}', y', \mathbf{Y}', 0) = \langle x', \mathbf{X}' | \rho(0) | y', \mathbf{Y}' \rangle$$
(3.8)

e podemos supor uma condição inicial separável para o problema, dizendo que

$$\rho(x', \mathbf{X}', y', \mathbf{Y}', 0) = \rho_S(x', y', 0)\rho_B(\mathbf{X}', \mathbf{Y}', 0).$$
(3.9)

Essa suposição não é necessária para prosseguirmos, mas é conveniente. A mesma condição inicial foi utilizada em [3] e mantivemos a sugestão. Com isso, podemos facilmente reescrever

$$\tilde{\rho}(x,y,t) = \int \int dx' dy' J(x,y,t;x',y',0) \tilde{\rho}(x',y',0), \qquad (3.10)$$

definindo J(x, y, t; x', y', 0) como o superpropagador do sistema de interesse, que tem a forma

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int \int \int d\mathbf{X}' d\mathbf{Y}' d\mathbf{X} \Biggl\{ K(x, \mathbf{X}, t; x', \mathbf{X}', 0) K^*(y, \mathbf{X}, t; y', \mathbf{Y}', 0) \\ \times \tilde{\rho}_B(\mathbf{X}', \mathbf{Y}', 0) \Biggr\}.$$
(3.11)

Repare que de fato o superpropagador nada mais é do que a função que leva a condição inicial da partícula no instante t = 0 a um tempo posterior qualquer t, carregando a informação da evolução do banho, através de uma operação de traço sobre suas variáveis finais \mathbf{X} do propagador de Feynman $K \in K^*$ e a condição inicial do banho.

Consistentemente, vemos que caso o sistema e o banho não interagissem, o superpropagador poderia então ser visto como dois propagadores de Feynman reduzidos aplicados ao subespaço do sistema de interesse, como segue

$$J(x, y, t; x', y', 0) = K_0(x, t; x', 0) K_0^*(y, t; y', 0).$$
(3.12)

Sistemas Quânticos Dissipativos

Nos últimos dois capítulos apresentamos as ferramentas necessárias para a quantização do problema do movimento browniano. A lagrangeana do modelo Caldeira-Leggett possui uma hamiltoniana associada que é escrita nos moldes da abordagem de Feynman-Vernon, ($H = H_S + H_B + H_I$). Portanto, a partir de agora, lançamos mão do modelo para efetivamente quantizar a fenomenologia clássica.

O operador densidade dinâmico reduzido

Como havíamos sugerido no capítulo anterior, a aplicação do formalismo de integrais de trajetória entra no cálculo do propagador de Feynman, conhecidamente

$$K(x, \mathbf{X}, t; x', \mathbf{X}', 0) = \int_{x'}^{x} \int_{\mathbf{X}'}^{\mathbf{X}} \mathcal{D}x(t') \mathcal{D}\mathbf{X}(t') \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[x(t'), \mathbf{X}(t')]\right\},\tag{4.1}$$

sendo

$$S[x(t'), \mathbf{X}(t')] = \int_0^t \mathcal{L}[x(t'), \mathbf{X}(t'), \dot{\mathbf{X}}(t'), \dot{\mathbf{X}}(t')] dt'$$

$$(4.2)$$

a ação do universo. Ao leitor que não está familiarizado com esse formalismo indicamos as referências [4] ou [5]. Para chegar a esse resultado faz-se um procedimento de discretização do operador evolução temporal em pequenos intervalos de tempo ("time-slicing"). Utilizando a Lagrangeana do modelo Caldeira-Legget, podemos então reescrever o superpropagador da seguinte forma

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^{x} \int_{y'}^{y} \mathcal{D}x(t') \mathcal{D}y(t') \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\tilde{S}_{0}[x(t')]\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\tilde{S}_{0}[y(t')]\right\}$$

$$\times \mathcal{F}[x(t'), y(t')].$$

$$(4.3)$$

A ação $tildeS_0$ refere-se à contribuição da ação do sistema somada com a do contra-termo. Já a função $\mathcal{F}[x(t'), y(t')]$ é o chamado funcional de influência do problema, que carrega a informação inicial do banho assim como sua interação com o sistema, tendo a forma

$$\mathcal{F}[x(t'), y(t')] \equiv \int \int \int d\mathbf{X}' d\mathbf{Y}' d\mathbf{X} \rho_B(\mathbf{X}', \mathbf{Y}', 0) \int_{\mathbf{X}'}^{\mathbf{X}} \int_{\mathbf{Y}'}^{\mathbf{X}} \mathcal{D}\mathbf{X}(t') \mathcal{D}\mathbf{Y}(t') \times \\ \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left(S_I[x(t'), \mathbf{X}(t')] - S_I[y(t'), \mathbf{Y}(t')] + S_B[\mathbf{X}(t')] - S_B[\mathbf{Y}(t')]\right)\right\}$$
(4.4)

Uma vez que as partículas do banho são osciladores harmônicos forçados, sob efeito de uma força devida ao sistema de interesse, podemos dizer que o propagador de Feynman para cada grau de liberdade do banho é dado por

$$K_{IB}^{(k)} = \sqrt{\frac{m_k \omega_k}{2\pi i \hbar \sin \omega_k t}} e^{i S_{cl}^{(k)}/\hbar}$$
(4.5)

sendo

$$S_{cl}^{(k)} = \frac{m_k \omega_k}{2 \sin \omega_k t} \Big[(X_k^2 + X'_k^2) \cos \omega_k t - 2X_k X'_k \\ - \frac{2C_k X_k}{m_k \omega_k} \int_0^t x(t') \sin \omega_k t' dt' - \frac{2C_k X_k}{m_k \omega_k} \int_0^t x(t') \sin \omega_k (t - t') dt' \\ - \frac{2C_k^2}{m_k^2 \omega_k^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' x(t') x(t'') \sin \omega_k (t - t') \sin \omega_k t'' \Big]$$
(4.6)

a ação clássica de um oscilador harmônico forçado [4].

Aqui entra outra suposição do modelo. Assumimos que os osciladores harmônicos do banho estão em equilíbrio térmico a uma tempertatura T. Através de uma simples identificação de $t \rightarrow -i\hbar/k_B T$, podemos relacionar o propagador de Feynman de cada oscilador e o respectivo operador densidade numa condição de equilibrio, escrevemos finalmente a condição inicial do banho como

$$\rho_B(\mathbf{X}', \mathbf{Y}', 0) = \prod_k \rho_B^{(k)}(X_k', Y_k', 0) =$$

$$= \prod_k \sqrt{\frac{m_k \omega_k}{2\pi \sinh(\hbar \omega_k / k_B T)}} \exp \left\{ \frac{m_k \omega_k}{2\sinh(\hbar \omega_k / k_B T)} \left[(X_k'^2 + Y_k'^2) \cosh(\hbar \omega_k / k_B T) - 2X_k' Y_k' \right] \right\}.$$
(4.7)

Agora, aproveitando que as integrais nas variáveis do banho serão todas gaussianas, após resolvê-las, (discretizando novamente o elemento de integração funcional $\mathcal{D}\mathbf{X} \in \mathcal{D}\mathbf{Y}$,) o superpropagador fica da forma

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^{x} \int_{y'}^{y} \mathcal{D}x(t') \mathcal{D}y(t') \exp \frac{i}{\hbar} \Big\{ \tilde{S}_{0}[x(t')] - \tilde{S}_{0}[y(t')] - \int_{0}^{t} \int_{0}^{\tau} d\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \alpha(\tau - \sigma) [x(\sigma) - y(\sigma)] \Big\}$$

$$\times \exp -\frac{1}{\hbar} \Big\{ \int_{0}^{t} \int_{0}^{\tau} d\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \beta(\tau - \sigma) [x(\sigma) - y(\sigma)] \Big\}.$$

$$(4.8)$$

As funções

$$\alpha(\tau - \sigma) = \sum_{k} \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \coth\left(\frac{\hbar\omega_k}{2k_B T}\right) \cos\omega_k(\tau - \sigma)$$
(4.9)

е

$$\beta(\tau - \sigma) = -\sum_{k} \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \sin \omega_k (\tau - \sigma)$$
(4.10)

são as funções de correlação temporal do modelo.

Usando novamente a densidade espectral ôhmica, essas funções têm a forma

$$\alpha(\tau - \sigma) = \frac{1}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \eta \omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \cos\omega(\tau - \sigma)$$
(4.11)

е

$$\beta(\tau - \sigma) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \eta \omega \sin \omega (\tau - \sigma) = -\frac{\eta}{\pi} \frac{d}{d(\tau - \sigma)} \int_0^\Omega d\omega \cos \omega (\tau - \sigma).$$
(4.12)

Elas representam a parte real e imaginária, respectivamente, da função de autocorrelação g(t) das variáveis do banho,

$$g(t) \equiv \frac{1}{\hbar} \left\langle Q(t)Q(0) \right\rangle_T, \qquad (4.13)$$

definida como uma média nos osciladores em equilíbrio a uma temperatura T, sendo Q(t) a representação de Heisenberg do operador $Q \equiv \sum_k C_k q_k$, uma combinação das variáveis do banho [6].

Podemos ainda prosseguir em uma manipulação dos termos

$$\frac{\eta}{\pi} \int_0^t \int_0^\tau \int_0^\Omega [x(\tau) - y(\tau)] \frac{d}{d(\tau - \sigma)} \cos \omega(\tau - \sigma) [x(\sigma) + y(\sigma)] d\tau d\sigma d\omega$$

$$= \frac{\eta \Omega}{\pi} \int_0^t [x^2(\tau) - y^2(\tau)] d\tau + \frac{\eta}{\pi} (x' + y') \int_0^t \frac{\sin \Omega \tau}{\tau} [x(\tau) - y(\tau)] d\tau$$

$$+ \frac{\eta}{\pi} \int_0^t \int_0^\tau [x(\tau) - y(\tau)] \frac{\sin \Omega(\tau - \sigma)}{\tau - \sigma} [\dot{x}(\sigma) - \dot{y}(\sigma)] d\tau d\sigma.$$
(4.14)

Dizemos que para uma frequência de corte muito alta, que serve de limite inferior para tempos típicos do problema, $t \gg \Omega^{-1}$, podemos aproximar

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin \Omega(\tau - \sigma)}{\tau - \sigma} \approx \delta(\tau - \sigma). \tag{4.15}$$

Usando essa relação, o segundo termo do lado direito de 4.14 dá-nos

$$\frac{\eta}{\pi}(x'+y')\int_0^t \frac{\sin\Omega\tau}{\tau}[x(\tau)-y(\tau)]d\tau \to \eta(x'+y')\int_0^t \delta(\tau)[x(\tau)-y(\tau)]d\tau \tag{4.16}$$

е

$$\eta(x'+y')\int_0^t \delta(\tau)[x(\tau)-y(\tau)]d\tau = \begin{cases} 0 & \text{se } t' > 0\\ \eta(x'^2-y'^2)/2 & \text{se } t' = 0. \end{cases}$$
(4.17)

Já o último termo de 4.14 fica

$$\frac{\eta}{2} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^t \delta(\tau - \sigma) [\dot{x}(\sigma) + \dot{y}(\sigma)] d\sigma.$$
(4.18)

Substituindo-se as considerações de $\Omega t \gg 1$ em 4.8 e explicitando a ação $\tilde{S}_0 = S_0 + S_{CT}$, chegamos à forma final do superpropagador do modelo Caldeira-Leggett:

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^{x} \int_{y'}^{y} \mathcal{D}x(t') \mathcal{D}y(t')$$

$$\times \exp \frac{i}{\hbar} \Big\{ S_0[x(t')] - S_0[y(t')] - M\gamma \int_0^t (x\dot{x} - y\dot{y} + x\dot{y} - y\dot{x})dt' \Big\}$$

$$\times \exp -\frac{2M\gamma}{\pi\hbar} \Big\{ \int_0^\Omega d\omega\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right) \int_0^t \int_0^\tau d\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \cos\omega(\tau - \sigma)[x(\sigma) - y(\sigma)] \Big\},$$
(4.19)

sendo $\gamma \equiv \eta/2M$ uma frequência característica do acoplamento.

Portanto, de acordo com a equação 3.10, a partir de 4.19 somos capazes de descrever a dinâmica de um sistema de interesse sob ação de um potencial genérico, bastando aplicar o superpropagador sobre a condição inicial do sistema.

Particularmente, no limite de altas temperaturas em que se toma $\operatorname{coth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right) \approx \frac{2k_BT}{\hbar\omega}$, pode-se escrever [5]

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^{x} \int_{y'}^{y} \mathcal{D}x(t') \mathcal{D}y(t')$$

 $\times \exp \frac{i}{\hbar} \Big\{ S_0[x(t')] - S_0[y(t')] - M\gamma \int_0^t (x\dot{x} - y\dot{y} + x\dot{y} - y\dot{x})dt' \Big\}$ (4.20)
 $\times \exp -\frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)]^2.$

No capítulo 6 discutiremos melhor as consequências de tal aproximação. Mas a princípio, basta sabermos que a partir dessa aproximação é possível escrever uma equação mestra para o operador densidade reduzido na forma

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2iM}\frac{\partial^2\rho}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2iM}\frac{\partial^2\rho}{\partial y^2} - \gamma(x-y)\frac{\partial\rho}{\partial x} + \gamma(x-y)\frac{\partial\rho}{\partial y} + \frac{V(x)}{i\hbar}\rho - \frac{V(y)}{i\hbar}\rho + \frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2}(x-y)^2\rho,$$
(4.21)

partindo de 4.20 aplicado num tempo infinitesimalmente pequeno.

A decoerência e pureza

Em geral, nos problemas genuinamente quânticos, lidamos com sistemas que possibilitam a existência de inúmeras superposições entre estados do espaço de Hilbert. Contudo, à medida que impomos características típicas de problemas clássicos a esses sistemas e consideramos a interação com o ambiente, a natureza parece encarregar-se de extinguir a maior parte dos estados antes acessíveis, restringindo o espaço de Hilbert a um subespaço extremamente menor.

O tratamento da dissipação quântica tornou-se há tempos uma importante base para se entender a emergência dessa classicalidade e tem sido usado por muitos como justificativa da existência de um limite do mundo quântico para o clássico. Mais à frente entraremos em detalhes nessa discussão.

5.1 O tempo de relaxação e o tempo de decoerência

Quando se estuda um sistema quântico dissipativo deve-se manter em mente que a influência do banho pode ser vista em dois efeitos diferentes. A saber, na *relaxação* do sistema de interesse, perdendo energia para o ambiente, e na *decoerência*, onde o banho age como um crivo que diminui a coerência de determinados estados. A esses dois efeitos surge naturalmente a ideia de dois tempos característicos associados, o tempo de relaxação τ_R e de decoerência τ_D . A
comparação entre esses tempos é algo de suma importância para possíveis aproximações que se possa tomar na solução de um determinado problema.

Para esclarecer a ideia, imaginemos tratarmos de um sistema fracamente dissipativo, fraco o suficiente para assumirmos o seu tempo de relaxação $\tau_R \to \infty$. No fundo, isso quer dizer que o acoplamento com o banho é fraco e é válido considerarmos que energia do sistema de interesse é praticamente conservada. Tendo em vista esse cenário, podemos sentir-nos tentados a desprezar qualquer efeito do banho. Aqui mora uma questão delicada e veremos a seguir que essa conclusão precipitada é falaciosa e ilustra bem a importância da distinção dos tempos característicos. O que veremos é que o tempo de decoerência é tipicamente muito pequeno, mesmo numa situação em que praticamente não há perda energética. Vejamos abaixo uma argumentação qualitativa para derivar essa conclusão.

Na seção 2.2, mostramos que ao modelo Caldeira-Leggett associa-se uma equação mestra para ρ na aproximação de altas temperaturas para uma partícula num potencial genérico. Especificamente, para uma partícula livre ela é dada por:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2iM}\frac{\partial^2\rho}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2iM}\frac{\partial^2\rho}{\partial y^2} - \gamma(x-y)\frac{\partial\rho}{\partial x} + \gamma(x-y)\frac{\partial\rho}{\partial y} - \frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2}(x-y)^2\rho.$$
(5.1)

Imaginemos o problema de uma partícula livre, cujo estado é descrito por dois pacotes gaussianos separados por uma distância z, cujas funções de onda individuais são dadas por:

$$\langle x|\psi_1\rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\exp{-\frac{(x-z/2)^2}{4\sigma^2}}$$
 (5.2)

e

$$\langle x|\psi_2\rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\exp{-\frac{(x+z/2)^2}{4\sigma^2}}.$$
 (5.3)

Consideremos que a distância z é um comprimento tal que seja possível notar padrões de interferência devido à superposição das funções de onda individuais e ainda $z \gg \sigma$, o que permite a distinção entre os dois pacotes no tempo inicial. Ou seja, estamos imaginando um sistema descrito por um estado de gato do tipo:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle). \tag{5.4}$$

O operador densidade inicial é então

$$\rho = \frac{1}{2} (|\psi_1\rangle \langle \psi_1| + |\psi_2\rangle \langle \psi_2| + |\psi_1\rangle \langle \psi_2| + |\psi_2\rangle \langle \psi_1|), \qquad (5.5)$$

sendo válido visualizá-lo como

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 + \rho_{int}. \tag{5.6}$$

O ρ_{int} é a parte do operador densidade a que se associa justamente os padrões de interferência dos pacotes, onde se tem a informação da coerência entre os estados $|\psi_1\rangle \in |\psi_2\rangle$.

Voltemos agora nossa atenção para a equação mestra 5.1 acima. Reparemos que à medida que nos afastamos dos elementos da diagonal do operador densidade na representação de coordenadas, a contribuição do último termo é cada vez mais sensível. A taxa de decaimento dos elementos não-diagonais será então dominada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \approx -\frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} (x-y)^2 \rho.$$
(5.7)

Com isso, o tempo de decoerência que estamos interessados será dado por

$$\tau_D^{-1} \approx \frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} \left\langle \psi_1(t) \right| (x-y)^2 \left| \psi_2(t) \right\rangle.$$
(5.8)

Pela forma que criamos nossos pacotes parados e centrados em $\pm z/2$, fixamos um comprimento importante, que nos dá como estimativa de $\langle \psi_1(t) | (x - y)^2 | \psi_2(t) \rangle \approx z^2$ para elementos nãodiagonais. Com isso, considerando a influência somente do último termo de 5.1 e sabendo que o tempo de relaxação do sistema é dado por $\tau_R = 1/\gamma$, já que se trata de um problema de partícula livre, chegamos à conclusão que o tempo de decoerência entre os dois pacotes é dado por

$$\tau_D \approx \tau_R \left(\frac{\hbar}{z\sqrt{2Mk_BT}}\right)^2 = \tau_R \left(\frac{\lambda}{z}\right)^2,$$
(5.9)

onde $\lambda \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2Mk_BT}}$ é o conhecido comprimento de onda de de Broglie.

A discrepância de ordem entre esses dois tempos característicos torna-se ainda mais evidente em sistemas macroscópicos e quando nos aproximamos do limite clássico, em que se considera $\hbar \rightarrow 0$. Mesmo num caso fracamente dissipativo, como assumimos anteriormente, a razão $\tau_D/\tau_R \to 0$, mostrando que há efeito do banho mesmo no caso em que perda de energia para o ambiente pode ser praticamente desprezada.

Toda essa análise qualitativa foi feita por Zurek em [7]. Uma demonstração muito mais rigorosa e semelhante a esse exemplo, mas para pacotes num potencial harmônico, foi dada por Caldeira e Leggett em [8], que detalharemos mais à frente e servirá de base para todos os nossos próximos cálculos nesse trabalho. Adiantamos que a conclusão é análoga: o tempo de decoerência é tipicamente muito pequeno quando comparado ao tempo de relaxação do sistema.

Apesar dessa conclusão basear-se em descrições no modelo dissipativo bem específico, o resultado é qualitativamente importante. Experimentalmente, esse comportamento do fenômeno da decoerência foi verificado em um sistema óptico por Brune et al. em [9]. No experimento o grupo foi capaz de criar um estado do tipo gato de Schrödinger de um campo coerente clássico aprisionado numa cavidade óptica com um alto fator de qualidade (indicando pequena perda de energia). Para isso, utilizou-se átomos de Rydberg (átomos de rubídio altamente excitados, tipicamente sensíveis a frequência de microondas) preparados previamente numa superposição de estados (n=51 e n=50). Esses átomos são lançados um a um para atravessar a cavidade. O campo clássico, ao perceber a presença desse átomo superposto, entra também numa superposição ao se emaranhar com o estado do átomo, uma vez que interage diferentemente com os dois estados excitados que formam a superposição. O modo do campo agora tem a característica de um gato de Schrödinger, sendo descrito por uma superposição de dois estados gaussianos, caracterizando uma diferença de fase. Através da correlação entre um segundo átomo de Rydberg de prova, o grupo conseguiu medir correlações entre os estados de pares consecutivos de átomos com considerável precisão, estimando o tempo típico em que a superposição do campo é destruída. Concluiu-se que o sistema torna-se uma mistura estatística muito tempo antes de o sistema relaxar, por imperfeições na parede da cavidade ou mesmo por interação com um vácuo imperfeito.

Muitos autores, dentre eles W. Zurek e H. Zeh[10], atualmente advogam que no fenômeno da decoerência quântica moram consequências mais fundamentais para se entender a fronteira

5. A decoerência e pureza

entre a mecânica quântica e a mecânica clássica. O problema da teoria de medida em mecânica quântica, que aparentemente não nos mostra como interpretar os resultados de um experimento quântico, cria algumas diferentes vertentes interpretativas. Alguns acreditam que seguindo o estudo do fenômeno da decoerência teríamos resolvido esse aparente impasse na construção completa da teoria quântica. A justificativa desse grupo baseia-se principalmente no que acabamos de concluir, mesmo que para uma modelagem tão específica. À medida que nos aproximamos de um sistema com características tipicamente clássicas, o tempo em que se esvaem as correlações quânticas por efeito de interação com o ambiente torna-se cada vez menor em comparação com outros tempos importantes. A nossa limitação tecnológica de medir processos tão rápidos justificaria o porquê de vermos o mundo classicamente. Haveria nesse ponto a emergência da classicalidade. O motivo de não vermos comumente uma enorme confusão de emaranhamentos e superposições quânticas dos vários graus de liberdade de um sistema macroscópico é atribuído então à impossibilidade prática de termos um sistema efetivamente isolado. Na realidade, em experimentos, principalmente no caso de se tratar de um objeto macroscópico, haverá necessariamente interação com outros graus de liberdade não-controláveis.

Por outro lado, há autores, dentre eles A. J. Leggett, que defendem que a questão fundamental de medida em mecânica quântica não deve ser respondida por uma limitação tecnológica, mas por uma questão de construção da teoria, discordando da chamada escola da decoerência. A mecânica quântica seria uma teoria incompleta à qual se deve acrescentar novas considerações para explicar a emergência de uma realidade clássica no mundo macroscópico (macrorealismo). (As críticas do autor assim como alguma revisão das diferentes vertentes interpretativas podem ser vistas na referência [11]).

Entretanto, o estudo da decoerência como um efeito dissipativo é importante por si só, mesmo que o seu papel na interpretação da mecânica ainda não seja um consenso atualmente. Seguiremos então no nosso estudo.

Superseleção de estados pelo acoplamento com o banho

Atualmente aceita-se que o banho pode ser interpretado como um medidor sobre o sistema de interesse, que faz medidas de posição continuamente. Obviamente, ele age de acordo com a Hamiltoniana de interação, que no nosso caso é dada por um acoplamento bilinear, do tipo coordenada-coordenada. De fato, o efeito do ambiente acaba sendo selecionar estados com maior estabilidade, que pouco se alteram na interação. Na base desses estados, os quais denominamos de *estados ponteiros* [12], o operador densidade tende a se tornar completamente diagonal, já que as superposições que envolvem elementos não-diagonais são extintas por ação do banho. Isto é, os autoestados de um operador que comuta com a Hamiltoniana de interação seriam de alguma forma indicadores naturais do problema.

Neste contexto, é válido perguntarmo-nos em qual base preferencial notamos o efeito da decoerência. Ou seja, em que base podemos representar o operador densidade e certamente notarmos a perda de coerência de superposições quânticas entre os estados? Obviamente, numa situação idealizada, caso pudéssemos desprezar a auto-energia do sistema de interesse em comparação com a energia de interação esperaríamos que os autoestados da Hamiltoniana de interação formassem exatamente a base de estados apontadores, no nosso caso, proporcionais aos autoestados de posição. Mas qual o efeito da auto-energia do sistema? Aqui entra o critério que definiremos a seguir atribuído a Zurek.

O crivo da previsibilidade e a emergência de classicalidade

Dado um estado inicial puro qualquer, que pode ser escrito como uma superposição de inúmeros outros estados, espera-se que sobreviverão aqueles que pouco sofrem o efeito da interação com o banho e da própria evolução gerada pela Hamiltoniana livre do sistema. Isso é, a princípio, para determinar a base preferencial estamos à procura do subespaço de Hilbert cujo projetor P comuta com a Hamiltoniana do sistema-reservatório

$$[H, P] = 0, (5.10)$$

sendo $H = H_S + H_{int}$. Ou seja, uma vez que comuta com a Hamiltonina H, a base de autoestados de P não se alteraria por efeito do banho ou da própria dinâmica do sistema, definindo os estados mais estáveis do problema. Essa seria a característica essencial para se caracterizar uma base de preferência. Como dissemos, caso pudéssemos desconsiderar a Hamiltoniana livre H_S restaríanos os autoestados do operador posição como base preferencial, uma vez que a Hamiltoniana de interação H_{int} , linear em posição, agiria diretamente nas superposições espaciais.

Porém, esse argumento ingênuo não deve mascarar a não-trivialidade de se encontrar a base preferencial nos problemas mais realísticos. É comum não conseguirmos determinar o subespaço gerado por P, tanto pela sua eventual complexidade ou até mesmo pela inexistência. Ainda assim é viável buscarmos critérios e conceitos interessantes para estudarmos quantitativamente a decoerência, como veremos a seguir.

Zurek et al. em [13] e [14] argumentaram que uma forma de determinar a base preferencial é analisar a estabilidade dos estados do espaço de Hilbert, lançando mão de algum critério que mede a perda de informação do sistema para o ambiente. De antemão, sabemos que os estados que mais se aproximam de pontos clássicos no espaço de fase são necessariamente os mais estáveis. Essa é uma conclusão natural, uma vez que um dos efeitos da interação com o ambiente é exatamente destruir as características quânticas do sistema e tornar válida, em algum momento, a abordagem clássica.

Indiretamente, isso pode ser obtido através de uma medida de pureza, que será diminuída pela interação. É uma medida da perda de informação do sistema. Essa proposta é bastante razoável, como podemos sustentar a seguir.

Podemos lançar mão da definição da entropia linear

$$s(t) = Tr\{\rho - \rho^2\} = 1 - Tr\{\rho^2\}$$
(5.11)

para quantificarmos a perda de pureza do pacote à medida que o tempo passa. Com o uso da equação mestra, para o caso fracamente dissipativo, mostra-se que

$$\dot{s} = 4DTr(\rho^2 x^2 - \rho x \rho x) - 2\gamma Tr\rho^2 \approx 4D(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2) = 4D\Delta x^2$$
(5.12)

Utilizando essa medida de pureza através da entropia linear, Zurek et al. em [13] definem um critério cunhado de crivo de previsibilidade ("predictability sieve"), cujas linhas gerais foram discutidas acima. Fazendo o uso do critério concluem que os estados coerentes em um sistema do tipo oscilador harmônico fracamente dissipativo são os estados com maior estabilidade. De fato, esse resultado fica claro ao se integrar 5.12 num período de oscilação ω_0 , numa tentativa de minimizar a entropia linear. Usando as equações de Heisenberg para o oscilador harmônico chega-se a

$$s(t = 1/\omega_0) = 4D \int_0^{2\pi/\omega_0} dt \, \langle \psi | \left((x - \langle x \rangle) \cos \omega_0 t + \frac{1}{m\omega_0} \left(p - \langle p \rangle \sin \omega_0 t \right) \right)^2 |\psi\rangle$$

= $2D \left(\Delta x^2 + \frac{\Delta p^2}{m^2 \omega_0^2} \right).$ (5.13)

Analisando essa função de um período com relação a Δx , conclui-se que o estado inicial que minimiza a entropia linear é também o estado coerente que satisfaz a mínima incerteza $(\Delta x \Delta p = \hbar/2)$ e cuja dispersão

$$\Delta x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_0}.\tag{5.14}$$

Agora vale a pena lembrarmos que o estados coerentes formam uma base (supercompleta) do espaço de Hilbert. Com isso, qualquer estado inicial pode ser expandido nessa base e o critério seria aplicável para qualquer situação inicial.

Além de se mostrar a maior estabilidade dos estados coerentes de mínima incerteza em [13] testa-se a estabilidade dos estados comprimidos. Esses estados são assim definidos porque mantêm a incerteza mínima de Heisenberg (são coerentes) mas sofrem uma compressão em alguma das dispersões, de momento ou posição. E por fim concluem que o estados coerentes gaussianos são de fato os mais robustos sob ação do ambiente.

O que nos importa principalmente é a demonstração de que a base preferencial no caso do oscilador é bem definida pelo critério do crivo de previsibilidade. De fato, analisando a solução do operador densidade dinâmico reduzido, poderemos notar a validade do critério. Na nossa análise, chegamos a resultados que corroboram com essa conclusão.

5. A decoerência e pureza

No entanto, como adiantamos, há casos em que não conseguimos definir bem a base preferencial através desse mesmo critério. Isso ocorre, por exemplo, num problema de partícula livre. Podemos rapidamente notar isso analisando as soluções da equação mestra para altas temperaturas. Savage e Walls [15] (e também Kumar em [16]) resolveram a equação mestra para partículas livres com estados iniciais do tipo onda plana e gaussiana.

O que podemos notar nessas abordagens é que há naturalmente uma tendência à diagonalização da matriz do operador densidade na base de coordenadas, entretanto a solução no espaço de momento fica rapidamente diagonal, tornando-se logo uma delta. Isso mostra que essa base seria a mais adequada para chamarmos de base ponteiro, algo que vai de encontro ao critério da previsibilidade [17], que deve ser repensado para o caso de partícula livre. Há outros critérios para se determinar a base preferencial que são discutidos em [10].

Em todos esses estudos acima citados foi utilizado o modelo de acoplamento coordenadacoordenada. Esse modelo tem a peculiaridade de ser exatamente diagonalizável para o caso de partícula livre e, através de uma transformação canônica, pode-se mostrar que o momento total do sistema é conservado [18]. Acreditamos que nessa particularidade do modelo estaria uma explicação para uma base preferencial de momento para o problema de partícula livre. Uma melhor investigação nesse tópico mostra-se como um problema interessante para futuras abordagens.

6 Pacotes Gaussianos em um Potencial Harmônico

6.1 Um pacote Gaussiano no Potencial Harmônico

Inicialmente faremos a análise da dissipação num pacote gaussiano unidimensional, seguindo a abordagem feita em [5]. Imaginemos esse pacote descrevendo um estado puro num potencial harmônico dado por $V(x) = M\omega_0^2 x^2/2$.

Nesse caso, o superpropagador 4.19 é reescrito como

$$J(x, x', t'; y, y', 0) = \int_{x'}^{x} \int_{y'}^{y} \mathcal{D}y(t') \mathcal{D}x(t') \exp{-\frac{1}{\hbar}\tilde{S}[x(\tau), y(\tau)]} \exp{-\frac{1}{\hbar}\phi[x(\tau), y(\tau)]}, \quad (6.1)$$

onde

$$\tilde{S}[x(\tau), y(\tau)] = \int_0^t \tilde{L}(x, \dot{x}, y, \dot{y}) d\tau - M\gamma \int_0^t (x\dot{x} - y\dot{y}) dt'$$
(6.2)

е

$$\tilde{L}(x, \dot{x}, y, \dot{y}) = \frac{M}{2}\dot{x}^2 - \frac{M}{2}\dot{y}^2 - \frac{M}{2}\omega_0^2 x^2 + \frac{M}{2}\omega_0^2 y^2 - M\gamma x \dot{y} + M\gamma y \dot{x}.$$
(6.3)



Figura 6.1: Pacote gaussiano num potencial harmônico

Além disso, a função ϕ é dada por

$$\phi[x(\tau), y(\tau)] = \exp -\frac{2M\gamma}{\pi\hbar} \int_0^\Omega d\nu\nu \coth\left(\frac{\hbar\nu}{2k_BT}\right) \times \int_0^t \int_0^\tau d\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \cos[\nu(\tau - \sigma)] [x(\sigma) - y(\sigma)].$$
(6.4)

O passo seguinte é analisar a contribuição do caminho clássico e vizinhanças, que mais contribuem para a integral.

O caminho clássico que minimiza \tilde{S} é aquele que satisfaz as duas equações de movimento originadas pela Euler-Lagrange aplicada a \tilde{L} , dando-nos

$$\begin{aligned} M\ddot{x}_c + 2M\gamma\dot{y}_c + M\omega_0^2 x_c &= 0\\ M\ddot{y}_c + 2M\gamma\dot{x}_c + M\omega_0^2 y_c &= 0. \end{aligned}$$
(6.5)

Fazemos a seguinte mudança de variáveis

$$q(\tau) \equiv \frac{x(\tau) + y(\tau)}{2}$$

$$\xi(\tau) \equiv x(\tau) - y(\tau).$$
(6.6)

 $\acute{\rm E}$ interessante expandirmos as integrais em torno das contribuições dos caminhos próximos

ao caminho clássico. É conveniente definirmos

$$\tilde{q}(\tau) \equiv q(\tau) - q_c(\tau)$$

$$\tilde{\xi}(\tau) \equiv \xi(\tau) - \xi_c(\tau).$$
(6.7)

As novas variáveis satisfazem

$$\ddot{q}_{c} + 2\gamma \dot{q}_{c} + \omega_{0}^{2} q_{c} = 0$$

$$\ddot{\xi}_{c} - 2\gamma \dot{\xi}_{c} + \omega_{0}^{2} \xi_{c} = 0,$$
(6.8)

com soluções

$$q_{c}(\tau) = \frac{e^{-\gamma\tau}}{\sin\omega t} \left\{ q e^{\gamma t} \sin\omega\tau + q' \sin\omega(t-\tau) \right\}$$

$$\xi_{c}(\tau) = \frac{e^{\gamma\tau}}{\sin\omega t} \left\{ \xi e^{-\gamma t} \sin\omega\tau + \xi' \sin\omega(t-\tau) \right\}$$
(6.9)

Escolhemos um modelo dissipativo assim como um problema cujas ações envolvidas são calculadas a partir de Lagrangeanas quadráticas. Portanto, a análise variacional desse problema torna-se exata, uma vez que todas as integrações funcionais em $q(\tau)$ e $\xi(\tau)$ são integrais gaussianas, que aparecem após a discretização dos caminhos (que devemos fazer, desfazendo a forma funcional de integração nos elementos $\mathcal{D}x \in \mathcal{D}y$). Após essa série de integrações gaussianas reescreve-se finalmente o superpropagador J em função das novas variáveis como:

$$J(q,\xi,t;q',\xi',0) = \exp\frac{i}{\hbar}\tilde{S}_c \exp-\frac{1}{\hbar} \left[A^{(1)}(t)\xi^2 + A^{(2)}(t)\xi\xi' + A^{(3)}(t)\xi'^2\right]G(q,\xi,t;q',\xi',0).$$
(6.10)

A ação clássica que aparece na equação acima é dada por:

$$\tilde{S}_c = K(t)(q\xi + q'\xi') - L(t)q'\xi - N(t)q\xi' - M\gamma(q\xi - q'\xi'),$$
(6.11)

onde

$$K(t) = M\omega \cot \omega t \qquad L(t) = \frac{M\omega e^{-\gamma t}}{\sin \omega t} \qquad N(t) = \frac{M\omega e^{\gamma t}}{\sin \omega t}$$
(6.12)

As funções $A^{(1)}(t)$, $A^{(2)}(t)$ e $A^{(3)}(t)$ são da forma:

$$A^{(i)}(t) = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\Omega d\nu\nu \coth\left(\frac{\hbar\nu}{2k_BT}\right) A^{(i)}_\nu(t), \qquad (6.13)$$

 sendo

$$A_{\nu}^{(1)}(t) = \frac{e^{-\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega \tau \cos \nu (\tau - \sigma) \sin \omega \sigma e^{\gamma (\tau + \sigma)} d\tau d\sigma, \qquad (6.14)$$

6. Pacotes Gaussianos em um Potencial Harmônico

$$A_{\nu}^{(2)}(t) = \frac{2e^{-2\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega \tau \cos \nu (\tau - \sigma) \sin \omega (t - \sigma) e^{\gamma (\tau + \sigma)} d\tau d\sigma, \qquad (6.15)$$

$$A_{\nu}^{(3)}(t) = \frac{1}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega (t-\tau) \cos \nu (\tau-\sigma) \sin \omega (t-\sigma) e^{\gamma(\tau+\sigma)} d\tau d\sigma.$$
(6.16)

Por fim, temos a expressão para G:

$$G(q,\xi,t;q',\xi',0) = \int_0^0 \int_0^0 D\tilde{q}(t') D\tilde{\xi}(t') \exp\frac{i}{\hbar} \tilde{S}[\tilde{q}(\tau),\tilde{\xi}(\tau)] \\ \times \exp-\frac{1}{\hbar} \phi_T[\tilde{\xi}(\tau),\tilde{\xi}(\tau)] \exp\frac{2}{\hbar} \phi_T[\xi_c(\tau),\tilde{\xi}(\tau)],$$
(6.17)

em que

$$\phi_T[f(\tau), g(\tau)] = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\Omega d\nu \nu \coth\left(\frac{\hbar\nu}{2k_BT}\right) \int_0^t \int_0^t f(\tau) \cos\nu(\tau - \sigma)g(\sigma)d\tau d\sigma.$$
(6.18)

Após um processo de integração multidimensional de gaussianas pode-se concluir que a função G possui somente dependência temporal [18]. Com isso, reescreve-se J como:

$$J(q,\xi,t;q',\xi',0) = G(t) \exp \frac{i}{\hbar} [K(t) - M\gamma] q\xi + [K(t) + M\gamma] q'\xi' - L(t)q'\xi - N(t)q\xi' \exp -\frac{1}{\hbar} \{A(t)\xi^2 + B(t)\xi\xi' + C(t)\xi'^2\}$$
(6.19)

Finalmente, podemos escrever o operador densidade ¹ desse problema, já que conhecemos o superpropagador.

$$\tilde{\rho}(q,\xi,t) = \int \int dx' dy' J(q,\xi,t;q',\xi',0) \tilde{\rho}(q',\xi',0)$$
(6.20)

Em [5] fez-se a análise somente dos termos diagonais do problema. Mas como dissemos, interessa-nos saber a forma com que os termos não-diagonais vão a zero, devido ao efeito

¹Para não carregar a notação, preferiremos omitir o "til" em cima do operador densidade reduzido nas próximas páginas. Basta vermos que as variáveis explícitas são da partícula.

dissipativo. Partindo-se então de um estado inicial puro gaussiano, pode-se escrever que:

$$\rho(q,\xi,t) = G(t) \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{\sigma^2 K_1^2(t) + 2\hbar A_1^{(3)}(t)}} \exp \left\{ \frac{N^2(t)}{2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar A_1^{(3)}(t)} \left(q - \frac{p}{N(t)}\right)^2 \right\} \\
\times \exp \left\{ \frac{A^{(1)}(t)}{\hbar} + \frac{\sigma^2 L^2(t)}{2\hbar^2} - \frac{1}{\hbar^2} \frac{\left[\sigma^2 K_1(t) L(t) - \hbar A^{(2)}(t)\right]^2}{2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar A_1^{(3)}(t)} \right\} \xi^2 \tag{6.21} \\
\times \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ K_2(t)q\xi - \frac{\sigma^2 K_1(t) L(t) - \hbar A^{(2)}(t) N(t)}{\sigma^2 K_1^2(t) + 2\hbar A_1^{(3)}(t)} \left(q - \frac{p}{N(t)}\right) \xi \right\}$$

onde

$$A_1^{(3)}(t) \equiv A^{(3)}(t) + \frac{\hbar}{8\sigma^2} \qquad K_1(t) \equiv K(t) + M\gamma \qquad K_2(t) \equiv K(t) - M\gamma \tag{6.22}$$

Uma forma de nos livrarmos do cálculo explícito de G(t) é usarmos o fato de que o traço de ρ é sempre a unidade. Com isso, fazendo $\xi = 0$ e q = 2x/2 = x, notamos facilmente que nos sobra uma gaussiana em x. Então, G(t) deve ser uma função do tempo que ao ser substituída em 6.21 retorna a normalização dessa gaussiana que descreve o estado da partícula.

Substituindo-se então G(t) em ρ ficamos finalmente com:

$$\rho(q,\xi,t) = \sqrt{\frac{N^2(t)}{2\pi(\sigma^2 K_1^2(t) + 2\hbar A_1^{(3)}(t))}} \exp\left\{\frac{N^2(t)}{2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar A_1^{(3)}(t)} \left(q - \frac{p}{N(t)}\right)^2\right\}$$

$$\times \exp\left\{\frac{A^{(1)}(t)}{\hbar} + \frac{\sigma^2 L^2(t)}{2\hbar^2} - \frac{1}{\hbar^2} \frac{\left[\sigma^2 K_1(t)L(t) - \hbar A^{(2)}(t)\right]^2}{2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar A_1^{(3)}(t)}\right\} \xi^2 \qquad (6.23)$$

$$\times \exp\frac{i}{\hbar} \left\{K_2(t)q\xi - \frac{\left[\sigma^2 K_1(t)L(t) - \hbar A^{(2)}(t)\right]N(t)}{\sigma^2 K_1^2(t) + 2\hbar A_1^{(3)}(t)} \left(q - \frac{p}{N(t)}\right)\xi\right\}.$$

Para facilitar a visualização e a discussão nosso problema é interessante definirmos

$$\rho(q,\xi,t) = \sqrt{\frac{P(t)}{\pi}} \exp\left\{P(t)\left(q - \frac{p}{N(t)}\right)^2\right\} \exp\left[-F(t)\xi^2 \exp iD(q,p,t)\xi\right], \tag{6.24}$$

onde definimos

$$P(t) \equiv \frac{N^2(t)}{2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar A_1^{(3)}(t)},\tag{6.25}$$

$$F(t) \equiv \frac{A^{(1)}(t)}{\hbar} + \frac{\sigma^2 L^2(t)}{2\hbar^2} - \frac{1}{\hbar^2} \frac{\left[\sigma^2 K_1(t) L(t) - \hbar A^{(2)}(t)\right]^2}{2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar A_1^{(3)}(t)},\tag{6.26}$$

$$D(q, p, t) \equiv \left\{ \frac{K_2(t)}{\hbar} q - \frac{\left[\sigma^2 K_1(t) L(t) - \hbar A^{(2)}(t)\right] N(t)}{\hbar \sigma^2 K_1^2(t) + 2\hbar^2 A_1^{(3)}(t)} \left(q - \frac{p}{N(t)}\right) \right\}.$$
 (6.27)

Fazendo $\xi = 0 \text{ em } 6.24 \text{ ficamos com}$

$$\rho(x,0,t) = \sqrt{\frac{P(t)}{\pi}} \exp\left\{P(t)\left(x - \frac{p}{N(t)}\right)^2\right\}$$
(6.28)

que claramente é uma gaussiana normalizada, como já adiantamos, de largura $\sigma^2(t) = 1/2P(t)$ e deslocamento dado por

$$\bar{x}(t) \equiv \frac{p}{N(t)} = \frac{p}{M\omega} \sin \omega t e^{-\gamma t}.$$
(6.29)

No tempo t = 0 o pacote está centrado na origem, de acordo com o estado inicial que preparamos. É interessante vermos que 6.28 descreve o movimento de um oscilador hamônico amortecido clássico. No regime subamortecido ($\omega_0 > \gamma$) seu movimento é senoidal, oscilando numa frequência ω e sendo envelopado por uma exponencial que indica a relaxação do pacote, associada à perda energia cinética para o meio que leva o pacote a novamente centrar-se na origem. Esse tempo característico de relaxação do pacote é definido como $\tau_R \equiv 1/\gamma$ e será uma importante escala de comparação para os nossos objetivos.

Para o caso sobreamortecido ($\omega_0 < \gamma$) devemos fazer a mudança $\omega \to i\omega$ em 6.29, com isso,

$$x_0(t) = \frac{p}{N(t)} = \frac{p}{M\omega} \sinh \omega t e^{-\gamma t} = \frac{p}{2M\omega} \left\{ e^{(\omega-\gamma)t} - e^{-(\omega+\gamma)t} \right\}.$$
 (6.30)

Para o limite superamortecido em que $\gamma \gg \omega_0$ é fácil vermos que o tempo de relaxação será agora dado po $\tau_R = 2\gamma/\omega_0^2$. Basta notarmos que a primeira exponencial decai no tempo com um fator $\omega - \gamma \approx -\omega_0^2/2\gamma$ é muito maior que a rápida contribuição da segunda exponencial, que decai com $-(\omega + \gamma) \approx 2\gamma$.

Finalmente, para medir a pureza do pacote, de 6.24 podemos facilmente tomar o traço de ρ^2 , sendo

$$Tr\rho^{2} = Tr\left\{\int_{-\infty}^{\infty} dz\rho(x,z,t)\rho(z,y,t)\right\} = \sqrt{\frac{P(t)}{F(t)}}.$$
(6.31)

6.2 Decoerência de dois pacotes gaussianos num potencial harmônico

Através dessa abordagem que acabamos de mostrar na seção anterior, em [8] calculou-se o operador densidade dinâmico reduzido para dois pacotes gaussianos num potencial harmônico, apresentando a forma explícita de ρ_{int} . Os pacotes são preparados de tal forma que a distância entre seus centros de massa z é muito maior que suas larguras σ , para garantir que são inicialmente distinguíveis.

A partir de agora resumimos o analisado nesse trabalho, o que servirá de base para a nossa abordagem para o problema de um único pacote mais à frente.

O operador densidade no instante inicial é dado por $\rho(x, y, 0) = \psi^*(x)\psi(y)$, onde

$$\psi(x) \propto \left\{ \exp{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} + \exp{-\frac{(x-z)^2}{4\sigma^2}} \right\}$$
 (6.32)

representa o estado inicial de dois pacotes cujos centros distam z.



Figura 6.2: Pacote gaussiano num potencial harmônico

Com isso, podemos escrever o termo de interação do operador densidade no instante inicial como

$$\rho_{int} \propto \left\{ \exp{-\frac{x^2 + (y-z)^2}{4\sigma^2}} + \exp{-\frac{y^2 + (x-z)^2}{4\sigma^2}} \right\}.$$
(6.33)

O interessante será analisarmos exatamente a evolução temporal desse termo e vermos com que taxa seus elementos decaem. Naturalmente, visto que ρ é decomposto em

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 + \rho_{int},\tag{6.34}$$

todos os operadores densidade reduzido em 6.34 evoluem sob ação do mesmo superpropagador, explícito em 6.19. Isso nos permite escrever que

$$\rho_{int}(x, y, t) = \int \int dx' dy' J(x, y, t; x', y', 0) \rho_{int}(x', y', 0).$$
(6.35)

Para notarmos a decoerência (atenuação dos padrões de interferência) nesse problema bastará analisarmos a evolução do termo diagonal de $\rho_{int}(x, y, t)$. Fisicamente, pela construção do sistema e natureza do acoplamento, podemos nos assegurar que as coerências que envolvam elementos mais distantes da diagonal terão suas contribuições atenuadas muito antes dos termos diagonais. Isso se deve ao fato de que, para um tempo t qualquer, a intensidade da atenuação é sempre inversamente proporcional a essa distância, o que pode ser concluído analisando a forma completa de $\rho_{int}(x, y, t)$ [8].

Os termos diagonais serão portanto dados por

$$\rho_{int}(x, x, \theta) \propto \cos\left[\frac{1}{2\sigma(\theta)[R + S\cot(S\theta)]} \left\{ [x - z(\theta)]^2 - x^2 \right\} \right] \times \\ \exp\left[-\frac{x^2}{4\sigma^2(\theta)} \exp\left[-\frac{[x - z(\theta)]^2}{4\sigma^2(\theta)} \exp\left[-\frac{z^2 R I_R(\theta)}{8\sigma^2 Q(\theta)}\right] \right] \right]$$
(6.36)

com as definições

$$\omega^2 \equiv \omega_0^2 - \gamma^2 \qquad \theta \equiv \omega_0 t \qquad \sigma^2 \equiv \frac{\hbar}{2M\omega_0},\tag{6.37}$$

$$R \equiv \frac{\gamma}{\omega_0} \qquad S \equiv \frac{\omega}{\omega_0} \qquad \kappa \equiv \frac{\hbar\omega_0}{2k_B T},\tag{6.38}$$

$$z(\theta) \equiv z \left[\frac{R\sin(S\theta)}{S} + \cos(S\theta) \right] \exp(-R\theta), \tag{6.39}$$

$$C_R(\lambda,\theta) \equiv \frac{1}{\sin^2(S\theta)} \int_0^\theta \int_0^\theta \sin\left[S(\theta-\theta_1)\right] \cos\left[\lambda(\theta_1-\theta_2)\right] \sin\left[S(\theta-\theta_2)\exp\left[R(\theta_1+\theta_2)\right]d\theta_1d\theta_2,$$
(6.40)

$$I_R \equiv \frac{4}{\pi} \int_0^{\lambda_c} d\lambda C_R(\lambda, \theta) \lambda \coth(\kappa\lambda), \ Q(\theta) \equiv 1 + RI_R(\theta) + (R + S\cot\theta))^2, \tag{6.41}$$

$$\sigma^{2}(\theta) \equiv \frac{\sigma^{2}Q(\theta)\sin^{2}(S\theta)\exp\left(-2R\theta\right)}{S^{2}}.$$
(6.42)

Devemos fazer a mudança $\omega^2 \to \omega^2 \equiv \gamma^2 - \omega_0^2$ e $S \to iS$ para o caso sobreamortecido.

Repare que para a análise da perda de coerência não precisamos conhecer explicitamente a normalização de ρ , importa-nos somente os termos exponenciais. A equação 6.36 pode ser então vista como

$$\rho_{int} \propto \sqrt{\rho_1(x,\theta)} \sqrt{\rho_2(x,\theta)} \cos \phi(x,\theta) \exp\left[-\frac{z^2 R I_R(\theta)}{8\sigma^2 Q(\theta)}\right].$$
(6.43)

É exatamente a exponencial em 6.43 que age atenuando os padrões de interferência. Seu fator de atenuação nos dará o tempo característico envolvido na decoerência dos dois pacotes.

Resolvendo a integral $C_R(\lambda, \theta) \sin^2(S\theta)$ temos

$$C_{R}(\lambda,\theta)\sin^{2}(S\theta) = \frac{1}{R^{4} + 2R^{2}(\lambda^{2} + S^{2}) + (S^{2} - \lambda^{2})^{2}} \left\{ S^{2}e^{2R\theta} + [R\sin(S\theta) + S\cos^{2}(S\theta)]^{2} - [2S^{2}\cos(S\theta) + 2RS\sin(S\theta)]e^{R\theta}\lambda\cos(\lambda\theta) + 2S\sin(S\theta)e^{R\theta}\lambda - \sin^{2}(S\theta)\lambda^{2} \right\}$$

$$(6.44)$$

Usando as definições de R e S vemos que $R^2 - S^2 = 2R^2 - 1$ e $R^2 + S^2 = 1$, vemos que

$$R^{4} + 2R^{2} \left(\lambda^{2} + S^{2}\right) + \left(S^{2} - \lambda^{2}\right)^{2} = \lambda^{4} + \left(S^{2} + R^{2}\right)^{2} + 2\lambda^{2} (R^{2} - S^{2})$$

= $(\lambda^{2} - 1)^{2} + 4R^{2} \lambda^{2}.$ (6.45)

É interessante então reescrevermos

$$RI_{R}(\theta)\sin^{2}(S\theta) = \left[\frac{S^{2}e^{2R\theta}}{\pi} + \frac{[R\sin(S\theta) + S\cos^{2}(S\theta)]^{2}}{\pi}\right]I(0) - \frac{2S^{2}\cos(S\theta) + 2RS\sin(S\theta)}{\pi}e^{R\theta}I(\theta) + \frac{2S}{\pi}\sin(S\theta)e^{R\theta}\frac{dI(\theta)}{d\theta} (6.46) - \frac{\sin^{2}(S\theta)}{\pi}\frac{d^{2}I(\theta)}{d\theta^{2}}\Big|_{\theta=0},$$

sendo que

$$I(\theta) \equiv \int_0^{\lambda_c} d\lambda \frac{4R\lambda}{(\lambda^2 - 1)^2 + 4R^2\lambda^2} \coth(\kappa\lambda)\cos(\lambda\theta)$$
(6.47)

O procedimento agora é aproximar a $I(\theta)$ para temperaturas altas e baixas e resolvê-la exatamente. Com isso, poderemos linearizar a função

$$F(\theta) \equiv \frac{z^2 R I_R(\theta)}{8\sigma^2 Q(\theta)}.$$
(6.48)

O elemento diagonal do operador densidade reduzido de interação

$$\tilde{\rho}_{int}(x, x, t) \propto \exp{-F(\theta)z^2} \approx \exp{-\Gamma t},$$
(6.49)

onde encotramos uma frequência característica de decoerência Γ , linearizando a função do tempo $F(\theta)$, o que por fim nos define um tempo de decoerência

$$\tau_D = \Gamma^{-1}.\tag{6.50}$$

Em suma, os resultados obtidos foram

• Para altas temperaturas:

$$\tau_D = \begin{cases} \frac{1}{\gamma} \frac{\hbar\omega_0}{2k_B T} \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 = \tau_R \frac{\hbar\omega_0}{2k_B T} \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2, & \text{se } \gamma \ll \omega_0 \\ \frac{2\gamma}{\omega_0^2} \frac{\hbar\omega_0}{2k_B T} \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 = \tau_R \frac{\hbar\omega_0}{2k_B T} \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2, & \text{se } \gamma \gg \omega_0 \end{cases}$$
(6.51)

• Para o limite de baixas temperaturas:

6. Pacotes Gaussianos em um Potencial Harmônico

$$\tau_D = \begin{cases} \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 = \tau_R \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2, & \text{se } \gamma \ll \omega_0 \\ \frac{2\gamma}{\omega_0^2} \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 = \tau_R \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2, & \text{se } \gamma \gg \omega_0. \end{cases}$$
(6.52)

Uma vez que $\sigma/z \ll 1$ e, no caso de temperaturas altas, $\hbar\omega_0/2k_BT \ll 1$, nota-se claramente que os tempos de decoerência são muito menores do que os tempos de relaxação de cada caso de acoplamento ($\tau_R = 1/\gamma$ e $\tau_R = 2\gamma/\omega_0^2$ para o subamortecimento e superamortecimento, respectivamente).

Cabe agora nos perguntarmos o que acabamos de definir como decoerência. Vimos ser perdida a coerência que se refere àquela entre os dois estados iniciais e não à *coerência interna* dos pacotes. Ou seja, na escala de tempo τ_D vemos a interferência entre os estados iniciais $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ sendo extinta pela ação do banho. Caso escrevêssemos a matriz do operador densidade dos dois pacotes juntos na base de coordenadas veríamos, nessa escala de tempo, uma forma no mínimo bloco-diagonal. No mínimo porque nos resta saber em que escala de tempo τ_D^{int} ocorre a decoerência interna de cada pacote. Caso este tempo seja de ordem menor ou igual ao tempo de decoerência τ_D entre os dois pacotes, veríamos uma clara tendência de diagonalização da matriz densidade em coordenadas nessa escala de tempo. É essa questão que nos propomos esclarecer, com o cálculo explícito, como realizado em [8].

6.3 Decoerência Interna de um Pacote Gaussiano

Como estamos interessados na decoerência interna do pacote gaussiano, o termo que nos convém de 6.23 é a segunda exponencial, que domina o decaimento dos elementos não-diagonais do operador densidade. Comparando-se com a análise encontrada em [8], que resumimos na seção anterior, seria o análogo à exponencial que age na interferência dos dois pacotes no potencial harmônico. Essa modulação não-diagonal do operador densidade reduzido de um pacote leva à quase completa diagonalização num tempo característico de decoerência.

A seguir, utilizamos todas as definições apresentadas na subseção anterior para o caso dos dois pacotes.

O fator de atenuação que nos dará então esse tempo de decoerência interna será obtido da

linearização de

$$F(t)\xi^{2} \equiv \left\{\frac{A^{(1)}(t)}{\hbar} + \frac{\sigma^{2}L^{2}(t)}{2\hbar^{2}} - \frac{1}{\hbar^{2}}\frac{\left[\sigma^{2}K_{1}(t)L(t) - \hbar A^{(2)}(t)\right]^{2}}{2\sigma^{2}K_{1}^{2}(t) + 4\hbar A_{1}^{(3)}(t)}\right\}\xi^{2}.$$
(6.53)

Nosso objetivo será apresentar a forma de F(t) para variados limites desse problema, nos casos fraca e fortemente dissipativos.

Cálculo das funções $A^{(i)}(t)$

Para obtermos a expressão completa de F(t) devemos calcular as funções do tempo

$$A^{(i)}(t) = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\Omega d\nu\nu \coth\left(\frac{\hbar\nu}{2kT}\right) A_{\nu}^{(i)}(t), \qquad (6.54)$$

 com

$$A_{\nu}^{(1)}(t) = \frac{2e^{-2\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^\tau d\tau d\sigma \sin \omega \tau \cos \nu (\tau - \sigma) \sin \omega \sigma e^{\gamma(\sigma + \tau)}$$
(6.55)

$$A_{\nu}^{(2)}(t) = \frac{4e^{-\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^\tau d\tau d\sigma \sin \omega \tau \cos \nu (\tau - \sigma) \sin \omega (t - \sigma) e^{\gamma (\sigma + \tau)}$$
(6.56)

$$A_{\nu}^{(3)}(t) = \frac{2}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^\tau d\tau d\sigma \sin \omega (t-\tau) \cos \nu (\tau-\sigma) \sin \omega (t-\sigma) e^{\gamma(\sigma+\tau)}.$$
 (6.57)

Seguiremos o mesmo procedimento que foi aplicado em [8]. As funções $A^{(i)}(t) \in A_{\nu}(t)$ podem ser reescritas como $A^{(i)}(\theta) \in A^{(i)}(\lambda, \theta)$ da seguinte forma, mantendo as definições da seção 6.2:

$$A^{(i)}(\theta) = \frac{M\omega_0 R}{\pi} \int_0^{\lambda_c} d\lambda \lambda \coth(\kappa\lambda) A^{(i)}(\lambda,\theta), \qquad (6.58)$$

em que

$$A^{(1)}(\lambda,\theta) = \frac{e^{-2R\theta}}{\sin^2(S\theta)} \int_0^\theta \int_0^\theta \sin(S\theta_1) \cos\left[\lambda(\theta_1 - \theta_2)\right] \sin(S\theta_2) \exp\left[R(\theta_1 + \theta_2)\right] d\theta_1 d\theta_2, \quad (6.59)$$

$$A^{(2)}(\lambda,\theta) = \frac{2e^{-R\theta}}{\sin^2(S\theta)} \int_0^\theta \int_0^\theta \sin(S\theta_1) \cos\left[\lambda(\theta_1 - \theta_2)\right] \sin\left[S(\theta - \theta_2)\right] \exp\left[R(\theta_1 + \theta_2)\right] d\theta_1 d\theta_2,$$
(6.60)

$$A^{(3)}(\lambda,\theta) = \frac{1}{\sin^2(S\theta)} \int_0^\theta \int_0^\theta \sin\left[S(\theta-\theta_1)\right] \cos\left[\lambda(\theta_1-\theta_2)\right] \sin\left[S(\theta-\theta_2)\right] \exp\left[R(\theta_1+\theta_2)\right] d\theta_1 d\theta_2.$$
(6.61)

Repare que nossa função $A^{(3)}(\lambda, \theta)$ é exatamente a $C_R(\lambda, \theta)$ definida na seção 6.2 e $A^{(3)}(\theta) \sin^2(S\theta)$ pode ser expandida da mesma forma que $I_R \sin^2(S\theta)$. Façamos o mesmo para as funções $A^{(1)}$ e $A^{(2)}$.

Resolvendo as integrais envolvidas em $A^{(1)}(\theta) \sin^2(S\theta) \in A^{(2)}(\theta) \sin^2(S\theta)$ ficamos com

$$A^{(1)}(\lambda,\theta)\sin^{2}(S\theta) = \frac{1}{[R^{2} + (S-\lambda)^{2}][R^{2} + (S+\lambda)^{2}]} \left\{ S^{2}e^{-2R\theta} + [R\sin(S\theta) - S\cos(S\theta)]^{2} + e^{-R\theta}2S[R\sin(S\theta) - S\cos(S\theta)]\cos(\lambda\theta) - e^{-R\theta}2S\sin(S\theta)\lambda\sin(\lambda\theta) + \sin^{2}(S\theta)\lambda^{2} \right\},$$

$$(6.62)$$

$$A^{(2)}(\lambda,\theta)\sin^{2}(S\theta) = \frac{1}{2\left[R^{4} + (S^{2} - \lambda^{2})^{2} + 2R^{2}(S^{2} + \lambda^{2})\right]} \left\{ 4\left[RS\sin(S\theta)\sinh(R\theta) - S^{2}\cos(S\theta)\cosh(R\theta)\right] + \left[3 - 4R^{2} + \cos(2S\theta)\right]\cos(\lambda\theta) + 4S\sin(S\theta)\cos(S\theta)\lambda\sin(\lambda\theta) \quad (6.63) - 2\sin^{2}(S\theta)\lambda^{2}\cos(\lambda\theta) \right\}$$

$$A^{(3)}(\theta,\lambda)\sin^{2}(S\theta) = \frac{1}{R^{4} + 2R^{2}(\lambda^{2} + S^{2}) + (S^{2} - \lambda^{2})^{2}} \left\{ S^{2}e^{2R\theta} + [R\sin(S\theta) + S\cos(S\theta)]^{2} - 2S[S\cos(S\theta) + R\sin(S\theta)]e^{R\theta}\cos(\lambda\theta) - 2S\sin(S\theta)e^{R\theta}\lambda\sin(\lambda\theta) + \sin^{2}(S\theta)\lambda^{2} \right\}$$

$$(6.64)$$

Novamente, pelas definições de $R \in S$ podemos reescrever os denominadores do lado direito das equações acima como $[(\lambda^2 - 1)^2 + 4R^2\lambda^2]$ e reutilizarmos a definição de $I(\theta)$ em 6.47. Finalmente, substituindo as equações anteriores em 6.58 temos

$$A^{(1)}(\theta) = \frac{M\omega_0}{4\sin^2(S\theta)} \left\{ \left[\frac{S^2 e^{-2R\theta}}{\pi} + \frac{[R\sin(S\theta) - S\cos(S\theta)]^2}{\pi} \right] I(0) + \frac{e^{-R\theta} 2S[R\sin(S\theta) - S\cos(S\theta)]}{\pi} I(\theta) + \frac{e^{-R\theta} 2S\sin(S\theta)}{\pi} \frac{dI(\theta)}{d\theta} - \frac{\sin^2(S\theta)}{\pi} \frac{d^2I(\theta)}{d\theta^2} \Big|_{\theta=0} \right\},$$
(6.65)

$$A^{(2)}(\theta) = \frac{M\omega_0}{4\sin^2(S\theta)} \left\{ 2 \left[\frac{RS\sin(S\theta)\sinh(R\theta)}{\pi} - \frac{S^2\cos(S\theta)\cosh(R\theta)}{\pi} \right] I(0) + \frac{2S^2 - \sin^2(S\theta)}{\pi} I(\theta) - \frac{2S\sin(S\theta)\cos(S\theta)}{\pi} \frac{dI(\theta)}{d\theta} + \frac{\sin^2(S\theta)}{\pi} \frac{d^2I(\theta)}{d\theta^2} \right\},$$
(6.66)

$$A^{(3)}(\theta) = \frac{M\omega_0}{4\sin^2(S\theta)} \left\{ \left[\frac{S^2 e^{2R\theta}}{\pi} + \frac{[R\sin(S\theta) + S\cos(S\theta)]^2}{\pi} \right] I(0) - \frac{e^{R\theta} [2S^2\cos(S\theta) + 2RS\sin(S\theta)]}{\pi} I(\theta) + \frac{e^{R\theta} 2S\sin(S\theta)}{\pi} \frac{dI(\theta)}{d\theta} - \frac{\sin^2(S\theta)}{\pi} \frac{d^2I(\theta)}{d\theta^2} \Big|_{\theta=0} \right\}.$$
(6.67)

Lembremos que a função

$$I(\theta) \equiv \int_0^{\lambda_c} d\lambda \frac{4R\lambda}{(\lambda^2 - 1)^2 + 4R^2\lambda^2} \coth(\kappa\lambda)\cos(\lambda\theta).$$
(6.68)

Com

$$A_{1}^{(3)}(\theta) \equiv A^{(3)}(\theta) + \frac{\hbar}{8\sigma^{2}}$$

$$L(\theta) = \frac{M\omega_{0}Se^{-R\theta}}{\sin S\theta}, \quad K(\theta) = M\omega_{0}S \cot S\theta \qquad (6.69)$$

$$K_{1}(\theta) \equiv K(\theta) + M\omega_{0}R, \quad K_{2}(\theta) \equiv K(\theta) - M\omega_{0}R$$

o fator de atenuação ${\cal F}(t)$ será reescrito como

$$F(\theta) \equiv \frac{1}{4\hbar \sin^2(S\theta)} \Biggl\{ 4A^{(1)}(\theta) \sin^2(S\theta) + \frac{2M^2 \sigma^2 \omega_0^2}{\hbar} S^2 e^{-2R\theta} - \frac{\left[M\omega_0 e^{-R\theta} S[S\cos(S\theta) + R\sin(S\theta)] - 2A^{(2)}(\theta) \sin^2(S\theta) \right]^2}{M\omega_0 [S\cos(S\theta) + R\sin(S\theta)]^2 + \frac{1}{2\sigma^2} \sin^2(S\theta) + 4A^{(3)}(\theta) \sin^2(S\theta)} \Biggr\},$$
(6.70)

Nos nossos cálculos utilizaremos a largura do pacote

$$\sigma^2 \equiv \frac{\hbar}{2M\omega_0}.\tag{6.71}$$

Essa suposição que pouco afetava o caso dos dois pacotes em [8] agora é crucial para o nosso de um pacote. O motivo é bem claro, se compararmos as duas funções $F(\theta)$. No primeiro problema, a largura do pacote é somente um fator multiplicativo na forma da razão $(z/\sigma)^2$ em 6.48 e não há dependência de σ nas funções do tempo que compõem $F(\theta)$. No segundo, $F(\theta)$ é dada por 6.70 e suas funções do tempo dependem de σ de uma maneira não-trivial. Intuitivamente, isso é de se esperar, uma vez que o efeito que estamos analisando agora diz respeito à estrutura interna do pacote.

Entretanto, essa escolha não foi arbitrária e usamos o resultado de [13] a que nos referimos no capítulo anterior. A saber, num potencial harmônico, esse estado gaussiano de mínima incerteza é mostrado ser o mais robusto sob efeitos do banho num acoplamento fraco e como consequência apresentará os maiores tempos de decoerência. Uma abordagem mais geral pode ser feita, usando estados coerentes do tipo comprimido, relaxando essa condição de σ que impomos.

Novamente, o problema resume-se agora à análise da função $I(\theta)$ em vários regimes. Uma vez que conhecemos seu comportamento, bastará calcularmos as funções A's e substituirmos em 6.70. Feito isso, expandiremos $F(\theta)$ e tomaremos a contribuição do termo de ordem dominante em θ para estimarmos o tempo de decoerência nos diferentes casos.

Limite de altas temperaturas

Esse limite caracteriza-se por $\hbar\omega_0 \ll k_B T$. Isso quer dizer que $\kappa = \hbar\omega_0/2k_B T \ll 1$. Podemos assumir que

$$\coth(\kappa\lambda) \approx \frac{1}{\kappa\lambda}.$$
(6.72)

Esse resultado é válido para o caso, em geral fisicamente irrealista, em que $\hbar\Omega < k_B T$, já que nessa condição o primeiro termo da expansão da cotangente hiperbólica para κ pequeno será sempre dominante. Essa expansão ainda é uma boa aproximação para a situação em que $\hbar\Omega \gg k_B T$, caso estejamos num regime em que R < 1. Entretanto, para o problema $R \gg 1$ a aproximação só se aplica para $\hbar\Omega < 2k_B T$.

Fazendo-se essa aproximação estamos dizendo que o sistema é descrito por uma equação mestra do tipo 4.21. O operador densidade reduzido que é solução dessa equação não satisfaz o critério de positividade de um operador estatístico. A origem dessa inconsistência de natureza matemática é discutida por Diósi em [6], onde se toma a mais o segundo termo da expansão 6.72. Isso garante a positividade do operador densidade e permite-nos escrever uma equação mestra para médias e altas temperaturas. Entretanto, para o nosso caso, a inclusão do segundo termo traria complicações para resolver o problema analiticamente, mas sugerimos o uso desses resultados de [6] para futuras generalizações. A maior parte das análises via equação mestra feitas na literatura parte de 4.21 sem maiores considerações sobre esse limite de validade.

Resolvamos a integral

$$I(\theta) \approx \frac{4R}{\kappa} \int_0^{\lambda_c} d\lambda \frac{\cos(\lambda\theta)}{(\lambda^2 - 1)^2 + 4R^2\lambda^2},$$
(6.73)

tomando o limite $\lambda_c \to \infty$, por integração via resíduos.

Ao calcularmos as raízes do denominador encontramos quatro pólos de ordem 1. A saber, $\pm \alpha \ e \ \pm \beta$, sendo

$$\alpha = \cos\frac{\phi}{2} + i\sin\frac{\phi}{2} \quad e \quad \beta = \cos\frac{\phi}{2} - i\sin\frac{\phi}{2}, \tag{6.74}$$

$$\phi = \tan^{-1} \left(\frac{2R\sqrt{1-R^2}}{1-2R^2} \right). \tag{6.75}$$

Portanto,

$$I(\theta) \approx \frac{R}{\kappa} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \frac{e^{i\theta\lambda}}{(\lambda^2 - 1)^2 + 4R^2\lambda^2} + \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \frac{e^{-i\theta\lambda}}{(\lambda^2 - 1)^2 + 4R^2\lambda^2} \right\}.$$
 (6.76)

Na primeira integral, para garantirmos a sua convergência, (já que $\theta > 0$) escolhemos o caminho de integração semi-circular fechado que passa pelo semi-plano superior do plano complexo, envolvendo os pólos $\alpha \in -\beta$. Definindo,

$$f(z) \equiv \frac{e^{i\theta z}}{(z^2 - \alpha^2)(z^2 - \beta^2)}$$
(6.77)

e tomando o limite do raio ${\cal R}$ desse caminho indo para infinito, escrevemos

$$\oint f(z)dz = \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \frac{e^{i\theta\lambda}}{(\lambda^2 - 1)^2 + 4R^2\lambda^2} = 2\pi \left(\operatorname{Res} f(z) \Big|_{z=\alpha} + \operatorname{Res} f(z) \Big|_{z=-\beta} \right)$$

$$= \frac{\pi}{(\alpha^2 - \beta^2)} \left\{ \frac{e^{i\theta\alpha}}{\alpha} + \frac{e^{-i\theta\beta}}{\beta} \right\}.$$
(6.78)

Analogamente, para a segunda integral, integrando agora pelo semi-plano inferior e sendo agora

$$f(z) \equiv \frac{e^{-i\theta z}}{(z^2 - \alpha^2)(z^2 - \beta^2)},$$
(6.79)

ficamos com

$$\oint f(z)dz = \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \frac{e^{-i\theta\lambda}}{(\lambda^2 - 1)^2 + 4R^2\lambda^2} = 2\pi \left(\operatorname{Res} f(z) \Big|_{z=-\alpha} + \operatorname{Res} f(z) \Big|_{z=\beta} \right)$$

$$= \frac{\pi}{(\alpha^2 - \beta^2)} \left\{ \frac{e^{i\theta\alpha}}{\alpha} + \frac{e^{-i\theta\beta}}{\beta} \right\}.$$
(6.80)

Desta maneira,

$$I(\theta) \approx \frac{2\pi R}{\kappa} \frac{i}{\alpha^2 - \beta^2} \left\{ \frac{e^{i\theta\alpha}}{\alpha} + \frac{e^{-i\theta\beta}}{\beta} \right\}.$$
 (6.81)

Reparemos agora que $\alpha=\beta^*$ e portanto podemos dizer que

$$I(\theta) \approx \frac{2\pi R}{\kappa} \frac{1}{\mathrm{Im}\{\alpha^2\}} \mathrm{Re}\left\{\frac{e^{i\theta\alpha}}{\alpha}\right\}.$$
 (6.82)

Vejamos que pela equação 6.75 e o fato de estarmos interessados no valor principal da integral, podemos tomar

$$\sin \phi = 2R\sqrt{1-R^2} \ e \ \cos \phi = 1-2R^2 \implies \sin \frac{\phi}{2} = R \ e \ \cos \frac{\phi}{2} = \sqrt{1-R^2}.$$
 (6.83)

Lembrando-nos ainda que $R^2 + S^2 = 1$, escrevemos

$$\alpha = \cos\frac{\phi}{2} + i\sin\frac{\phi}{2} = S + iR. \tag{6.84}$$

Finalmente, voltando a 6.82, temos

$$I(\theta) \approx \frac{\pi}{\kappa S} e^{-R\theta} [S\cos\left(S\theta\right) + R\sin\left(S\theta\right)].$$
(6.85)

Então, através da relação $R^2 + S^2 = 1$ podemos facilmente calcular as derivadas primeira e segunda de $I(\theta)$, dadas por

$$\frac{1}{\pi}\frac{dI(\theta)}{d\theta} = -\frac{e^{-R\theta}\sin\left(S\theta\right)}{\kappa S} \quad e \quad \frac{1}{\pi}\frac{d^2I(\theta)}{d\theta^2} = \frac{e^{-R\theta}}{\kappa S}\left[R\sin(S\theta) - S\cos(S\theta)\right].$$
(6.86)

Para reforçar o que dissemos no início da seção, o caso físico consistente que nos interessa é $\hbar\Omega \gg k_BT \gg \hbar\omega_0$. Vimos que a aproximação $\lambda \coth(\kappa\lambda) \approx 1/\kappa$ vale para $\lambda_c < 1/\kappa$. Para altas frequências, a função $\lambda \coth(\kappa\lambda) \rightarrow \lambda$ e a aproximação deveria ser corrigida para garantir o comportamento linear. Mas reparemos que o denominador no integrando de $I(\theta)$ decai com um termo de ordem λ^4 para valores altos de frequência. Isso nos permite dizer que a aproximação ainda é razoável, uma vez que o erro seria suprimido por esse comportamento altamente nãolinear do denominador, mesmo para valores de R consideravelmente grandes. Entretanto, para $R \gg 1$ (limite de forte dissipação) nossa aproximação deve ser repensada.

Podemos agora substituir 6.85 e 6.86 nas expressões das A's. Ficaremos com

$$A^{(1)}(\theta)\sin^2(S\theta) = \frac{M\omega_0}{4\kappa} \left\{ [R\sin(S\theta) - S\cos(S\theta)]^2 + \sin^2(S\theta) - e^{-2R\theta}S^2 \right\},\tag{6.87}$$

$$A^{(2)}(\theta)\sin^{2}(S\theta) = \frac{M\omega_{0}}{\kappa} \Biggl\{ RS\sin(S\theta)\sinh(R\theta) - S^{2}\cos(S\theta)\cosh(R\theta) + e^{-R\theta}S \Bigl[S\cos(S\theta) + R\sin(S\theta) \Bigr] \Biggr\},$$
(6.88)

$$A^{(3)}(\theta)\sin^2(S\theta) = \frac{M\omega_0}{4\kappa} \left\{ e^{2R\theta}S^2 - \sin^2(S\theta) - [R\sin(S\theta) + S\cos(S\theta)]^2 \right\}.$$
 (6.89)

De pronto, substituindo-se os resultados em 6.70, podemos tomar os limites de $\theta \to 0$ e $\theta \to \infty$ para analisarmos os comportamentos extremos de $F(\theta)$. Mostramos que

$$\lim_{\theta \to 0} F(\theta) = 0 \tag{6.90}$$

е

$$\lim_{\theta \to \infty} F(\theta) = \frac{M\omega_0}{4\hbar\kappa}.$$
(6.91)

Do comportamento assintótico de $F(\theta)$ vemos que com o tempo os termos não-diagonais serão cada vez menores, já que o termo exponencial do operador densidade $e^{-F(\theta)\xi^2} \to 0$, para tempos muito longos e $\xi \neq 0$. De fato, podemos esperar uma tendência à completa diagonalização do operador densidade na base de coordenadas.

Finalmente, para o cálculo da pureza, devemos lembrar que

$$P(\theta) \equiv \frac{N^2(\theta)}{2\sigma^2 K_1^2(\theta) + 4\hbar A_1^{(3)}(\theta)}.$$
(6.92)

Limite de dissipação fraca e altas temperaturas

O limite de dissipação fraca corresponde a $R \to 0$ e $S \to 1$. Expandimos assim os termos do tipo $e^{R\theta} \approx 1 + R\theta$. Dessa forma, deprezando termos da ordem de R^2 , $\kappa^2 \in \kappa R$, uma vez que ambos são muito menores que a unidade, reescrevemos as funções A's como

$$A^{(1)}(\theta)\sin^2(S\theta) = \frac{M\omega_0}{2} \frac{R}{\kappa} \bigg\{ \theta - \sin\theta\cos\theta \bigg\},\tag{6.93}$$

$$A^{(2)}(\theta)\sin^2(S\theta) = M\omega_0 \frac{R}{\kappa} \left\{ \sin\theta - \theta\cos\theta \right\},\tag{6.94}$$

$$A^{(3)}(\theta)\sin^2(S\theta) = A^{(1)}(\theta)\sin^2(S\theta).$$
 (6.95)

Tomamos o cuidado de manter explícita a razão R/κ , que nos dará dois casos distintos para análise: $R/\kappa \ll 1$ e $R/\kappa \gtrsim 1$.

• $R/\kappa \ll 1$:

Naturalmente, nesse limite, para notarmos $F(\theta) \gtrsim 1$ as contribuições relevantes das funções A's serão em tempos tais que $\theta \gg 1$. Com isso, os termos lineares em θ serão dominantes e podemos escrever as funções anteriores como

$$A^{(1)}(\theta)\sin^2(S\theta) \approx \frac{M\omega_0}{2}\frac{R}{\kappa}\theta,$$
(6.96)

$$A^{(2)}(\theta)\sin^2(S\theta) \approx -M\omega_0 \frac{R}{\kappa}\theta\cos\theta,$$
 (6.97)

$$A^{(3)}(\theta)\sin^2(S\theta) \approx \frac{M\omega_0}{2}\frac{R}{\kappa}\theta.$$
 (6.98)

Substituindo agora as funções de θ anteriores já aproximadas em 6.70, colecionando os termos dominantes de primeira ordem em θ , ficamos com

$$F(\theta) = \frac{M\omega_0}{2\hbar} \frac{R}{\kappa} \theta \tag{6.99}$$

Definimos então uma taxa de decaimento dos termos não-diagonais dada por

$$\Gamma \equiv \frac{M\omega_0^2 \xi^2}{2\hbar} \frac{R}{\kappa}.$$
(6.100)

Então, o tempo de decoerência $\tau_D \equiv \Gamma^{-1}$, que fará $F(\theta)\xi^2 \approx 1$, para algum ξ fixo não-nulo, será dado por

$$\tau_D = \frac{2\hbar}{M\omega_0^2 \xi^2} \frac{\kappa}{R} = \frac{2}{\gamma} \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2.$$
(6.101)

Por fim, podemos linearizar também a expressão do traço do operador densidade ao quadrado, lembrando-se que

$$Tr\rho^2 = \sqrt{\frac{P(\theta)}{F(\theta)}}.$$
(6.102)

Ficamos então com

$$Tr\rho^2 = 1 - 4\gamma \frac{k_B T}{\hbar\omega_0} t \tag{6.103}$$

Repare que em $t = 0 \ Tr\rho^2 = 1$, em consistência com o nosso estado inicial puro. Vemos que a expressão linear do taço mostra que a inclinação negativa da reta é $\gamma \frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \ll 1$, mas aproximamos o resultado para t longos.

• $R/\kappa \gtrsim 1$

Nesse caso deveremos tomar as contribuições das funções de θ para tempos curtos, já que a razão $R/\kappa \gtrsim 1$ implica em um decaimento dos termos não-diagonais muito rápido para tempos $\theta \gg 1$. Devemos então expandir até terceira ordem em θ para notarmos a primeira contribuição (linear) das funções A's, que nesse caso são todas dadas por

$$A^{(i)}(\theta)\sin^2(S\theta) \approx \frac{M\omega_0}{3}\frac{R}{\kappa}\theta^3 \tag{6.104}$$

Novamente, desprezando-se termos com $R^2~\kappa^2$
e $R\kappa,$ obteremos

$$F(\theta) = \frac{M\omega_0}{\hbar} \frac{R}{\kappa} \theta \tag{6.105}$$

Definimos então uma taxa de decaimento dos termos não-diagonais dada por

$$\Gamma \equiv \frac{M\omega_0^2 \xi^2}{\hbar} \frac{R}{\kappa}.$$
(6.106)

Então, o tempo de decoerência $\tau_D \equiv \Gamma^{-1}$, que fará $F(\theta)\xi^2 \approx 1$, para algum ξ fixo não-nulo, será dado por

$$\tau_D = \frac{\hbar}{M\omega_0^2 \xi^2} \frac{\kappa}{R} = \frac{1}{\gamma} \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2.$$
(6.107)

Já o traço pode ser aproximado para tempos curto por

$$Tr\rho^2 = 1 - 8\gamma \frac{k_B T}{\hbar\omega_0} t.$$
(6.108)

Limite de dissipação forte e altas temperaturas

Lembremos que para esse limite, R > 1 e deveremos substituir $S \to iS$, com $S \to R$ na equação 6.70 e nas definições das funções A's. Simplificamos então

$$A^{(1)}(\theta)\sinh^{2}(R\theta) = \frac{M\omega_{0}}{4\kappa} \left\{ R^{2}[\sinh(R\theta) - \cosh(R\theta)]^{2} + \sinh^{2}(R\theta) - e^{-2R\theta}R^{2} \right\}$$

$$= \frac{M\omega_{0}}{4\kappa}\sinh^{2}(R\theta),$$

$$A^{(2)}(\theta)\sinh^{2}(R\theta) = -\frac{M\omega_{0}}{\kappa} \left\{ R^{2}\cosh^{2}(R\theta) - R^{2}\sinh(S\theta)\sinh(R\theta) - e^{-R\theta}R^{2}\left[\cosh(R\theta) + \sinh(R\theta)\right] \right\} = 0,$$
(6.109)
$$(6.110)$$

$$A^{(3)}(\theta)\sinh^{2}(R\theta) = -\frac{M\omega_{0}}{4\kappa} \left\{ R^{2}[\sinh(R\theta) + \cosh(R\theta)]^{2} - e^{2R\theta}S^{2} + \sinh^{2}(R\theta) \right\}$$

$$= -\frac{M\omega_{0}}{4\kappa}\sinh^{2}(R\theta).$$
(6.111)

Com $F(\theta)$ agora dada por

$$F(\theta) \equiv -\frac{1}{4\hbar \sinh^2(R\theta)} \Biggl\{ 4A^{(1)}(\theta) \sinh^2(R\theta) + M\omega_0 R^2 e^{-2R\theta} - \frac{\left[M\omega_0 e^{-R\theta} R^2 [\cosh(R\theta) + \sinh(R\theta)] - 2A^{(2)}(\theta) \sinh^2(R\theta)\right]^2}{M\omega_0 R^2 [\sinh(R\theta) + \cosh(R\theta)]^2 + M\omega_0 \sinh^2(R\theta) + 4A^{(3)}(\theta) \sinh^2(R\theta)} \Biggr\}.$$
(6.112)

Nesse caso, analogamente ao que fizemos para $R/\kappa \gtrsim 1$, só faz sentido tomarmos o limite de tempos curtos. Portanto, expandindo 6.112 em θ até a primeira ordem dominante temos

$$F(\theta) \approx -\frac{M\omega_0}{2\hbar} R\left(1 - \frac{1}{\kappa}\right) \theta \approx \frac{M\omega_0}{2\hbar} \frac{R}{\kappa} \theta.$$
(6.113)

A taxa de decaimento é dada por

$$\Gamma \equiv \frac{M\omega_0^2}{\hbar} \frac{R}{2\kappa}.$$
(6.114)

Portanto, o tempo de decoerência $\tau_D \equiv \Gamma^{-1}$ que fará $F(\theta)\xi^2 \approx 1$ será dado por

$$\tau_D = \frac{2\hbar\kappa}{MR\omega_0^2} = \frac{2}{\gamma} \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2.$$
(6.115)

Note agora que esse tempo tem a mesma forma do encontrado por Zurek em [19] para partícula livre, como mostramos no capítulo anterior. Basta vermos que, substituindo o comprimento $\sigma = \sqrt{\hbar/2M\omega_0}$, 6.115 pode ser reescrito como

$$\tau_D = \frac{2}{\gamma} \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2 = \frac{2}{\gamma} \left(\frac{\hbar}{\xi^2 \sqrt{2Mk_B T}}\right)^2 = \frac{2}{\gamma} \left(\frac{\lambda}{\xi}\right)^2, \qquad (6.116)$$

sendo que agora esse tempo é inversamente proporcional ao quadrado do comprimento de coerência ξ no lugar da distância entre dois pacotes z, como em [19].

6. Pacotes Gaussianos em um Potencial Harmônico

Linearizando também o traço ficamos com

$$Tr\rho^2 = 1 - 4\gamma \frac{k_B T}{\hbar\omega_0} t.$$
(6.117)

O limite de dissipação fraca revisto

Analiticamente, há uma maneira de tratar especificamente o problema da dissipação fraca e obtermos o tempo de decoerência sem qualquer aproximação em temperatura. É o que mostramos a seguir.

Voltemos nas equações 6.59, 6.60 e 6.61. O procedimento é resolver uma das integrais temporais e logo tomar o limite de dissipação fraca nessas equações, a saber $R \to 0$ e $S \to 1$. Com isso, convenientemente mudando os limites de integração da integral dupla,

$$A_{\lambda}^{(1)}(\theta) = \frac{2e^{-2R\theta}}{\sin^{2}(S\theta)} \int_{0}^{\theta} \int_{0}^{\theta_{1}} \sin(S\theta_{1}) \cos\left[\lambda(\theta_{1} - \theta_{2})\right] \sin(S\theta_{2}) \exp\left[R(\theta_{1} + \theta_{2})\right] d\theta_{1} d\theta_{2}$$
$$= \frac{2}{\sin^{2}\theta} \int_{0}^{\theta} d\theta_{1} \sin\theta_{1} \frac{\cos\theta_{1} - \cos\left(\lambda\theta_{1}\right)}{(\lambda+1)(\lambda-1)}$$
$$= \frac{2\pi}{(\lambda+1)\sin^{2}\theta} \int_{0}^{\theta} d\theta_{1} \sin\theta_{1} \sin\left[\frac{(\lambda+1)\theta_{1}}{2}\right] \frac{1}{\pi} \frac{2}{(\lambda-1)} \sin\left[\frac{(\lambda-1)\theta_{1}}{2}\right],$$
(6.118)

onde utilizamos a relação trigonométrica para transformar a diferença entre os cossenos em um produto de senos, como em

$$\cos b - \cos a = 2\sin\left(\frac{a+b}{2}\right)\sin\left(\frac{a-b}{2}\right). \tag{6.119}$$

O mesmo processo é aplicado nas outras funções. Repare que para $A_{\lambda}^{(2)}(\theta)$ agora é fácil mostrar que

$$A_{\lambda}^{(2)}(\theta) = \frac{2e^{-R\theta}}{\sin^2(S\theta)} \int_0^{\theta} \int_0^{\theta} \sin(S\theta_1) \cos\left[\lambda(\theta_1 - \theta_2)\right] \sin\left[S(\theta - \theta_2)\right] \exp\left[R(\theta_1 + \theta_2)\right] d\theta_1 d\theta_2$$
$$= \frac{4\pi}{(\lambda + 1)\sin^2\theta} \int_0^{\theta} d\theta_1 \sin(\theta - \theta_1) \sin\left[\frac{(\lambda + 1)\theta_1}{2}\right] \frac{1}{\pi} \frac{2}{(\lambda - 1)} \sin\left[\frac{(\lambda - 1)\theta_1}{2}\right],$$
(6.120)

seguindo exatamente a mesma integração feita em $A_{\lambda}^{(1)}(\theta)$, bastando trocar $\theta_2 \leftrightarrow \theta_1$.

Por fim, a integral $A_{\lambda}^{(3)}(\theta)$ é exatamente a mesma função que $A_{\lambda}^{(3)}(\theta)$, no limite em que $R \to 0$, bastando fazer a troca de variáveis $\theta - \theta_1 \to \theta_1$ e $\theta - \theta_2 \to \theta_2$. Portanto, escrevemos

diretamente que

$$A_{\lambda}^{(3)}(\theta) = \frac{1}{\sin^2(S\theta)} \int_0^{\theta} \int_0^{\theta} \sin\left[S(\theta - \theta_1)\right] \cos\left[\lambda(\theta_1 - \theta_2)\right] \sin\left[S(\theta - \theta_2)\right] \exp\left[R(\theta_1 + \theta_2)\right] d\theta_1 d\theta_2$$
$$= \frac{2\pi}{(\lambda + 1)\sin^2\theta} \int_0^{\theta} d\theta_1 \sin\theta_1 \sin\left[\frac{(\lambda + 1)\theta_1}{2}\right] \frac{1}{\pi} \frac{2}{(\lambda - 1)} \sin\left[\frac{(\lambda - 1)\theta_1}{2}\right]$$
(6.121)

Mas analogamente ao raciocínio que aplicamos às aproximações nas subseções anteriores, para tempos longos, $\theta_1 \gg 1$, pode-se escrever que

$$\frac{1}{\pi} \frac{2}{(\lambda - 1)} \sin\left[\frac{(\lambda - 1)\theta_1}{2}\right] \to \delta(\lambda - 1).$$
(6.122)

Com isso, conseguimos mostrar que as funções $A_{\lambda}(\theta)$'s assumem o caráter deltiforme em frequência, sendo

$$A_{\lambda}^{(1)}(\theta) = \delta(\lambda - 1) \frac{\pi}{\sin^2 \theta} \int_0^{\theta} \sin^2 \theta_1 d\theta_1 = \delta(\lambda - 1) \left\{ \frac{\pi}{2\sin^2 \theta} (\theta - \cos \theta \sin \theta) \right\}, \qquad (6.123)$$

$$A_{\lambda}^{(2)}(\theta) = \delta(\lambda - 1) \frac{\pi}{\sin^2 \theta} \int_0^\theta \sin(\theta - \theta_1) \sin \theta_1 d\theta_1 = \delta(\lambda - 1) \left\{ \frac{\pi}{\sin^2 \theta} (\sin \theta - \theta \cos \theta) \right\}, \quad (6.124)$$

$$A_{\lambda}^{(3)}(\theta) = \delta(\lambda - 1) \frac{\pi}{\sin^2 \theta} \int_0^{\theta} \sin^2(\theta - \theta_1) d\theta_1 = \delta(\lambda - 1) \left\{ \frac{\pi}{2\sin^2 \theta} (\theta - \cos \theta \sin \theta) \right\}.$$
 (6.125)

Integrando finalmente em frequência ficamos com

$$A^{(1)}(\theta) = \frac{M\omega_0 R}{2\sin^2\theta} \coth \kappa (\theta - \cos\theta\sin\theta), \qquad (6.126)$$

$$A^{(2)}(\theta) = \frac{M\omega_0 R}{\sin^2 \theta} \coth \kappa (\sin \theta - \theta \cos \theta), \qquad (6.127)$$

$$A^{(3)}(\theta) = A^{(1)}(\theta). \tag{6.128}$$

Esse resultado foi obtido em [20], onde se mostrou que para o caso fracamente dissipativo a equação mestra do problema poderia ser escrita como

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2iM}\frac{\partial^2\rho}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2iM}\frac{\partial^2\rho}{\partial y^2} - \gamma(x-y)\frac{\partial\rho}{\partial x} + \gamma(x-y)\frac{\partial\rho}{\partial y} + \frac{M\omega_0 x^2}{2i\hbar}\rho - \frac{M\omega_0 y^2}{2i\hbar}\rho + \frac{1}{\hbar}M\gamma\coth\left(\frac{\hbar\omega_0}{2k_BT}\right)(x-y)^2\rho.$$
(6.129)

Note que nesse caso a equação é válida para qualquer temperatura. Sua forma assemelha-se muito à obtida no caso da aproximação de temperaturas altas, vista na equação 4.21, sendo que a diferença está no último termo a que associamos a constante difusiva, antes $D \equiv 2M\gamma k_B T$, agora $D \equiv M\gamma \hbar \coth(\hbar\omega_0/2k_B T)$.

Por fim, exatamente como fizemos para o caso mais geral, podemos reconfirmar nossos resultados anteriores, estimando o tempo de decoerência a partir de $F(\theta)$ (equação 6.70) para o problema específico fracamente dissipativo, em que termos de segunda ordem em R são desprezados. Novamente, nota-se que para $F(\theta)\xi^2 \approx 1$ o limite $\theta \gg 1$ deve ser tomado. Portanto, os termos lineares em θ são dominantes escrevemos

$$F(\theta) = -\frac{M\omega_0\xi^2}{4\sin^2\theta} \Biggl\{ 2R(\theta - \cos\theta\sin\theta) \coth\kappa - e^{-2R\theta} \\ + \frac{\left[e^{-R\theta}(\cos\theta + R\sin\theta) - 2R\coth\kappa(\sin\theta - \theta\cos\theta)\right]^2}{(\cos\theta + R\sin\theta)^2 + 2R\coth\kappa(\theta - \cos\theta\sin\theta)} \Biggr\}$$
(6.130)
$$\approx -\frac{M\omega_0R\xi^2}{2\hbar} (\coth\kappa - 1)\theta \\ = -\frac{M\omega_0R\xi^2}{\hbar(e^{2\kappa} - 1)}\theta.$$

Com isso, podemos expressar $F(t) \approx -\Gamma t$, em que

$$\Gamma \equiv \frac{M\omega_0\gamma\xi^2}{\hbar} \frac{1}{\exp\left(\hbar\omega/k_BT\right) - 1}$$
(6.131)

e portanto o tempo de decoerência interna do pacote gaussiano é dado por

$$\tau_D \approx \frac{1}{\gamma} \frac{\hbar}{M\omega_0 \xi^2} \left\{ \exp \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1 \right\}.$$
(6.132)

Mais uma vez vemos que esse tempo é tipicamente muito menor que o tempo de relaxação do sistema, com exceção do limite de baixas temperaturas. Para os dois limites escrevemos

$$\tau_D = \frac{2}{\gamma} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2 \left(\exp\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} - 1\right)$$
$$= \begin{cases} \frac{2}{\gamma} \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2, & \text{se } k_B T \gg \hbar\omega_0\\ \frac{2}{\gamma} \exp\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2, & \text{se } k_B T \ll \hbar\omega_0 \end{cases}$$

que recupera nossa aproximação para altas temperaturas que encontramos no início da seção.

Por fim, a medida de pureza nesse limite nos dá

$$Tr\rho^{2} = 1 - 4\left(\frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega_{0}}{k_{B}T} - 1}\right)\gamma t.$$
(6.133)

Claramente, para temperaturas altas recuperamos o resultado de 6.103. Já para baixas temperaturas, vemos um coeficiente linear da expressão do traço dado por um fator exponencialmente pequeno, uma vez que

$$Tr\rho^2 \approx 1 - 4\gamma \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}\right)t.$$
 (6.134)

Para ilustrar o que acabamos de calcular, podemos plotar o operador densidade reduzido de uma partícula para alguns regimes, mostrando exatamente a tendência da diagonalização na base de coordenadas. As figuras a seguir referem-se ao caso fracamente dissipativo do pacote parado.
Representações gráficas do operador densidade reduzido

Assumimos o caso fracamente dissipativo em que $R = 1 \times 10^{-3}$. Ressaltemos que o tempo de relaxação nas situações ilustradas é sempre o mesmo, ~ 10^3 oscilações na frequência ω_0 do potencial harmônico. Os gráficos tridimensionais foram reescalados na direção z para nos atentarmos à perda de coerência, que é o que nos interessa. Naturalmente, o valor absoluto do operador decai com passar do tempo, uma vez que o sistema perde energia para o meio.

A sequência de figuras ilustra os três casos distintos que abordamos no início da seção. Respectivamente, 6.3 e 6.4, 6.5 e 6.6, 6.7 e 6.8, representando $R/\kappa \ll 1$, $R/\kappa \gtrsim 1$ para temperaturas altas e o caso de temperaturas baixa.



Figura 6.3: Gráficos da evolução temporal do operador densidade num plot xy. Usamos $T = 10^{-7}K$, R = 0.001, $R/\kappa \approx 0.04$, $\kappa \approx 0.02$ e $M = 10^{-23}g$. Visualizamos como uma matriz contínua com os elementos variando de -6×10^{-7} a -6×10^{-7}



6. Pacotes Gaussianos em um Potencial Harmônico

Figura 6.4: Mesma dinâmica num plot em 3D

Para esse caso das figuras 6.5 e 6.6 em que $T = 10^{-5}$ podemos considerá-lo de temperatura alta, uma vez que $\kappa \approx 2 \times 10^{-4} \ll 1$. Notemos que em menos de três períodos característicos do oscilador, $1/\omega_0$, o pacote já perdeu sua coerência interna, o que mostra o efeito determinante da temperatura nesse sistema dissipativo. No limite fortemente dissipativo a diagonalização do operador densidade é ainda mais categórica. Antes mesmo de um período característico de oscilação verificamos a perda de coerência.



Figura 6.5: Gráficos da evolução temporal do operador densidade num plot xy. Usamos $T = 10^{-5}K$, R = 0.001, $R/\kappa \approx 4$, $\kappa \approx 2 \times 10^{-4}$ e $M = 10^{-23}g$. Visualizamos como uma matriz contínua com os elementos variando de -6×10^{-7} a -6×10^{-7}



6. Pacotes Gaussianos em um Potencial Harmônico

Figura 6.6: Mesma dinâmica num plot em 3D

Nas figuras 6.7 e 6.8 vemos o sistema demorar um tempo da ordem de relaxação para perder coerência. Como havíamos discutido, isso revela a robustez do estado coerente gaussiano frente a dissipação. À medida que diminuímos ainda mais a temperatura a tendência é vermos um crescimento exponencial do tempo de decoerência com o inverso da temperatura, tendendo a infinito quando $T \rightarrow 0$, assim como visto em 6.132.



Figura 6.7: Gráficos da evolução temporal do operador densidade num plot xy. Usamos $T = 10^{-10}K$, R = 0.001, $\kappa \approx 20$ e $M = 10^{-23}g$. Visualizamos como uma matriz contínua com os elementos variando de -6×10^{-7} a -6×10^{-7}



Figura 6.8: Mesma dinâmica num plot em 3D

Conclusões e Perspectivas

Analisamos nessa dissertação, diretamente a partir do operador densidade dinâmico reduzido, o tempo de decoerência interna para o problema de um pacote gaussiano em um potencial harmônico. Resumindo os resultados vimos que para altas temperaturas

$$au_D = \frac{2}{\gamma} \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi} \right)^2$$
, para $\gamma \ll \omega_0 \ e \ \gamma \gg \omega_0$

e na generalização do caso fracamente dissipativo ($\gamma\ll\omega_0)$ para qualquer temperatura

$$\tau_D = \frac{2}{\gamma} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2 \left(\exp\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} - 1\right)$$
$$= \begin{cases} \frac{2}{\gamma} \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2, & \text{se } k_B T \gg \hbar\omega_0\\ \frac{2}{\gamma} \exp\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2, & \text{se } k_B T \ll \hbar\omega_0 \end{cases}$$

Notamos que para os casos calculados os tempos de decoerência interna mostram-se muito menores do que o tempo de relaxação do sistema, para comprimentos da ordem da largura do pacote. Essa é a principal conclusão desse trabalho, endossando as características do fenômeno da decoerência assim como esperadas na literatura. Quanto mais distantes estamos da diagonal principal do operador densidade a coerência no pacote, formada pela superposição de diferentes autoestados de posição, decai no tempo com o quadrado dessa distância em unidades da largura do pacote. Entrentato, reparemos que de fato, apesar de F(t) ser monotonicamente crescente, há um valor de ξ que nos indica que a diagonalização do operador densidade não é completa num tempo da ordem de τ_R , a relaxação do sistema. Diferentemente do problema da decoerência de dois pacotes, em que a coerência é perdida completamente antes da relaxação, os tempos de decoerência interna que calculamos são do tipo

$$\tau_D \approx \tau_R \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left(\frac{\sigma}{\xi}\right)^2,$$

ou seja, para um comprimento de coerência ξ_C , temos

$$\frac{\hbar\omega_0}{k_BT} \left(\frac{\sigma}{\xi_C}\right)^2 \approx 1,$$

fazendo o tempo de decoerência interna ficar da ordem da relaxação do sistema. Substituindo o largura do pacote suposta nos cálculos anteriores vemos que

$$\xi_C \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2Mk_BT}} = \lambda.$$

Ou seja, o sistema mantém um comprimento de coerência interna da ordem do comprimento de onda de de Broglie. Portanto, para problemas tipicamente macroscópicos em temperatura ambiente $\xi_C \rightarrow 0$ e podemos encarar, nesse caso, ausência coerência remanescente num tempo da ordem de τ_R . Para o caso fortemente dissipativo esse comprimento é ainda multiplicado por um fator $\omega_0/\gamma \ll 1$, devido à diferente forma do tempo de relaxação nesse caso ($\tau_R = \gamma/\omega_0^2$), o que ainda fortalece a ideia de um comprimento de coerência ainda menor, negligível no limite macroscópico.

Por questão de tempo, faltou-nos calcular o limite específico de dissipação forte e temperatura baixa, que será adicionado futuramente aos nossos resultados.

O critério sugerido por Zurek et al. em [13] para o caso oscilador harmônico fracamente dissipativo permitiu definir os estados coerentes como os mais estáveis, promovendo-os a ponteiros naturais do problema. Particularmente, o estado coerente de mínima incerteza (gaussiano) é o mais estável e foi justamente esse estado que utilizamos. A sua robustez fica clara quando tomamos o limite de $T \to 0$ no nosso resultado de tempo de decoerência para o caso fracamente dissipativo para qualquer temperatura. Nesse limite, $\tau_D \to \infty$ e naturalmente a medida de pureza $Tr\rho^2 \to 1$, mostrando que o pacote relaxa num tempo $\tau_R = 1/\gamma$ mas sem perder a sua coerência, uma vez que continua sendo um estado puro. Isso é um reflexo de sua estabilidade e está de acordo com o encontrado por Dalvit et al. em [21].

Entretanto, caso tratemos do problema de uma partícula livre, o critério deve ser substituído, já que seguindo o mesmo procedimento a base de coordenadas deveria ser a escolhida pelo sistema para evidenciar decoerência. Não é o que se verifica e a base de momento mostra-se mais adequada nessa situação. O problema da particula livre é bem abordado em [18] e [22] e de fato podemos daí notar a preferência da base de momentos. O que podemos acrescentar para essa discussão é que no caso de partícula livre, uma vez que não há comprimentos característicos que delimitam o problema, como ocorre no caso do oscilador harmônico, em que há o comprimento característico do potencial, pouco faz sentido falarmos de autoestados de posição como bons indicadores. A partícula tende a uma diagonalização, mas ocorre muito mais rapidamente no espaço de momentos. Essa discussão em particular foi levantada por Venugopalan em [17], apesar de que uma análise mais cuidadosa do problema é necessária.

O estudo do fenômeno da decoerência tomou particular evidência no último ano com a premiação de S. Haroche e D. Wineland com o prêmio Nobel de Física, por uma série de experimentos ópticos iniciados no meio da década de 90 que conseguiu, dentre outras aplicabilidades e conclusões, apresentar valores para as escalas de tempo de decoerência em superposições do tipo gato de Schrödinger [9] e [23].

Referências Bibliográficas

- [1] U. Weiss, Quantum dissipative systems. World Scientific Publishing Company, 2008.
- [2] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, "Path integral approach to quantum Brownian motion," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 121, pp. 587–616, Sept. 1983.
- [3] R. Feynman and F. L. Vernon, "The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system," *Annals of Physics*, vol. 24, pp. 118–173, Oct. 1963.
- [4] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, Path integrals in quantum mechanics. McGraw-Hill, New York, 1st ed., 1965.
- [5] A. O. Caldeira, "Macroscopic Quantum Phenomena and Quantum Dissipation," Notas de aula do Instituto de Física Gleb Wataghin, 2010.
- [6] L. Diósi, "Caldeira-Leggett master equation and medium temperatures," *Physica A*, vol. 199, no. 3, pp. 517–526, 1993.
- [7] W. H. Zurek, "Reduction of the Wavepacket: How Long Does it Take?," arXiv preprint quant-ph/0302044, p. 7, Feb. 2003.
- [8] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, "Influence of damping on quantum interference: An exactly soluble model," *Physical Review A*, vol. 31, pp. 1059–1066, Feb. 1985.

- [9] M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maître, A. Maali, C. Wunderlich, J. Raimond, and S. Haroche, "Observing the Progressive Decoherence of the âMeterâ in a Quantum Measurement," *Physical Review Letters*, vol. 77, pp. 4887–4890, Dec. 1996.
- [10] W. H. Zurek, "Decoherence and the transition from quantum to classical Revisited," Los Alamos Science, vol. 27, no. 27, 2002.
- [11] A. J. Leggett, "Testing the limits of quantum mechanics: motivation, state of play, prospects," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 14, pp. R415–R451, Apr. 2002.
- [12] W. H. Zurek, "Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse?," *Physical Review D*, vol. 24, pp. 1516–1525, Sept. 1981.
- [13] W. Zurek, S. Habib, and J. Paz, "Coherent states via decoherence," *Physical Review Letters*, vol. 70, pp. 1187–1190, Mar. 1993.
- [14] J. Paz, S. Habib, and W. Zurek, "Reduction of the wave packet: Preferred observable and decoherence time scale," *Physical Review D*, vol. 47, pp. 488–501, Jan. 1993.
- [15] C. Savage and D. Walls, "Damping of quantum coherence: The master-equation approach," *Physical Review A*, vol. 32, pp. 2316–2323, Oct. 1985.
- [16] D. Kumar, "Brownian motion of a quantum particle," *Physical Review A*, vol. 29, pp. 1571– 1573, Mar. 1984.
- [17] A. Venugopalan, "Preferred basis in a measurement process," *Physical Review A*, vol. 50, pp. 2742–2745, Sept. 1994.
- [18] V. Hakim and V. Ambegaokar, "Quantum theory of a free particle interacting with a linearly dissipative environment," *Physical Review A*, vol. 32, pp. 423–434, July 1985.
- [19] W. H. Zurek, "Reduction of the Wave Packet and Environment-Induced Superselection," Annals of the New York Academy of Sciences, vol. 480, pp. 89–97, Dec. 1986.

- [20] A. O. Caldeira, H. Cerdeira, and R. Ramaswamy, "Limits of weak damping of a quantum harmonic oscillator," *Physical Review A*, vol. 40, pp. 3438–3440, Sept. 1989.
- [21] D. A. R. Dalvit, J. Dziarmaga, and W. H. Zurek, "Predictability sieve, pointer states, and the classicality of quantum trajectories," *Physical Review A*, vol. 72, p. 062101, Dec. 2005.
- [22] D. Walls and G. Milburn, "Effect of dissipation on quantum coherence," *Physical Review* A, 1985.
- [23] C. Myatt, B. King, Q. Turchette, C. Sackett, D. Kielpinski, W. Itano, C. Monroe, and D. Wineland, "Decoherence of quantum superpositions through coupling to engineered reservoirs," *Nature*, vol. 403, pp. 269–73, Jan. 2000.
- [24] A. Leggett, S. Chakravarty, A. Dorsey, M. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger, "Dynamics of the dissipative two-state system," *Reviews of Modern Physics*, vol. 59, pp. 1–85, Jan. 1987.

Apêndices

Transformada de Laplace

A transformada de Laplace de uma função g(t) define-se como

$$\mathcal{L}_t[g(t)](s) \equiv \int_0^t g(t)e^{-st}dt.$$
 (A.1)

A transformada inversa é dada por

$$\mathcal{L}_t^{-1}[\tilde{g}(s)](t) \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon-i\infty} \tilde{g}(s) e^{st} dt.$$
(A.2)

A seguir estão as transformadas que usamos na seção 2.2:

• Transformada da derivada segunda de g(t):

$$\mathcal{L}_t[\ddot{g}(t)](s) = s^2 \mathcal{L}_t[g(t)](s) - sg(0) - \dot{g}(0).$$
(A.3)

• Transformada do $\cos \omega t$:

$$\mathcal{L}_t[\cos\omega t](s) = \frac{s}{s^2 + \omega^2}.$$
(A.4)

• Transformada do $\sin \omega t$:

$$\mathcal{L}_t[\sin\omega t](s) = \frac{\omega}{s^2 + \omega^2}.$$
(A.5)

Utilizamos também a propriedade do produto de convolução que nos diz que

$$\mathcal{L}_{t}^{-1}[\tilde{f}(s)\tilde{g}(s)] = \mathcal{L}_{t}^{-1}[\tilde{f}(s)] * \mathcal{L}_{t}^{-1}[\tilde{g}(s)] = f(t) * g(t) = \int_{0}^{t} f(\tau)g(t-\tau)d\tau.$$
(A.6)

B Introdução de uma função de convergência no caso ôhmico

Como dissemos, há algumas formas de garantirmos cortes de frequência com apelo mais físicos. Em geral, esses cortes são introduzidos para garantir a convergência de integrações em frequência, principalmente para os problemas não-Markovianos que não abordamos nessa dissertação.

Para deduzirmos o modelo admitimos basicamente:

- 1. O banho ôhmico, traduzido na forma de uma função espectral linear na frequência $J(\omega) = \eta \omega$,
- 2. Ausência de memória do banho, que pode ser representada pelo limite $\Omega \to \infty$ (quando o tempo microscópico característico é considerado nulo).

Ambas as suposições do modelo foram feitas independentemente, no sentido de que uma não se faz necessária à outra. Entretanto, uma vez assumidas têm de se mostrar mutuamente consistentes. O fato de não obtermos a convergência em algumas expressões no intervalo $0 - \infty$ se dá porque, fisicamente, uma função espectral deve decair no limite $\omega \to \infty$, garantindo que algumas quantidades físicas, como dispersão de momento, não sejam divergentes [1]. Para explicarmos isso devemos ir além da abordagem fenomenológica e entendermos que sempre haverá um tempo característico de memória microscópica para efeitos inercias do banho. Ou seja, assumindo que $\Omega \to \infty$ é dizer que esse tempo é nulo, tornando a situação idealizada, válida em alguns casos.

Uma tentativa de levar isso em conta é utilizar a chamada regularização de Drude, que assume uma dependência temporal de γ do tipo:

$$\gamma(t) = \gamma \Omega e^{-\Omega t}.$$
 (B.1)

Com isso a função espectral é reescrita como:

$$J(\omega) = \frac{\eta\omega}{1 + \frac{\omega^2}{\Omega^2}},\tag{B.2}$$

sendo Ω agora a frequência de Drude, que nada mais é do que a introdução de um tempo de memória não-nulo para o banho.

Outra maneira de levarmos em conta esse fato é introduzirmos um corte exponencial através de $e^{-\omega/\Omega}$ [24].