

Universidade Estadual de Campinas

Decoerência em uma experiência de Stern-Gerlach dissipativa

por

Thiago Rodrigues de Oliveira

Orientado por Amir Ordacgi Caldeira

Este exemplar corresponde à redação final da Tese de mestrado defendida pelo aluno Thiago Rodrigues de Oliveira e aprovada pela comissão julgadora

17/01/2004

Tese submetida ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" para a obtenção do título de Mestre em Física.

Campinas, São Paulo
agosto – 2004

BIBLIOTECA IFGW
UNICAMP

UNIDADE	IFGW
Nº CHAMADA	OL4d
V	EX
TOMBO BC/	62984
PROC.	16-86-05
C	☐
D	☒
PREÇO	11,00
DATA	1º/3/05
Nº CPD	

16/421

libr. id 342786

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

OL4d

Oliveira, Thiago Rodrigues de
Decoerência em uma experiência de Stern-Gerlach
dissipativa / Thiago Rodrigues de Oliveira. -- Campinas,
SP : [s.n.], 2004.

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

1. Stern-Gerlach, Experiência de. 2. Dissipação
de energia. 3. Estatística quântica. I. Caldeira, Amir
Ordacgi. II. Universidade Estadual de Campinas.
Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

(vsv/ifgw)

- Palavras-chave em inglês (Keywords):
 1. Stern-Gerlach experiment.
 2. Energy dissipation.
 3. Quantum statistics
- Área de concentração: Física estatística
- Titulação: Mestre em física
- Banca examinadora:
 - Prof. Amir Ordacgi Caldeira
 - Profa. Kyoko Furuya
 - Prof. Miled Hassan Youssef Moussa
- Data da defesa: 09.09.2004



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE THIAGO RODRIGUES DE OLIVEIRA – RA 982226 APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 09 / 09 / 2004.

COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira (Orientadora do Candidato) –
DFMC/IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa – DF/UFSCar



Profa. Dra. Kyoko Furuya – DFMC/IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

A todos que de alguma forma contribuíram para a realização desta teste meus sinceros agradecimentos

Ao IFGW e todo o seu pessoal pela estrutura material e humana e em especial a secretaria de pós-graduação.

Aos colegas da pós que propiciaram um ambiente de trabalho extremamente agradável.

A Fapesp pelo suporte financeiro, sem o qual a realização deste trabalho não seria possível.

Ao Prof. Amir Caldeira pela competente orientação em todos os momentos do trabalho.

Resumo

Neste trabalho investigamos a perda da coerência de spin em experiências de feixes de partículas submetidas a campos magnéticos. Tratando o campo magnético como um ente clássico, analisamos a influência do alargamento da parte espacial da função de onda, na tentativa de recombinar os feixes provenientes de um aparato de Stern-Gerlach e assim obter o estado puro inicial. O alargamento do pacote se mostrou um fator relevante aumentando a perda de coerência, para um dado grau de recombinação, através da separação entre os pacotes no espaço de momento. Também observamos que na experiência de Stern-Gerlach a coerência de spin é perdida muito antes dos pacotes se separarem no espaço de coordenadas.

Incluindo as flutuações do campo magnético, através do acoplamento do sistema com um reservatório de osciladores, obtivemos um fator de atenuação à possível recuperação da coerência quando os feixes são recombinados com perfeição. Para o caso em que o campo magnético tem como origem um SQUID(superconducting quantum interference device), com dimensões na escala de microns, observamos que o fator de atenuação pode evitar o revival da coerência quando os feixes são recombinados.

Abstract

Spin coherence experiments with particle beams under the influence of magnetic fields are investigated. Taking this field as a classical entity, we analyze the influence of the spreading of the wave packet in the recombination of the two beams resulting from a Stern-Gerlach apparatus. The spreading of the wave packet has shown to be a significant factor for the loss of coherence through the separation of the packets in the momentum space. We also observed that in the Stern-Gerlach experiment the spin coherence is lost much earlier than the packets separate in the coordinate space.

Including the fluctuations of the magnetic field through the coupling of the system to a bath of oscillators, we obtained an attenuation factor to the possible revival of coherence, when the beams are recombined with perfection. For the case where the source of the magnetic field is a SQUID(superconducting quantum interference device), with dimensions in the scale of microns, the attenuation factor can prevent the revival of coherence when the beams are fully recombined.

“Só pela ciência e pela arte as civilizações têm algum valor. Alguns espantaram-se com, a fórmula: “a ciência pela ciência”; e contudo ela não é menos surpreendente do que “a vida pela vida”, se a vida não é mais que miséria; e até mesmo do que “a felicidade pela felicidade”, se não julgarmos que todos os prazeres são da mesma qualidade, se não quisermos admitir que o objetivo da civilização é o de fornecer álcool aos que gostam de beber. [...]

E contudo – estranha contradição para aqueles que crêem no tempo – a história geológica nos mostra que a vida não é mais que um curto episódio entre duas eternidades de morte e que, nesse próprio episódio, o pensamento consciente não durou e não durará mais que um momento. O pensamento não é mais que um clarão em meio a uma longa noite.

Mas esse clarão é tudo.”

H. Poincaré em o valor da ciência.

Sumário

1	Introdução	1
2	Coerência	3
2.1	Coerência em um único sistema	3
2.2	Acoplamento com um segundo sistema	4
3	Interferômetro de Stern-Gerlach	7
3.1	ISG com Campo Clássico	7
3.2	Efeitos da medida	13
3.3	Efeitos das Flutuações na precessão do spin	15
4	Dissipação	17
4.1	Dissipação em Mecânica Clássica	17
4.1.1	Modelos Fenomenológicos	17
4.1.2	Banho de osciladores	19
4.2	Dissipação em Mecânica Quântica	22
5	ISG sem flutuações	29
5.1	Alargamento do pacote no ISG	29
5.2	Perda de Coerência na experiência de Stern-Gerlach	33
6	ISG com flutuações	37
6.1	Hamiltoniana com flutuações	37
6.2	Cálculo do operador densidade do sistema	38
7	Modelo	45
7.1	Aparato experimental	45
7.2	Dinâmica do fluxo em um SQUID	46
7.3	Cálculo da função espectral efetiva	48
8	Conclusões	51
A	Cálculo do operador densidade reduzido	53

Capítulo 1

Introdução

O experimento de Stern-Gerlach é conhecido por dar uma evidência experimental da quantização do spin de uma partícula. Assim, quando temos um feixe de partículas de spin $1/2$, sabemos que, após passar por um campo magnético variável na direção $\hat{z}$, as partículas são detectadas em um anteparo e, como resultado, temos a presença de dois picos distintos correspondendo aos spins na direção $\hat{z}$ e $-\hat{z}$.

Entretanto, além de nos dar uma evidência sobre a quantização do spin, esse exemplo é considerado o paradigma do processo de medida. O feixe entra no magneto no estado puro, por exemplo o autoestado $|+\rangle_x$ de S_x , e, para efeito de medida de S_z , passa a ser descrito por uma superposição dos autoestados deste observável. Posteriormente transforma-se em uma mistura estatística depois de colidir com um anteparo.

Se a colisão com o anteparo realmente não ocorresse poderíamos recombinar novamente os dois feixes a fim de obter o estado puro inicial?

Essa idéia da recombinação dos feixes é antiga mas sempre foi tratada de forma bem qualitativa. Um dos primeiros tratamentos mais quantitativos ocorreu em uma série de três artigos [1, 2, 3] nos quais os autores examinaram a possibilidade de recombinar os feixes e chegaram à conclusão de que a precisão com que se controla o campo magnético é de fundamental importância na reconstrução do estado puro inicial. Porém, nesses três artigos os autores não fizeram considerações sobre a origem do campo magnético, que foi tratado classicamente, e sobre suas possíveis fontes de flutuações.

Sabe-se que o acoplamento de um sistema com outro de muitos graus de liberdade, sobre os quais não temos controle, tem como efeito a decoerência. Em geral esse segundo sistema é chamado de reservatório ou banho, sendo a decoerência obtida quando traçamos as suas variáveis, o que leva o sistema a uma mistura estatística de uma forma irreversível.

Em um trabalho mais recente [4], esse problema foi tratado novamente com uma descrição quântica do campo magnético. Porém, o autor só considerou o acoplamento do campo com o momento magnético da partícula, não levando em conta o efeito das flutuações na parte espacial da função de onda.

Neste trabalho pretendemos analisar os efeitos das inevitáveis flutuações do campo magnético na parte espacial da função de onda da partícula na tentativa de recombinar os feixes.

Na análise desse problema, entretanto, nos deparamos com outras duas questões que também pretendemos esclarecer: como ocorre a perda de coerência de spin na experiência de Stern-Gerlach e qual a influência do alargamento do “pacote” na experiência de recombinação.

Para tratarmos todos esses assuntos daremos uma breve introdução sobre alguns dos conceitos utilizados, como coerência e dissipação, e faremos um breve resumo sobre os trabalhos citados acima.

No capítulo 2 faremos uma introdução à coerência antes de, no capítulo 3, situar o problema da recombinação dos feixes, descrevendo o que vem sendo feito na área. O problema da dissipação em mecânica quântica é introduzido, de forma geral, no capítulo 4. No capítulo 5 tratamos os dois problemas citados acima, com os quais nos deparamos no decorrer deste trabalho. Por fim, no capítulo 6, abordamos a questão da recombinação espacial com uma descrição quântica do campo utilizando uma Hamiltonina que será justificada no capítulo 7.

Capítulo 2

Coerência

Começaremos este trabalho com uma pequena introdução sobre coerência e os efeitos do acoplamento do sistema de interesse com um segundo sistema. Entenderemos coerência quântica como a propriedade de superposição entre vetores de estado, estando portanto associada à diferença entre o estado de superposição(puro) e o estado de mistura estatística.

2.1 Coerência em um único sistema

Em Mecânica Quântica o estado de uma partícula ou sistema é definido por um ket $|\psi\rangle$ ¹, que pertence a um espaço de estados $\mathcal{E}$. Assim uma combinação linear de estados também define um outro estado associado ao sistema(princípio da superposição)[5].

Em geral esta afirmação é introduzida na teoria como um postulado e como consequência deste e de outros postulados temos efeitos de interferência como, por exemplo, aqueles observados na experiência da dupla fenda.

Tomemos por exemplo um estado $|\psi\rangle$ tal que

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \quad (2.1)$$

com $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ autoestados de um observável B associados a diferentes autovalores b_1 e b_2 . Efetuando uma medida de B há uma probabilidade $|\lambda_i|^2$ de encontrar o sistema no estado $|\psi_i\rangle$. Porém deve-se tomar cuidado com o significado desta afirmação, pois ela pode nos levar a pensar que em um ensemble de N sistemas no estado $|\psi\rangle$, $N |\lambda_i|^2$ deles estariam no estado $|\psi_i\rangle$ o que representa uma mistura estatística dos estados $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$. Veremos abaixo que tal interpretação não é correta.

Supondo que se queira medir um outro observável A , que não comuta com B , definido da

¹Esta é a chamada interpretação de Copenhagen. Einstein e outros acreditavam que a função de onda não dava toda a informação sobre o sistema, mas somente uma informação estatística sobre um ensemble de sistemas idênticos. Estas idéias geraram as teorias conhecidas como teorias de variáveis ocultas e as interpretações probabilísticas da Mecânica Quântica.

seguinte maneira:

$$A |v_n\rangle = a_n |v_n\rangle. \quad (2.2)$$

A probabilidade de se obter como resultado o valor a_n é

$$P(a_n) = |\langle v_n | \psi \rangle|^2 = |\lambda_1 \langle v_n | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle v_n | \psi_2 \rangle|^2. \quad (2.3)$$

Desse modo $P(a_n)$ é o quadrado do módulo da soma das amplitudes de probabilidade. Portanto irão existir termos de interferência entre os estados $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$, dados pelos módulos de λ_1 e λ_2 e pela fase relativa entre eles, que não estariam presentes numa mistura estatística.

Logo, cada sistema está em um estado $|\psi\rangle$ que, do ponto de vista clássico, não seria um estado bem definido, pois é uma superposição de estados possíveis representando diferentes alternativas. Por causa dos efeitos de interferência, esse estado é chamado de uma superposição coerente dos estados $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ em que, apesar da possibilidade de obter os dois estados como resultado de uma medida, não se pode afirmar que o sistema está em um dos estados antes dela.

A fim de dar uma sequência à nossa discussão de uma forma mais quantitativa e conveniente introduzimos o conceito de operador densidade que é definido como

$$\hat{\rho} = \sum_a p_a |\psi^{(a)}\rangle \langle \psi^{(a)}|,$$

onde $\{p_a\}$ é uma distribuição clássica de probabilidades, $\sum_a p_a = 1$, e $|\psi^{(a)}\rangle$ qualquer estado puro.

Quando $|\psi^{(a)}\rangle$ é dado por (2.1) e $p_a = 1$, podemos dizer que a interferência está contida nos termos não diagonais da matriz que representa $\hat{\rho}$. Por exemplo, na base dos autovetores de B ,

$$\rho = \begin{bmatrix} |\lambda_1|^2 & \lambda_1 \lambda_2^* \\ \lambda_1^* \lambda_2 & |\lambda_2|^2 \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

No entanto, devemos tomar cuidado com o fato de que a matriz que representa $\hat{\rho}$ depende da base escolhida. Assim podemos escolher uma base na qual a coerência não estará em evidência.

Tomando o devido cuidado podemos dizer que a diferença entre uma mistura estatística e um estado puro, no qual temos coerência, está nos elementos não diagonais que serão chamados de coerências, por motivos óbvios. Também vale lembrar que estes efeitos de interferência devidos à coerência só aparecem quando efetuamos medidas em observáveis que não comutam com B .

2.2 Acoplamento com um segundo sistema

Vamos analisar agora os efeitos da coerência quando acoplamos um segundo sistema (2) ao nosso sistema (1). Considerando que inicialmente o sistema (2) se encontra no estado $|0\rangle$, o estado do

sistema composto 1+2 é dado por

$$|\Phi\rangle = |\psi\rangle \otimes |0\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle \otimes |0\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \otimes |0\rangle. \quad (2.5)$$

Quando os dois sistemas começarem a interagir não poderemos mais, em geral, atribuir um único ket a cada um dos sistemas de forma que só poderemos falar da função de onda do sistema total.

Supondo que temos uma Hamiltoniana de interação de forma que cada estado evolua no tempo da seguinte maneira:

$$|\psi_1\rangle \otimes |0\rangle \longrightarrow |\psi_1\rangle \otimes |1\rangle \quad (2.6)$$

e

$$|\psi_2\rangle \otimes |0\rangle \longrightarrow |\psi_2\rangle \otimes |2\rangle, \quad (2.7)$$

onde $|1\rangle$ e $|2\rangle$ são autoestados de (2), o estado do sistema composto, após a interação, pode ser escrito como

$$|\Phi'\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle \otimes |1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \otimes |2\rangle, \quad (2.8)$$

que é uma superposição coerente de estados do sistema total. Se quisermos efetuar uma medida em somente uma das partes do sistema, (1) por exemplo, deveremos usar o operador densidade reduzido de (1), $\hat{\rho}(1)$, que na base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ é representado pela seguinte matriz

$$\hat{\rho}(1) = \text{Tr}_2 \hat{\rho}(1,2) = \begin{bmatrix} |\lambda_1|^2 (1 + |\langle 1|2\rangle|^2) & 2\lambda_1\lambda_2^* \langle 2|1\rangle \\ 2\lambda_1^*\lambda_2 \langle 1|2\rangle & |\lambda_2|^2 (1 + |\langle 1|2\rangle|^2) \end{bmatrix}. \quad (2.9)$$

Com o operador densidade reduzido $\hat{\rho}(1)$ podemos obter todos os resultados sobre medidas feitas somente no sistema 1². Neste sentido podemos dizer que $\hat{\rho}(1)$ representa o estado do sistema 1, apesar de que não podemos atribuir um ket ao sistema 1 sozinho.

Aqui novamente os termos não diagonais representam possíveis interferências em uma medida no sistema 1, sendo estes proporcionais ao produto interno $\langle 1|2\rangle$. Logo se os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$, que se correlacionaram com os estados do sistema 1, forem ortogonais teremos uma perda de coerência no sistema 1, ou decoerência. O produto interno $\langle 1|2\rangle$ nos dá uma medida da coerência ainda existente no sistema 1. Lembrando que mesmo tendo $\langle 1|2\rangle = 0$ o sistema total 1+2 ainda estará em um estado de superposição, a coerência só é eliminada do sistema 1 quando fazemos o traço parcial em relação às coordenadas do sistema 2.

Estes resultados têm uma implicação direta no problema da medida, pois, segundo a interpretação de Copenhagen, quando efetuamos uma medida, ocorre o colapso ou redução da função de onda. O postulado do colapso foi introduzido devido ao fato de que antes da medida tínhamos

² $\hat{\rho}(1)$ carrega a influência do sistema (2) em (1) quando estes estão correlacionados, o que é o nosso caso. $\hat{\rho}(1)$ é obtido tomando o traço em relação às variáveis do sistema 2 e pode ser mostrado que $\hat{\rho}(1)$ satisfaz todas as regras obedecidas por um operador densidade geral.

um estado de superposição e sempre que a efetuávamos obtínhamos somente uma das possibilidades. Esta transição não poderia ter como origem a equação de Schrödinger que fornece uma evolução temporal unitária.

Nesta interpretação o processo de medida específico não é questionado, sendo o aparato de medida considerado como clássico e o resultado da medida dado pelos postulados da mecânica quântica. Questionamentos de como se dá o colapso são considerados sem sentido. Dirac[6], ao analisar a passagem dos fótons de um feixe polarizado através de um polarizador, diz explicitamente; ... "questions about...how it changes its direction of polarization when its does go through cannot be investigated by experiment and should be regarded as outside the domain of science".

No entanto, podemos tentar considerar o aparato de medida como quântico, já que este é feito de átomos. Neste caso o processo de medida seria descrito através de uma interação, entre o aparato e o sistema a ser medido, de tal modo que o estabelecimento da correlação entre eles nos permitiria saber o estado do sistema através do estado do aparato.

O aparato de medida seria o sistema 2 do exemplo acima de modo que após a interação teríamos um estado de superposição, no qual os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ seriam distinguíveis macroscopicamente para que pudéssemos efetuar a medida. Então teríamos uma superposição de estados macroscopicamente distintos, tal como duas posições de um ponteiro, o que é uma situação inusitada. Para "resolver" este problema, conhecido como gato de Schrödinger, devemos lembrar que o aparato em geral possui um grande número de graus de liberdade que não podem ser controlados e assim devemos fazer o traço parcial em relação a estes graus de liberdade.

Temos então

$$|\Phi'\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle \otimes |1\rangle_R \otimes |1\rangle_I + \lambda_2 |\psi_2\rangle \otimes |2\rangle_R \otimes |2\rangle_I, \quad (2.10)$$

com os índices I e R se referindo, respectivamente, aos graus de liberdade irrelevantes, que não são medidos, e relevantes do aparato. Se tivermos ${}_I\langle 1|2\rangle_I \approx 0$, ao fazermos o traço em relação aos graus de liberdade irrelevantes, temos uma mistura estatística. Em geral a destruição dos elementos não diagonais não é instantânea sendo o tempo gasto para sua ocorrência chamado de tempo de decoerência, o qual depende da dinâmica do sistema. O efeito da decoerência não resolve completamente o problema da medida em mecânica quântica, mas ao menos pode elucidar como um estado puro do aparato de medida se transforma em uma mistura estatística cujo comportamento pode ser compreendido em termos da teoria estatística clássica.

Nesse capítulo fizemos uma introdução à coerência, ao problema da medida e mostramos em que condições o acoplamento de um sistema com outro, pode destruir a coerência em um deles. No próximo capítulo introduziremos o problema da coerência em um Interferômetro de Stern-Gerlach.

Capítulo 3

Interferômetro de Stern-Gerlach

Neste capítulo faremos uma pequena revisão da literatura, mostrando o que tem sido feito em relação à possibilidade de recombinar os dois feixes originários de um experimento de Stern-Gerlach.

3.1 ISG com Campo Clássico

Nas referências [1] e [2] os autores fizeram um primeiro estudo da perda de coerência na tentativa de recombinar os feixes resultantes de uma experiência de Stern-Gerlach, experiência esta conhecida como Interferômetro de Stern-Gerlach (ISG). Para que o ISG seja capaz de separar e recombinar o feixe de partículas incidentes ele deve ter um campo magnético cuja componente na direção $\hat{z}$ dependa da posição na direção de incidência, $\hat{y}$, e seja uma função ímpar desta, tal como nas figuras abaixo.

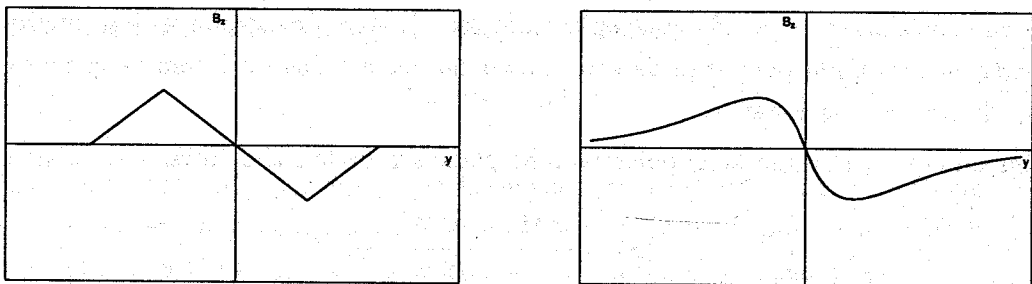


Figura 3.1: Exemplos de possíveis campos magnéticos anti-simétricos.

O ISG pode ser dividido em duas partes: a primeira seria um aparato de Stern-Gerlach responsável pela separação dos pacotes e a segunda responsável por recombiná-los. Em cada uma destas partes as partículas seriam aceleradas e depois freadas de modo que, no final do ISG, saíssem juntas sem aceleração na direção $\hat{z}$. Em termos dos campos magnéticos o ISG pode ser dividido em três partes, cada uma delas com diferentes valores para o gradiente do campo

magnético na direção $\hat{z}$. Na figura abaixo mostramos um esquema para o ISG tal como proposto em[1].

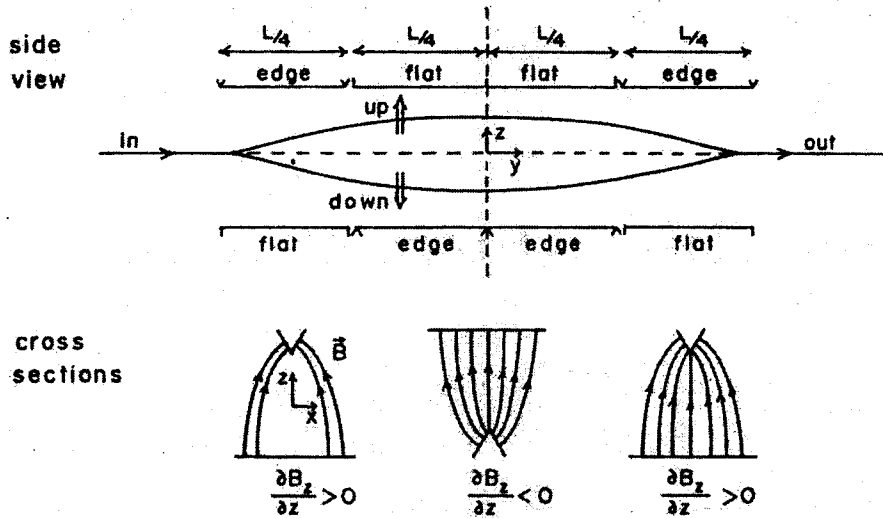


Figura 3.2: Esquema para o ISG.

Em geral, consideraremos uma configuração de campo magnético como a da esquerda da figura 3.1, pois nela o gradiente do campo tem módulo constante, só variando seu sentido. A configuração da direita da figura 3.1 seria mais realista, entretanto não possibilitaria uma solução exata do problema.

Este problema é análogo ao exposto no capítulo 1, no qual temos um sistema 1, aqui dado pelo spin, que é acoplado ao sistema 2, aqui as coordenadas da partícula, e queremos estudar a perda da coerência em 1 devido ao acoplamento com 2. Como mostrado na introdução a perda de coerência será dada pelo grau de ortogonalidade dos estados de 2 com os quais os estados iniciais de 1 se correlacionarem.

Supondo que temos um feixe polarizado no plano xy , podemos escrever seu estado como

$$|S\rangle = \frac{e^{-i\frac{\phi}{2}}|+\rangle + e^{i\frac{\phi}{2}}|-\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.1)$$

uma superposição coerente dos autoestados de S_z . Para detectar os efeitos de coerência e diferenças entre o estado puro e uma mistura estatística, devemos efetuar medidas em observáveis que não comutam com S_z , por exemplo S_x e S_y .

O campo magnético acopla a parte de spin da função de onda com suas respectivas partes espaciais ficando

$$|S, \psi_r\rangle = \frac{e^{-i\frac{\phi}{2}}|+, \psi_r^+\rangle + e^{i\frac{\phi}{2}}|-, \psi_r^-\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (3.2)$$

Assumindo que a parte espacial ($\langle \vec{r} | \psi_r^\pm \rangle$) da função de onda é real obtemos

$$\langle S, \psi_r | S_x | S, \psi_r \rangle = \frac{\hbar \langle \psi_r^+ | \psi_r^- \rangle \cos \varphi}{2}, \quad (3.3)$$

$$\langle S, \psi_r | S_y | S, \psi_r \rangle = \frac{\hbar \langle \psi_r^+ | \psi_r^- \rangle \sin \varphi}{2}. \quad (3.4)$$

Para que tenhamos total coerência de spin devemos ter

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \varphi \quad (3.5)$$

e

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \varphi \quad (3.6)$$

Deste modo a preservação da coerência depende do produto interno $\langle \psi_r^+ | \psi_r^- \rangle$, conforme enunciado no capítulo 2, que nos fornece o quão recombinados os feixes estão. Para uma recombinação perfeita dos feixes, $\langle \psi_r^+ | \psi_r^- \rangle = 1$, não teremos nenhuma perda de coerência. Medindo $\langle S_x \rangle$ e $\langle S_y \rangle$, uma medida indireta de $\langle \psi_r^+ | \psi_r^- \rangle$, obtemos a grau de perda da coerência.

Nos dois primeiros artigos citados anteriormente [1, 2] os autores trataram a dinâmica espacial da função de onda, tratamento este que reproduziremos a seguir.

Supomos que as partículas do feixe são neutras e possuem momento magnético $\vec{\mu}$ dado por

$$\vec{\mu} = \mu \vec{\sigma}, \quad (3.7)$$

com as componetes de $\vec{\sigma}$ as conhecidas matrizes de Pauli.

O feixe incide na direção $\hat{y}$ e o campo magnético não homogêneo está direcionado ao longo de $\hat{z}$, de modo que temos uma força agindo sobre as partículas,

$$\vec{F} = \nabla (\vec{\mu} \cdot \vec{B}). \quad (3.8)$$

Esta força será responsável por separar o feixe em dois, os quais tentaremos recombinar. Neste momento temos que assumir algumas simplificações a fim de resolver o problema. Primeiramente consideramos que a partícula manterá uma velocidade constante ao longo da direção $\hat{y}$, o que nos permite trocar a dependência do campo em y por uma dependência em t . Em segundo lugar consideramos que as componentes x e y do campo são desprezíveis e que o deslocamento em z é suficientemente pequeno em relação ao centro, para justificar uma expansão linear de B_z . Matematicamente temos

$$\vec{B}(\vec{r}) \longrightarrow B_z(t, z) \cong B(t) + z \frac{\partial}{\partial z} B(t). \quad (3.9)$$

Vale lembrar que estamos desconsiderando o fato de que existem componentes do gradiente de $\vec{B}$ no plano xy , já que devemos ter $\nabla \cdot \vec{B} = 0$, e que existem zonas de transição nas quais o

gradiente do campo deve mudar de direção.

Com estas simplificações obtemos o seguinte Hamiltoniano para o nosso sistema

$$H = \frac{p^2}{2m} - \varepsilon(t)\sigma_z - F(t)z\sigma_z, \quad (3.10)$$

no qual definimos $\varepsilon(t) \equiv \mu B(t)$ como um parâmetro de energia e $F(t) \equiv \mu \partial B / \partial z$ como um parâmetro de força. Aqui escrevemos p para a componente z do momento linear.

Usando as relações de comutação entre p e z e entre as componentes de $\vec{\sigma}$, obtemos as seguintes equações de Heisenberg para os operadores:

$$\frac{dp(t)}{dt} = F(t)\sigma_z, \quad \frac{dz(t)}{dt} = \frac{p}{m}, \quad \frac{d\sigma_z(t)}{dt} = 0, \quad (3.11)$$

$$\frac{d\sigma_{\pm}(t)}{dt} = \frac{2\sigma_{\pm}(t)}{i\hbar} (\varepsilon(t) + F(t)z(t)), \quad (3.12)$$

$$\sigma_{\pm}(t) = \sigma_x(t) \pm i\sigma_y(t). \quad (3.13)$$

Integrando estas equações, e usando que

$$\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' F(t'') = \int_0^t (t - t') F(t') dt', \quad (3.14)$$

obtemos as seguintes equações de movimento para os operadores

$$z(t) = z(0) + \frac{p(0)t}{m} + \sigma_z(0) \left[\frac{t\Delta p(t)}{m} - \Delta z(t) \right], \quad (3.15)$$

$$p(t) = p(0) + \sigma_z(0)\Delta p(t), \quad \sigma_z(t) = \sigma_z(0), \quad (3.16)$$

$$\sigma_{\pm}(t) = \sigma_{\pm}(0) \exp [-i(\Phi(t) + 2z(0)\Delta p(t)/\hbar + 2p(0)\Delta z(t)/\hbar)], \quad (3.17)$$

nas quais definimos

$$\Delta p(t) = \int_0^t dt' F(t'), \quad \Delta z(t) = \int_0^t dt' t' F(t')/m, \quad (3.18)$$

$$\Phi(t) = \frac{2}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon(t'), \quad \overline{\Delta z(t)} = \frac{t\Delta p(t)}{m} - \Delta z(t). \quad (3.19)$$

O termo $\overline{\Delta z(t)}$ mede a separação entre os pacotes no espaço de coordenadas, enquanto que $\Delta p(t)$ mede a separação dos pacotes no espaço de momento. Já $\Phi(t)$ é a precessão de Larmor acumulada.

No caso de partículas incidentes no autoestado de S_x com autovalor positivo temos

$$\langle S_x(0) \rangle = \frac{\hbar}{2}, \quad \langle S_y(0) \rangle = \langle S_z(0) \rangle = 0, \quad (3.20)$$

$$\langle S_x(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} C(t) \cos \Phi(t), \quad (3.21)$$

e

$$\langle S_y(t) \rangle = -\frac{\hbar}{2} C(t) \sin \Phi(t), \quad (3.22)$$

onde

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi^*(z - \Delta z(t)) e^{-2iz\Delta p(t)/\hbar} \psi(z + \Delta z(t)). \quad (3.23)$$

O valor da função $C(t)$ nos dá uma medida do overlap dos pacotes de onda no espaço de coordenadas com uma fase adicional. Esta fase resultante da evolução temporal, $-2iz\Delta p(t)/\hbar$, tem como origem a separação dos pacotes no espaço de momento, o que também pode levar à perda de coerência.

Com estes resultados, podemos imaginar que quando a partícula entra no campo magnético no estado $|+\rangle_x$ seu spin começa a precessionar em torno do eixo $\hat{z}$. Se não considerarmos a parte espacial, que está contida em $C(t)$, teremos um máximo de coerência quando o valor do ângulo $\Phi(t)$ for um múltiplo de 2π , de modo que o spin terá voltado ao seu estado inicial.

A introdução da parte espacial faz com que, além da precessão em torno do eixo $\hat{z}$, possa haver uma mudança no módulo da componente do spin no plano xy . Assim para termos um máximo de coerência também devemos ter $C(t) = 1$, sendo o valor de $C(t)$ uma medida da perda de coerência¹.

Para que tenhamos uma recombinação perfeita, com total recuperação da coerência, devemos ter $\Delta p(T) = \Delta z(T) = 0$, com T o tempo de duração da experiência. Escrevendo o gradiente do campo, ou a "força" $F(t)$, como seu valor médio mais flutuações temos

$$\Delta z(T) = \int_0^T dt \frac{t}{m} (\langle F(t) \rangle + \delta F(t)) = \int_0^T dt \frac{t}{m} \delta F(t) \quad (3.24)$$

com

$$\int_0^T dt \frac{t}{m} \langle F(t) \rangle = 0. \quad (3.25)$$

Deste modo a recuperação da coerência depende da precisão no controle do campo externo. Em nosso ISG esperamos que entre $t = 0$ e $t = T/2$ os feixes sejam separados, tendo sua máxima separação em $t = T/2$, para depois serem recombinados. Se conseguíssemos controlar as flutuações do campo de modo que $\delta F(t)$ fosse uma função simétrica em relação ao eixo $t = T/2$, teríamos uma recuperação completa da coerência.

Sendo δz a largura do pacote de onda inicial a razão $\frac{\Delta z(T)}{\delta z}$ nos fornece uma medida da

¹Vale resaltar que a perda de coerência devida ao acoplamento com o segundo grau de liberdade (posição) está incluída em C . O ângulo $\Phi(t)$ na verdade se deve unicamente à dinâmica do sistema 1 independentemente do sistema 2. Para múltiplos de 2π teremos de volta o valor médio de S_x e S_y , porém ângulos diferentes de 2π não implicam em uma perda de coerência no sentido que ainda temos um estado puro. Também devemos lembrar que só obtemos o ket inicial após uma rotação de 4π .

recuperação da coerência, pois podemos ver que quando $\Delta z(T) \gg \delta z$ a integral em $C(t)$ é quase nula.

Tomando $\delta F(t) = \delta F$, obtemos

$$\Delta z(T) = \frac{T^2}{2m} \delta F. \quad (3.26)$$

No caso em que $F(t)$ varia abruptamente nas quatro regiões do interferômetro entre os valores $-F_0$ e F_0 , temos a seguinte separação para os pacotes em $t = T/2$:

$$\overline{\Delta z(T/2)} = \frac{F_0}{16m} T^2. \quad (3.27)$$

A condição de separação macroscópica fica

$$\overline{\Delta z(T/2)} \gg \delta z \implies \frac{F_0}{16m} T^2 \gg \delta z \quad (3.28)$$

e usando a equação 3.26 obtemos

$$\frac{F_0}{16} \frac{\overline{\Delta z(T)}}{\delta F} \gg \delta z \implies \frac{\delta F}{F_0} \ll \frac{1}{16} \frac{\overline{\Delta z(T)}}{\delta z}. \quad (3.29)$$

Para $\frac{\overline{\Delta z(T)}}{\delta z} \simeq 1$ e uma separação macroscópica tal que $\overline{\Delta z(T/2)} \approx 10^2 \delta z$ temos

$$\frac{\delta F}{F_0} \simeq 10^{-3}. \quad (3.30)$$

Assim para a recuperação de uma certa coerência, $\frac{\overline{\Delta z(T)}}{\delta z} \simeq 1$, precisamos de uma precisão no controle do campo de uma parte em mil.

Os autores concluem que para termos uma recuperação de coerência de 99%(80%) precisaríamos de uma precisão no campo de pelo menos $10^{-5}(10^{-3})$. Estes valores para a precisão do campo, na verdade, dão limites inferiores da precisão requerida, já que as aproximações feitas influenciam na direção do sucesso da experiência. Vamos analisá-las.

Primeiro ignoramos a variação da velocidade na direção y , o que na verdade ocorre devido à dependência da energia potencial em relação a esta coordenada. Esta mudança na velocidade é diferente para os dois feixes, já que um deles vai ganhar energia potencial enquanto que o outro irá perdê-la, causando assim um deslocamento na direção y , dificultando, ainda mais, a recombinação dos feixes que também terá que ser feita nesta direção. Além disso há a possibilidade de reflexões nas regiões de mudança do campo magnético.

Uma segunda aproximação feita foi a de que o campo seria unidimensional. Na verdade devemos ter componentes nas direções $\hat{x}$ e $\hat{y}$, desde que $\nabla \cdot \vec{B} = 0$, que farão com que S_z dependa do tempo da seguinte forma:

$$\frac{dS_z}{dt} = \frac{i}{\hbar} \mu (\sigma_+ B_- - \sigma_- B_+). \quad (3.31)$$

Para que esta aproximação seja plausível e S_z continue sendo uma constante do movimento

σ_+ e σ_- devem oscilar rapidamente no tempo, o que ocorre quando B_z é muito maior que B_x e B_y .

As componentes de B no plano xy também implicam em uma deflexão na direção $\hat{x}$,

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = \mu \frac{\partial}{\partial x} \left(\sigma_z B_z + \frac{1}{2} \sigma_+ B_- + \frac{1}{2} \sigma_- B_+ \right), \quad (3.32)$$

que será desprezível quando $\partial B_z / \partial x = 0$ e $\sigma_{\pm}$ oscilarem rapidamente no tempo.

Em suma, nas referências [1, 2] determina-se uma relação quantitativa entre a recuperação da coerência e a precisão na determinação do campo magnético. O campo, por outro lado, é tratado classicamente sem qualquer tentativa de se descrever as suas possíveis fontes de imprecisão. O objetivo deste trabalho é fazer uma descrição do campo, levando-se em conta as suas flutuações térmicas e quânticas.

3.2 Efeitos da medida

Anteriormente analisamos a perda de coerência devida à correlação do spin com a coordenada da partícula. Podemos agora pensar no que aconteceria se colocássemos em uma das trajetórias um detector, que nos permitisse saber se a partícula passou por ali, tendo assim um acoplamento do spin com o detector. Esta análise foi feita em [3]. É assumido que conseguimos obter a recombinação perfeita dos feixes na ausência do detector.

Em uma primeira análise pensamos em um detector composto por um átomo (não usaremos o nome partícula a fim de não confundí-lo com as partículas do feixe) que é espalhado pela partícula. Detectando a mudança de momento linear do átomo podemos concluir que a partícula passou por ali. Para que possamos detectar esta mudança no momento do átomo o momento transferido, Δp , deve ser maior que a largura do seu pacote de onda no espaço de momento, δp . Como as larguras dos pacotes no espaço de coordenadas, da partícula e do átomo, devem ser comparáveis para que tenhamos uma colisão entre eles, então δp da partícula e do átomo também são comparáveis.

De forma a garantir a conservação do momento linear deve haver uma mudança no momento da partícula de $-\Delta p$. Lembrando do primeiro experimento que para preservar a coerência precisamos justamente do oposto, ou seja, que o momento ganho pela partícula seja pequeno em relação a δp , somos levados a concluir que se conseguirmos detectar a passagem da partícula teremos uma perda de coerência na recombinação dos feixes.

Um segundo tipo de detector seriam cavidades maser. Podemos adicionar a uma das trajetórias, a superior por exemplo, duas cavidades maser preparadas de modo que possamos considerar somente um modo de frequência ω excitado, e que a probabilidade de ocorrer um spin-flip nas cavidades seja praticamente 1.

Também acrescentamos ao aparato um campo magnético uniforme B_0 , tal que a diferença

de energia entre os estados de spin up e spin down seja igual à energia de um fóton da cavidade,

$$2\mu B_0 = \hbar\omega. \quad (3.33)$$

Deste modo irá ocorrer um acoplamento entre os campos da cavidade e o feixe de spin up, sendo que este acoplamento poderá provocar a perda de coerência.

Consideremos agora duas situações: primeiro temos as cavidades preparadas em um estado de número, ou seja as cavidades contêm um número definido de fótons, sendo o seu estado inicial $|N_1 N_2\rangle$. No limite de N grande o estado final, após interação, do sistema completo é

$$\begin{aligned} |t_f\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}} [-i\omega (t_f - t_i) (N_1 + N_2)] \left[e^{-\frac{i}{2}\Phi} |N_1 + 1, N_2 - 1, \sigma_z = +\rangle + \right. \\ & \left. + e^{\frac{i}{2}\Phi} |N_1, N_2, \sigma_z = -\rangle \right], \end{aligned} \quad (3.34)$$

com Φ o ângulo de precessão do spin. Na equação acima os estados de spin se acoplam a estados ortogonais da cavidade e temos uma mistura estatística dos estados de spin quando fazemos o traço sobre os estados da cavidade. Logo a interação com a cavidade resulta em uma perda da coerência de spin.

Preparando agora as cavidades em um estado coerente $|\alpha_1 \alpha_2\rangle$, no qual não temos um número definido de fótons, obtemos um estado final, no limite de N grande, dado por

$$|t_f\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} [-i\omega (t_f - t_i) (N_1 + N_2)] \left[-e^{-\frac{i}{2}\Phi} |\alpha_1, \alpha_2, \sigma_z = +\rangle + e^{\frac{i}{2}\Phi} |\alpha_1, \alpha_2, \sigma_z = -\rangle \right] \quad (3.35)$$

ou ainda

$$|t_f\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} [-i\omega (t_f - t_i) (N_1 + N_2)] |\alpha_1, \alpha_2\rangle \left[-e^{-\frac{i}{2}\Phi} |\sigma_z = +\rangle + e^{\frac{i}{2}\Phi} |\sigma_z = -\rangle \right]. \quad (3.36)$$

Neste caso a coerência é preservada devido ao fato de que os estados de spin se acoplam a aproximadamente o mesmo estado da cavidade, não se acoplando assim a estados ortogonais como no caso anterior. Vale ressaltar o fato de que no primeiro caso é possível saber se a partícula passou pelo detector, descobrindo assim o caminho feito por ela, o que é impossível no segundo caso.

Sempre que conseguirmos saber se a partícula passou pelo detector haverá uma perda de coerência. Isto pode ser explicado da seguinte maneira: o detector foi colocado em somente um dos caminhos e assim, em analogia com o esquema do capítulo 2, temos o estado final do sistema após a interação como

$$|\Phi'\rangle = |+\rangle \otimes |1\rangle + |-\rangle \otimes |0\rangle, \quad (3.37)$$

no qual o spin para baixo se acopla com o estado inicial do detector, já que não interagiu com ele, e o spin para cima se acopla com um estado do detector que chamamos de $|1\rangle$. Se quisermos

detectar a passagem da partícula devemos conseguir diferenciar o estado $|1\rangle$ do detector do seu estado inicial $|0\rangle$, o que implica $\langle 1|0\rangle \approx 0$, que tem como consequência a perda da coerência no sistema 1, como mostrado no capítulo 2.

Neste exemplo os campos das cavidades foram tratados quanticamente, porém o campo externo que produz a separação dos feixes, não o foi. Como dito anteriormente nosso objetivo é incluir um tratamento quântico desse campo externo na análise da coerência. Porém consideraremos a experiência básica do interferômetro sem as cavidades.

3.3 Efeitos das Flutuações na precessão do spin

Neste último e mais recente trabalho[4], o autor trata o campo magnético quanticamente, o que introduz os efeitos das inevitáveis flutuações térmicas do campo eletromagnético. Porém só é tratada a parte de spin da função de onda, considerando que a parte espacial é recombinada perfeitamente.

Em um primeiro momento o campo magnético é escrito como a soma de seu valor médio macroscópico com o das flutuações. Estas flutuações são tratadas quanticamente, sendo assim escritas como um conjunto de osciladores harmônicos. Considera-se também que o campo não varia com a posição sendo assim uniforme e não atuando na parte espacial da função de onda.

Fazendo uso dessas considerações e de um cálculo perturbativo é obtido o seguinte resultado:

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} e^{-\Gamma t} \cos(\omega_0 t), \quad (3.38)$$

com

$$\Gamma = \frac{\hbar}{2} J(\omega_0) \coth\left(\frac{\hbar\omega_0}{2\kappa T}\right). \quad (3.39)$$

Nesta expressão $C(t) = 1$, já que não consideramos a parte espacial, ω_0 é a frequência de precessão do spin e $J(\omega_0)$ é a função espectral do reservatório de osciladores. Para um campo de 10^2 Gauss temos $\omega_0 \approx 10^5 s^{-1}$ e

$$\frac{\hbar\omega_0}{2\kappa T} \approx \frac{10^{-6}}{T}. \quad (3.40)$$

Logo, mesmo para baixas temperaturas, tais que $T > 10^{-3} K$, podemos escrever

$$\Gamma t = \frac{8}{3} \frac{\kappa T}{c^3/\gamma^2} \omega_0 (\omega_0 t) \quad (3.41)$$

pela qual concluímos que a magnitude do fator exponencial Γt , é determinada pela comparação das quantidades κT , $\frac{c^3}{\gamma^2}$, ω_0 e a escala de tempo da experiência. O fator $\frac{c^3}{\gamma^2}$ mede a energia de interação por unidade de tempo, enquanto κT fornece a escala de energia dos modos excitados do reservatório. Portanto, a razão $\tau_f = \frac{\kappa T}{c^3/\gamma^2}$, fornece a escala de tempo das flutuações sentidas

pelo spin. Para uma temperatura $T \approx 10^2 K$, temos

$$\tau_f \approx 10^{-38} s.$$

Este tempo é incrivelmente mais curto que o tempo de precessão do spin $\tau_0 \approx 10^{-5} s$. Sob estas condições a expressão 3.41 toma a seguinte forma:

$$\Gamma t \approx 10^{-33} \omega_0 t.$$

Sabendo-se que a velocidade típica das partículas em experiências de Stern-Gerlach é da ordem de $10^5 cm/s$ e considerando que as distâncias típicas são da ordem de $1 cm$ temos

$$\Gamma t \approx 10^{-33}.$$

Portanto chegamos ao resultado de que as flutuações térmicas do campo eletromagnético não afetam absolutamente a coerência de spin, quando só consideramos sua influência na precessão do spin.

Neste capítulo, mostramos como vários aspectos do ISG vêm sendo tratados na literatura. Na seção 3.1 fizemos um tratamento, mais geral, considerando a precessão do spin e a separação espacial entre os pacotes. Porém, neste tratamento não consideramos as flutuações do campo. Nas seções 3.2 e 3.3 temos um tratamento quântico do campo, porém não consideramos a separação espacial entre os pacotes.

Fica faltando assim uma análise da separação espacial dos pacotes em que se faça um tratamento quântico do campo, o que será o principal objetivo deste trabalho como já anunciado anteriormente.

Capítulo 4

Dissipação

Como este trabalho pretende analisar o efeito do acoplamento da posição da partícula a um campo magnético descrito quanticamente, faremos uma introdução ao estudo do acoplamento de um sistema com outro, com muitos graus de liberdade, cujo efeito principal é a introdução de efeitos dissipativos no primeiro sistema.

Existem dois enfoques bem distintos para se tratar o problema da quantização de sistemas dissipativos. O primeiro deles envolve a tentativa de modificação do esquema de quantização canônico a fim de se quantizar sistemas físicos não hamiltonianos. Estes métodos apresentam alguns pontos obscuros no que diz respeito a certos princípios físicos.

Em um outro enfoque, o que utilizaremos, mantemos o processo de quantização inalterado, entretanto consideramos o fato de os sistemas dissipativos não serem isolados. Assim, consideramos o acoplamento do sistema com um reservatório e quantizamos o sistema total para depois eliminar as variáveis do reservatório e estudar a dinâmica efetiva do sistema de interesse.

4.1 Dissipação em Mecânica Clássica

4.1.1 Modelos Fenomenológicos

Há várias situações na natureza que podem ser adequadamente descritas por um subsistema, com poucos graus de liberdade, interagindo com outro sistema mais complexo(reservatório) cujo número de graus de liberdade é muito maior que o do primeiro.

Em geral o reservatório exerce sobre o sistema uma força que pode ser decomposta em duas partes: uma que varia lentamente e gera uma força de fricção proporcional à velocidade do sistema e outra que é uma força flutuante $F(t)$. Para um processo estocástico estacionário e gaussiano temos

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad (4.1)$$

$$\langle F(t) F(t') \rangle = C(t - t') = C(s). \quad (4.2)$$

Nesta expressão $C(t - t')$ é a chamada função de correlação¹ e só depende da diferença entre t e t' , já que o processo é estacionário. A função de correlação fornece a escala de tempo na qual as forças não estão mais correlacionadas, ou seja, não há mais memória, e caracteriza completamente o reservatório.

Também podemos definir o espectro de potência de $F(t)$ (power spectrum), $K(\omega)$, que é a transformada de Fourier da função de correlação

$$K(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds C(s) e^{i\omega s}. \quad (4.3)$$

Para um processo Markoviano, no qual não há memória (ruído branco), temos

$$C(t) = 2m\gamma k_B T \delta(t - t') \quad (4.4)$$

e

$$K(\omega) = 2m\gamma k_B T, \quad (4.5)$$

onde T a temperatura do reservatório, o que nos leva à conhecida equação de Langevin para o sistema:

$$m\ddot{q} + 2m\gamma\dot{q}(t) + V'(q) = F(t). \quad (4.6)$$

Aqui $2m\gamma\dot{q}(t)$ é a força viscosa (que causa a dissipação, neste caso linear em relação à velocidade da partícula) e γ a frequência de relaxação da partícula. Essa equação descreve uma partícula browniana pesada, de massa m , imersa em um fluido de partículas leves e sob ação de uma força sistemática $V'(q)$. O efeito médio das colisões das partículas leves na mais pesada está contido na força viscosa já que $\langle F(t) \rangle = 0$.

Um espectro de potência como o da equação 4.5, levaria à divergência de certas quantidades físicas, tal como $\langle F^2 \rangle$, devido ao fato de sua integração em relação a ω não ser finita. Contudo tal espectro de potência é uma idealização na qual o tempo de memória é nulo. Em um modelo mais realista a função delta introduzida em $C(t)$ teria uma largura finita dada pelo tempo de correlação, o que acarretaria que $K(\omega)$ fosse aproximadamente constante até uma dada frequência e depois tendesse a zero, tendo assim uma integração finita.

Nesse modelo, com memória, o coeficiente de dissipação não será mais constante o que nos leva a uma equação de Langevin modificada²:

$$m\ddot{q}(t) + 2m \int_0^t dt' \gamma(t - t') \dot{q}(t') + V'(q) = F(t). \quad (4.7)$$

¹Está função é real e par.

²Esta equação, assim como a anterior, só é válida para tempos longos comparados com o tempo de memória ou correlação que é dado por $C(s)$. Também podemos ver que a resposta do reservatório neste caso não é instantânea e depende da história do sistema, sendo este um efeito de memória. Note que a dissipação continua sendo linear.

Nesta equação podemos relacionar a transformada de Fourier de $\gamma(t)$ com as flutuações que são caracterizadas por C através de uma das formas do teorema de flutuação-dissipação[8], a saber

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{mk_B T} \int_0^\infty ds C(s) e^{i\omega s}. \quad (4.8)$$

Também podemos conectar $Re\{\gamma(\omega)\}$ ³, que nos dá a dissipação, com o espectro de potência pela seguinte relação:

$$Re\{\gamma(\omega)\} = \frac{K(\omega)}{2mk_B T}. \quad (4.9)$$

4.1.2 Banho de osciladores

Nestes modelos fenomenológicos nos quais usamos a equação de Langevin, não temos um entendimento claro da origem microscópica da dissipação. Uma possibilidade para tratar o problema de uma forma mais detalhada é tentar modelar, de forma simples, o reservatório e o sistema escrevendo suas Lagrangeanas (Hamiltonianas) de forma que as equações de Lagrange (Hamilton) resultantes gerem uma equação parecida com a de Langevin para a evolução do sistema.

A fim de que o problema seja tratável, iremos impor a restrição de que qualquer grau de liberdade do reservatório seja fracamente perturbado pelo sistema. Isto nos permite descrever o reservatório na aproximação harmônica, na qual o consideramos como um conjunto de osciladores. No caso de um reservatório bem maior que o sistema esta restrição é razoável, porém não implica em que a dissipação seja fraca já que o número de graus de liberdade do reservatório é grande. Neste sentido estamos considerando somente a resposta linear do reservatório. Além destas hipóteses nos restringiremos ao caso em que o acoplamento sistema-reservatório é linear nas coordenadas do reservatório.

Sob estas condições o sistema composto será descrito pela seguinte Lagrangeana:

$$L = L_s + L_I + L_R, \quad (4.10)$$

com

$$L_s = \frac{1}{2} M \dot{q}^2 - V_0(q), \quad (4.11)$$

$$L_I = - \sum_k C_k q q_k \quad (4.12)$$

e

$$L_R = \sum_k \left\{ \frac{1}{2} m_k \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right\}, \quad (4.13)$$

onde L_s é a langrangeana do sistema, L_R a do reservatório e L_I a de interação. A interação é do tipo coordenada-coordenada, em que cada oscilador k interage com a partícula através de uma constante de acoplamento C_k .

³Pode-se mostrar que $Re\{\gamma(\omega)\}$ está relacionada com a parte imaginária da susceptibilidade do reservatório.

Este tipo de interação gera uma correção harmônica no potencial $V_0(q)$ dada por

$$\Delta V = -\frac{1}{2} \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2. \quad (4.14)$$

Entretanto como o termo que aparece na equação fenomenológica de movimento é V_0 , devemos nos livrar desta correção espúria.

Introduzindo um termo harmônico,

$$-\frac{1}{2} \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2, \quad (4.15)$$

na Lagrangeana de interação, L_I , cancelamos a correção ΔV que surge devido à interação coordenada-coordenada⁴. Por isso iremos considerar a existência deste termo adicional para que possamos, desde o início, usar o potencial $V = V_0$. A Lagrangeana, do nosso problema fica, então,

$$L = \frac{1}{2} M \dot{q}^2 - V_0(q) + \sum_k \left\{ \frac{1}{2} m_k \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 \left[q_k + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} q \right]^2 \right\}. \quad (4.16)$$

Esperamos obter uma equação para o sistema com a forma da equação de Langevin, a partir da Lagrangeana proposta. Na equação de Langevin a dissipação é dada por γ , que é uma característica do reservatório, necessitando assim ser relacionada com os parâmetros do banho de osciladores.

Resolvendo as equações de movimento para a Lagrangeana proposta obtemos as seguintes equações:

$$M \ddot{q}(t) + V'_0(q) = - \sum_{k=1}^N C_k \left[q_k(t) + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} q(t) \right], \quad (4.17)$$

$$m_k \ddot{q}_k(t) + m_k \omega_k^2 q_k(t) = -C_k q(t). \quad (4.18)$$

Obtendo a solução da segunda equação, que é a equação de um oscilador harmônico forçado por uma força $-C_k q(t)$, e substituindo na primeira obtemos

$$M \ddot{q}(t) + V'_0(q) + \int_0^t dt' \Gamma(t-t') \dot{q}(t') = f(t), \quad (4.19)$$

com

$$\Gamma(t-t') = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos \omega_k(t-t') \quad (4.20)$$

e

⁴Se ao invés da interação coordenada-coordenada considerarmos um interação do tipo coordenada-velocidade dada por $L_I = -\sum_k \tilde{C}_k q \dot{q}_k$ então teremos $V = V_0$, ou seja não há correção do potencial.

$$f(t) = - \sum_{k=1}^N C_k \left[q_k(0) + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} \dot{q}(0) \right] \cos(\omega_k t) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k}{m_k \omega_k} \dot{q}(0) \sin(\omega_k t). \quad (4.21)$$

Chegamos, então, a uma equação na forma da equação de Langevin com a força $f(t)$ dependendo das condições iniciais do reservatório.

Para termos perda sistemática de energia da partícula para o banho (irreversibilidade) devemos considerá-lo como sendo composto por um número infinito de osciladores. Isto deve ser feito tomando o limite contínuo nas frequências dos osciladores, através da introdução da função espectral do reservatório, a saber:

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k). \quad (4.22)$$

Com esta função podemos escrever

$$\sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos \omega_k (t - t') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega (t - t'). \quad (4.23)$$

Esta manipulação faz com que a função $\Gamma(\omega)$ ganhe uma parte real dada por

$$\text{Re} \{ \Gamma(\omega) \} = \frac{1}{M} \frac{J(\omega)}{\omega}, \quad (4.24)$$

que será responsável pela dissipação. Lembremos que esta parte real aparece com a hipótese de que o reservatório é infinito e por conseguinte “rouba” a energia do sistema.

O reservatório fica totalmente caracterizado por sua função espectral que nos fornece o número de osciladores, com uma dada frequência, presentes no banho e como estes se acoplam com o sistema. $J(\omega)$ está relacionada com o coeficiente de dissipação γ que aparece na equação de Langevin; escolhendo $J(\omega)$ estaremos escolhendo o tipo de dissipação que teremos.

Por fim, para termos uma dissipação linear Ohmica, ou Markoviana, na qual o coeficiente de dissipação $\Gamma(\omega)$ é independente da frequência devemos ter

$$J(\omega) = 2M\gamma\omega\Theta(\omega_c - \omega), \quad (4.25)$$

onde $\Theta(\omega_c - \omega)$ é a função degrau de Heaviside, sendo introduzida aqui para evitar que algumas grandezas físicas divirjam, já que $J(\omega)$ deve ir a zero no limite $\omega \rightarrow \infty$. Esta forma de $J(\omega)$ estabelece a escala de tempo do problema. Para $t \lesssim \omega_c^{-1}$ o movimento da partícula é insensível à presença do banho. Portanto estamos interessados em $t \gg \omega_c^{-1}$.

4.2 Dissipação em Mecânica Quântica

Na seção anterior obtivemos uma Lagrangeana, que fornece uma dinâmica dissipativa clássica para o sistema. A dissipação deste mesmo sistema em Mecânica Quântica é obtida ao quantizarmos o sistema composto. Faremos esta quantização da forma usual, para depois calcular o operador densidade reduzido do sistema, já que estamos interessados somente na sua dinâmica.

Introduzindo o vetor $\vec{R} \equiv (R_1, \dots, R_N)$, em que R_k é o valor assumido pela coordenada q_k do k -ésimo oscilador temos

$$\hat{\rho}(t) = e^{-iHt/\hbar} \hat{\rho}(0) e^{iHt/\hbar}. \quad (4.26)$$

Na representação de coordenadas podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle x\vec{R} | \hat{\rho}(t) | y\vec{Q} \rangle &= \int \int \int \int dx' dy' d\vec{R}' d\vec{Q}' \langle x\vec{R} | e^{-iHt/\hbar} | x'\vec{R}' \rangle * \\ &* \langle x'\vec{R}' | \hat{\rho}(0) | y'\vec{Q}' \rangle \langle y'\vec{Q}' | e^{iHt/\hbar} | y\vec{Q} \rangle, \end{aligned} \quad (4.27)$$

onde usamos a relação de completeza

$$\int \int dx' d\vec{R}' | x'\vec{R}' \rangle \langle x'\vec{R}' | = 1 \quad (4.28)$$

e consideramos x e y como a representação de coordenadas do sistema. Lembrando a definição dos propagadores de Feynman[10]

$$K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) = \langle x\vec{R} | e^{-iHt/\hbar} | x'\vec{R}' \rangle, \quad (4.29)$$

temos

$$\begin{aligned} \langle x\vec{R} | \hat{\rho}(t) | y\vec{Q} \rangle &= \int \int \int \int dx' dy' d\vec{R}' d\vec{Q}' K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) * \\ &* K^*(y, \vec{Q}, t; y', \vec{Q}', 0) \langle x'\vec{R}' | \hat{\rho}(0) | y'\vec{Q}' \rangle. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Tomando o traço em relação às variáveis do banho, o operador densidade reduzido do sistema fica

$$\tilde{\rho}(t) = \int d\vec{R} \langle \vec{R} | \hat{\rho}(t) | \vec{R} \rangle, \quad (4.31)$$

que na representação de coordenadas toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(x, y, t) &= \int d\vec{R} \langle x\vec{R} | \hat{\rho}(t) | y\vec{R} \rangle = \int \int \int \int \int d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' dx' dy' K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) * \\ &* K^*(y, \vec{Q}, t; y', \vec{Q}', 0) \langle x'\vec{R}' | \hat{\rho}(0) | y'\vec{Q}' \rangle. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Neste ponto introduziremos a primeira hipótese simplificadora; supondo que a interação

entre o sistema e o reservatório, seja ligada em $t = 0^+$, podemos dizer que os dois sistemas são separáveis em $t = 0$, matematicamente

$$\rho(x', \vec{R}', y', \vec{Q}', 0) = \rho_s(x', y', 0) \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0). \quad (4.33)$$

Na expressão acima $\hat{\rho}_s$ e $\hat{\rho}_R$ são os operadores densidade do sistema e do reservatório quando isolados em $t = 0$. Com a simplificação de que o estado inicial do sistema total é fatorizável, obtemos

$$\tilde{\rho}(x, y, t) = \int \int dx' dy' J(x, y, t; x', y', 0) \tilde{\rho}(x', y', 0). \quad (4.34)$$

Acima definimos a função

$$\begin{aligned} J(x, y, t; x', y', 0) &\equiv \int \int \int d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) * \\ &* K^*(y, \vec{Q}, t; y', \vec{Q}', 0) \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0), \end{aligned} \quad (4.35)$$

e identificamos $\rho_s(0)$ com $\tilde{\rho}(0)$. A função J funciona como um super-propagador, em analogia com os propagadores utilizados na evolução de uma função de onda, que rege a evolução temporal de $\tilde{\rho}$ e contém a influência do reservatório.

Deste modo temos que calcular os propagadores do sistema composto R+S, podendo isto ser feito através do emprego dos auto estados de R+S o que em geral é bem trabalhoso(ver [10]).

Uma outra possibilidade é usar a representação de integrais funcionais (ou de caminhos) para os propagadores, que é dada por

$$K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) = \int_{x'}^x Dx(t') \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D\vec{R}(t') e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t'), \vec{R}(t')]}, \quad (4.36)$$

onde S a ação clássica correspondente ao sistema R+S e a integração se dá sobre os caminhos $x(t)$ e $\vec{R}(t)$ com os extremos

$$\begin{aligned} x(0) &= x', & x(t) &= x, \\ \vec{R}(0) &= \vec{R}', & \vec{R}(t) &= \vec{R}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Na representação de integrais funcionais o super-propagador adquire a seguinte forma,

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{i}{\hbar} S_0[x(t')]} e^{-\frac{i}{\hbar} S_0[y(t')]} F[x(t'), y(t')], \quad (4.38)$$

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

$$F[x(t'), y(t')] = \int \int \int d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) *$$

$$* K_{RI} \left(x(t'), \vec{R}(t') \right) K_{RI}^* \left(y(t'), \vec{Q}(t') \right) \quad (4.39)$$

é o chamado funcional de influência, que contém a informação sobre o reservatório na forma dos propagadores

$$K_{RI} \left(x(t'), \vec{R}(t') \right) = \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D\vec{R}(t') e^{\frac{i}{\hbar} (S_I[x(t'), \vec{R}(t')] + S_R[\vec{R}(t')])} \quad (4.40)$$

e

$$K_{RI}^* \left(y(t'), \vec{Q}(t') \right) = \int_{\vec{Q}'}^{\vec{Q}} D\vec{Q}(t') e^{-\frac{i}{\hbar} (S_I[y(t'), \vec{Q}(t')] + S_R[\vec{Q}(t')])}. \quad (4.41)$$

As ações S_R e S_I são, respectivamente, as ações do reservatório, quando isolado, e de interação. O propagador $K_{RI}(K_{RI}^*)$ é o propagador do reservatório quando sujeito a uma força externa $x(t)(y(t))$. Assim o funcional de influência acopla os caminhos $x(t)$ e $y(t)$.

O propagador K_{RI} pode ser facilmente calculado, pois é um produto de N propagadores, sendo cada um deles o propagador de um oscilador harmônico sujeito a uma força $C_k x(t)$. Isso significa que

$$K_{RI} \left(x(t'), \vec{R}(t') \right) = \prod_{k=1}^N K_{RI}^{(k)} \left(x(t'), R_k(t') \right), \quad (4.42)$$

com

$$K_{RI}^{(k)} \left(x(t'), R_k(t') \right) = \left(\frac{m_k \omega_k}{2\pi i \hbar \sin \omega_k t'} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}^{(k)}}. \quad (4.43)$$

Neste último propagador, $S_{cl}^{(k)}$ é a ação clássica do k -ésimo oscilador do reservatório sujeito à força $C_k x(t)$. Deste modo $K_{RI}^{(k)}$ vai ser uma função de R_k e R'_k , devido aos limites da integração funcional, e um funcional de $x(t')$, o que pode ser visto abaixo:

$$\begin{aligned} S_{cl}^{(k)} &= \frac{m_k \omega_k}{2 \sin(\omega_k t)} \left[(R_k^2 + R_k'^2) \cos \omega_k t - 2R_k R_k' + \frac{2C_k R_k}{m_k \omega_k} \int_0^t x(t') \sin \omega_k t' dt' + \right. \\ &+ \frac{2C_k R_k'}{m_k \omega_k} \int_0^t x(t') \sin \omega_k (t - t') dt' \left. \right] + \\ &- \frac{2C_k^2}{m_k^2 \omega_k^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' x(t') x(t'') \sin \omega_k (t - t') \sin \omega_k t''. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Assumindo que em $t = 0$ o reservatório esteja em equilíbrio térmico à temperatura T , o seu operador densidade pode ser escrito como

$$\rho_R \left(\vec{R}', \vec{Q}', 0 \right) = \prod_{k=1}^N \rho_R^{(k)} \left(\vec{R}', \vec{Q}', 0 \right) \quad (4.45)$$

com

$$\rho_R^{(k)}(\vec{R}', \vec{Q}', 0) = \frac{m_k \omega_k}{2\pi \hbar \sinh\left(\frac{\hbar \omega_k}{K_B T}\right)} \exp - \left\{ \frac{m_k \omega_k}{2\hbar \sinh\left(\frac{\hbar \omega_k}{K_B T}\right)} \left[(R_k'^2 + Q_k'^2) \cosh\left(\frac{\hbar \omega_k}{K_B T}\right) - 2R_k' Q_k' \right] \right\}. \quad (4.46)$$

Apesar de termos expressões complicadas à primeira vista, todas as integrais envolvidas no cálculo do funcional de influência F são gaussianas, o que possibilita um cálculo exato destas. Após uma longa manipulação algébrica obtemos

$$F[x(t'), y(t')] = e^{-\frac{1}{\hbar} \Phi[x(t'), y(t')]} \quad (4.47)$$

com

$$\Phi[x(t'), y(t')] = \Phi_R[x(t'), y(t')] + i\Phi_I[x(t'), y(t')], \quad (4.48)$$

$$\Phi_R = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [x(t') - y(t')] \alpha_R(t' - t'') [x(t'') - y(t'')] \quad (4.49)$$

e

$$\Phi_I = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [x(t') - y(t')] \alpha_I(t' - t'') [x(t'') + y(t'')]. \quad (4.50)$$

As características do reservatório estão contidas nas funções

$$\alpha_R(t' - t'') = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \coth\left(\frac{\hbar \omega_k}{2K_B T}\right) \cos \omega_k (t' - t'') \quad (4.51)$$

e

$$\alpha_I(t' - t'') = - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \sin \omega_k (t' - t''). \quad (4.52)$$

Utilizando a função espectral do reservatório, 4.22, temos

$$\alpha_R(t' - t'') = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar \omega}{2K_B T}\right) \cos \omega (t' - t'') \quad (4.53)$$

e

$$\alpha_I(t' - t'') = - \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin \omega (t' - t''). \quad (4.54)$$

Lembrando que estamos tomando o limite contínuo, a fim de introduzir a dissipação, e particularizando para o caso de dissipação linear Ohmica, em que utilizamos

$$J(\omega) = 2m\gamma\omega\Theta(\omega_c - \omega), \quad (4.55)$$

as expressões acima tornam-se

$$\alpha_R(t' - t'') = \frac{1}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \, 2m\gamma\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2K_B T}\right) \cos \omega(t' - t'') \quad (4.56)$$

e

$$\alpha_I(t' - t'') = -\frac{1}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \, 2m\gamma\omega \sin \omega(t' - t'') = \frac{m\gamma}{\pi} \frac{d}{d(t' - t'')} \int_0^{\omega_c} d\omega \cos \omega(t' - t''). \quad (4.57)$$

Devemos substituir estas expressões no funcional de influência, obtendo assim a parte imaginária do seu expoente como

$$\begin{aligned} \Phi_I &= \frac{m\gamma}{\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \int_0^{\omega_c} d\omega [x(t') - y(t')] \frac{d}{d(t' - t'')} \cos \omega(t' - t'') [x(t'') + y(t'')] \\ &= -\frac{m\gamma\omega_c}{\pi} \int_0^t dt' [x^2(t') - y^2(t')] + \frac{m\gamma}{\pi} (x' + y') \int_0^t dt' \frac{\sin \omega_c t'}{t'} [x(t') - y(t')] + \\ &+ \frac{m\gamma}{\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [x(t') - y(t')] \frac{\sin \omega_c(t' - t'')}{(t' - t'')} [\dot{x}(t'') + \dot{y}(t'')], \end{aligned} \quad (4.58)$$

que foi integrada por partes com relação a t'' . Podemos mostrar que o primeiro termo de Φ_I é proveniente da correção harmônica que mencionamos anteriormente (eq. 4.14), podendo então ser eliminado através do contra-termo na Lagrangeana inicial, e por isso não iremos considerá-lo.

É possível simplificar as demais integrais se lembrarmos que a nossa aproximação é válida para tempos tais que, $t \gg \omega_c^{-1}$, o que nos permite fazer a seguinte aproximação:

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin \omega_c(t' - t'')}{(t' - t'')} \approx \delta(t' - t''). \quad (4.59)$$

A segunda integral de Φ_I , no limite $t \gg \omega_c^{-1}$, é reescrita como

$$\frac{1}{\pi} \int_0^t dt' \frac{\sin \omega_c t'}{t'} [x(t') - y(t')] \rightarrow \int_0^t dt' \delta(t') [x(t') - y(t')], \quad (4.60)$$

que, como função de seu limite inferior de integração, não é contínua. Portanto devemos ter atenção em relação a este limite, que se refere à origem do tempo. Se tomarmos a origem como $t = 0^+$ esta integral será nula, devido ao fato de a função delta estar centrada em zero. Para que possamos obter as condições de contorno corretas iremos considerar a integração a partir de 0^+ , desconsiderando a fase de transiente que temos no início do movimento.

A terceira integral não apresenta essa sutileza, já que a delta contida ali não está centrada em zero e sim em t' de modo que esta integral,

$$\frac{1}{\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [x(t') - y(t')] \frac{\sin \omega_c (t' - t'')}{(t' - t'')} [\dot{x}(t'') + \dot{y}(t'')], \quad (4.61)$$

torna-se

$$\frac{1}{2} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] [\dot{x}(t') + \dot{y}(t')]. \quad (4.62)$$

Com estas considerações o expoente do funcional de influência resulta em

$$\Phi_I = m\gamma \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] [\dot{x}(t') + \dot{y}(t')], \quad (4.63)$$

$$\Phi_R = \frac{2m\gamma}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \omega \coth \left(\frac{\hbar\omega}{2K_B T} \right) \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [x(t') - y(t')] \cos \omega (t' - t'') [x(t'') - y(t'')], \quad (4.64)$$

e o super-propagador em

$$\begin{aligned} J(x, y, t; x', y', 0) &= e^{-\frac{i}{\hbar} f(x, y, x', y')} \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{i}{\hbar} S_0[x(t')]} e^{-\frac{i}{\hbar} S_0[y(t')]} * \\ &* \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ -\frac{m\gamma}{2} \int_0^t (x\dot{y} - y\dot{x}) dt' \right\} * \\ &* \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \Phi_R [x(t'), y(t')] \right\}, \end{aligned} \quad (4.65)$$

com

$$f(x, y, x', y') = \frac{m\gamma}{4} [(x^2 - x'^2) - (y^2 - y'^2)]. \quad (4.66)$$

Acabamos por obter uma expressão para o superpropagador que rege a dinâmica do operador densidade reduzido do sistema, dado o potencial V_0 ao qual a partícula está sujeita. Com a expressão acima podemos, pelo menos em princípio, determinar J através da solução de uma integral de caminho dupla, que possui soluções analíticas somente para potenciais lineares e quadráticos na coordenada q da partícula. Em outros casos devemos recorrer a aproximações.

Chegamos portanto ao final do quarto capítulo, com uma visão sobre coerência quântica, dissipação em Mecânica Quântica e de como o problema da recombinação dos feixes tem sido tratado na literatura. Nestes próximos capítulos esperamos introduzir novos aspectos ao problema da recombinação dos feixes.

Capítulo 5

ISG sem flutuações

Nos capítulos anteriores fizemos uma introdução ao problema da recombinação dos feixes em uma experiência de Stern-Gerlach e à dissipação em mecânica quântica tendo como objetivo a análise dos efeitos das flutuações do campo magnético na parte espacial da função de onda. Antes de atacar este problema iremos analisar os efeitos do alargamento da parte espacial da função de onda no ISG e como a coerência de spin é perdida em um experimento de Stern-Gerlach antes mesmo de considerar a dissipação no sistema.

5.1 Alargamento do pacote no ISG

Iremos considerar a mesma Hamiltoniana proposta em [1] retirando o segundo termo que só atua na parte de spin da função de onda, causando assim a precessão do spin, o que não queremos levar em conta neste trabalho. Estamos interessados em analisar somente o efeito da recombinação da parte espacial e deste modo temos

$$H = \frac{p^2}{2m} - f(t) \sigma_z z. \quad (5.1)$$

Esta Hamiltoniana nos leva ao propagador[14]

$$K_{ss'}(z, t; z', 0) = \langle S | S' \rangle \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar t} (z - z')^2 + \frac{im}{\hbar t} \Delta z(t) (z - z') + \Delta p(t) z' + iI(t) \right\} \quad (5.2)$$

com

$$I(t) = \frac{i}{\hbar m t} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' t'' (t - t') f(t') f(t''), \quad (5.3)$$

que pode ser utilizado para fazer a evolução temporal de uma função de onda na descrição de Schrödinger. Na expressão acima as definições para Δp , Δz e $\overline{\Delta z}(t)$ são as mesmas do capítulo

3.

Considerando o seguinte estado inicial

$$|\psi\rangle = (\alpha|+\rangle + \beta|-\rangle) \otimes |\varphi\rangle, \quad (5.4)$$

vemos que a parte espacial ainda não está emaranhada com o spin. Considerando o estado inicial como um pacote de incerteza mínima temos

$$\langle z|\varphi\rangle = \varphi(z, 0) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma}} e^{-\frac{z^2}{4\sigma^2}}, \quad (5.5)$$

que é um pacote gaussiano de largura σ centrado na origem. Fazendo a sua evolução temporal obtemos

$$|\psi(t)\rangle = \alpha\varphi_+(z, t)|+\rangle + \beta\varphi_-(z, t)|-\rangle, \quad (5.6)$$

com

$$\varphi_{\pm}(z, t) = \frac{e^{i\theta(t)}}{\sqrt{\sigma(t)}\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{4\sigma(t)^2}[z \mp \overline{\Delta z}(t)]^2 + i\left[\frac{m}{2\hbar t}z^2 \pm \frac{m}{\hbar t}\Delta z(t)z + \right. \right. \quad (5.7)$$

$$\left. + I(t) - \frac{m}{2\hbar t}\left(\frac{\sigma}{\sigma(t)}\right)^2(z \mp \overline{\Delta z}(t))^2\right\} \quad (5.8)$$

e

$$\overline{\Delta z}(t) = \frac{\Delta p(t)}{m}t - \Delta z(t), \quad (5.9)$$

$$\sigma(t)^2 = \sigma^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma}\right)^2. \quad (5.10)$$

Portanto após a interação com o campo magnético temos um emaranhamento entre os graus de liberdade espaciais e de spin da partícula. Num instante t qualquer a parte espacial da função de onda é uma gaussiana, cujo centro segue a trajetória clássica (como esperado devido o teorema de Ehrenfest), com uma largura dependente do tempo da mesma forma que uma partícula livre. Neste caso os graus de liberdade de spin não evoluem no tempo, já que não consideramos a parte constante do campo magnético que seria responsável pela precessão do spin.

Se quisermos saber como se dá a perda da coerência de spin no ISG devemos olhar para os elementos não diagonais do operador densidade, que, a menos da parte de spin que não nos interessa, são dados por

$$\rho_{+-}(z, z, t) = \varphi_+(z)\varphi_-^*(z) = \frac{1}{\sqrt{\sigma(t)}\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma(t)^2}z^2 - \left(\frac{\overline{\Delta z}(t)}{\sqrt{2}\sigma(t)}\right)^2 + \right.$$

$$\pm i \frac{2m}{\hbar t} z \left[\Delta z(t) + \left(\frac{\sigma}{\sigma(t)} \right)^2 \overline{\Delta z}(t) \right] \Bigg\}, \quad (5.11)$$

no qual $2\overline{\Delta z}(t)$ é a distância entre os centros dos pacotes. Se considerarmos que o alargamento do pacote é desprezível de modo que $\sigma(t) \approx \sigma$ temos

$$\rho_{+-}(z, z, t) = \frac{1}{\sqrt{\sigma}\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(z - \overline{\Delta z}(t))^2}{4\sigma^2} \right] \exp \left[\pm i \frac{2}{\hbar} z \Delta p(t) \right] \exp \left[-\frac{(z + \overline{\Delta z}(t))^2}{4\sigma^2} \right], \quad (5.12)$$

onde Δp é a diferença entre os momentos médios dos dois pacotes. Recuperamos assim, com exceção da integração em z , a expressão (eq. 3.29) obtida em [1] e reproduzida no capítulo 3.

Para estudar a coerência entre os estados de spin, que poderia ser observada em uma medida do valor médio de S_x , devemos fazer o traço em relação às coordenadas espaciais e olhar para os termos fora da diagonal no espaço de spin que têm a seguinte forma:

$$\rho_{+-}(t) = \int dz \varphi_+(z, t) \varphi_-^*(z, t). \quad (5.13)$$

Quando não há mais coerência, $\langle S_x \rangle \approx 0$, devemos ter

$$\rho_{+-}(t) \approx 0. \quad (5.14)$$

Desenvolvendo a (5.14) obtemos

$$\rho_{+-}(t) = \alpha \beta^* \exp \left\{ - \left[\frac{\Delta p(t)}{\hbar \sqrt{2}/\sigma} \frac{\sigma(t)}{\sigma} + \frac{\sqrt{2}}{\hbar/\sigma} \frac{\overline{\Delta z}(t)}{t/m} \left(\frac{\sigma}{\sigma(t)} - \frac{\sigma(t)}{\sigma} \right) \right]^2 - \left(\frac{\overline{\Delta z}(t)}{\sqrt{2}\sigma(t)} \right)^2 \right\}. \quad (5.15)$$

Nesta expressão há a contribuição de dois termos para perda de coerência de spin. O primeiro é a distância entre os pacotes no espaço de momento, que é medida pela largura dos pacotes nesse espaço, dada por $\hbar/2\sigma$. Note que a largura dos pacotes no espaço de momento se mantém constante durante a evolução temporal. O segundo mede a distância entre os pacotes no espaço de coordenadas. Novamente esta medida é feita usando a largura do pacote, neste caso $\sigma(t)$. Como veremos adiante o alargamento dos pacotes aumenta a contribuição do primeiro termo. Na figura abaixo mostramos um gráfico de $\rho_{\pm}(t)$ num experimento de ISG para ilustrar como se dá a perda e recuperação da coerência. As unidades são arbitrárias e fizemos somente uma variação da largura inicial do pacote que cresce no sentido da curva preta para a azul.

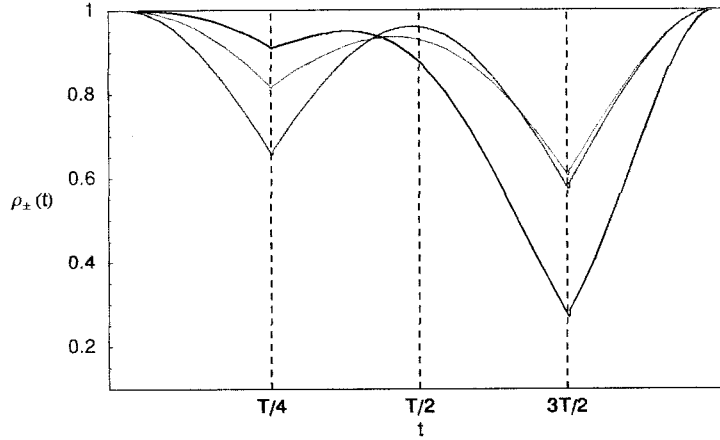


Figura 5.1: Perda e “revival” da coerência num ISG.

Observe que a coerência de spin começa a ser perdida sendo depois recuperada em $T/2$. Neste ponto a diferença entre os momentos, primeiro termo de 5.12, é nula e a perda de coerência é totalmente devida à separação entre os pacotes no espaço de coordenadas, que nesse exemplo não foi apreciável. A inversão entre as curvas de diferentes larguras iniciais se deve ao fato de que em $T/4$ a perda de coerência tem como principal origem a distância entre os pacotes no espaço de momento, sendo assim maior para o pacote de maior σ e consequentemente menor $\hbar/2\sigma$, enquanto que em $T/2$ a perda de coerência é devida a distância entre os pacotes no espaço de coordenadas onde a situação se inverte.

Para o caso discutido na capítulo 3, no qual a “força” pode ser escrita com $f(t) = \bar{f}(t) + \delta f$ e a experiência tem um tempo de duração T temos

$$\rho_{+-}(T) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \frac{\Delta p(T)}{\hbar/2\sigma} \left(\frac{\sigma}{\sigma(T)} + \frac{\sigma(T)}{\sigma} \right) \right]^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\overline{\Delta z}(T)}{\sigma(T)} \right)^2 \right\}. \quad (5.16)$$

Se a recombinação em ambos os espaços for considerável, de modo que tenhamos a seguinte relação:

$$\frac{\overline{\Delta z}(T)}{\sqrt{2}\sigma(T)} \approx \frac{\Delta p(T)}{\hbar/2\sigma} \approx \varepsilon \ll 1. \quad (5.17)$$

Podemos aproximar o operador densidade reduzido por:

$$\rho_{+-}(T) \approx \left[1 - \frac{\varepsilon^2}{8} \left(\frac{\sigma}{\sigma(T)} + \frac{\sigma(T)}{\sigma} \right)^2 - \frac{\varepsilon^2}{2} \right]. \quad (5.18)$$

Supondo $2\varepsilon^2 = 0,2$ obtemos 80% de coerência para o caso em que $\sigma(T) \approx \sigma$ e 74% quando $\sigma(T) = 2\sigma$. Portanto o alargamento do pacote aumenta a contribuição do termo em $\Delta p(t)$ causando, consequentemente, a perda de coerência.

5.2 Perda de Coerência na experiência de Stern-Gerlach

Agora vamos analisar como ocorre a perda de coerência em uma experiência de Stern-Gerlach que se resume à primeira região do ISG na qual devemos ter $f(t) = f$. O elemento não diagonal do operador densidade reduzido no espaço de spin fica

$$\rho_{+-}(t) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \frac{\Delta p(t)}{\hbar/2\sigma} \left(\frac{\sigma}{\sigma(t)} + \frac{\sigma(t)}{\sigma} \right) \right]^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\overline{\Delta z}(t)}{\sigma(t)} \right)^2 \right\}, \quad (5.19)$$

onde

$$\Delta p(t) = ft, \quad \overline{\Delta z}(t) = \frac{ft^2}{2m}. \quad (5.20)$$

Desta forma existem dois termos, análogos aos do ISG, responsáveis pela perda de coerência: o primeiro tem como origem a distância entre os pacotes no espaço de momento e o segundo a distância entre os pacotes no espaço de coordenadas. Estamos interessados em saber em quanto tempo a coerência é perdida e qual a contribuição de cada um destes termos. Com este objetivo em mente reescrevemos a expressão acima como,

$$\rho_{+-}(t) = \exp \left\{ -\frac{f^2}{8m^2\sigma^2} t^4 - \frac{2f^2\sigma^2}{\hbar^2} t^2 \right\}, \quad (5.21)$$

e definimos um tempo de decoerência τ , como o tempo em que o elemento não diagonal decai a $1/e$. Pode-se mostrar que

$$\tau = \sqrt{\frac{2\sqrt{2}m\sigma}{f}} \left[-\frac{2\sqrt{2}f m \sigma^3}{\hbar^2} + \sqrt{1 + \frac{8f^2 m^2 \sigma^6}{\hbar^4}} \right]^{1/2}. \quad (5.22)$$

Esta expressão obtida para o tempo de decoerência, será analisada em dois casos:

$$\frac{8f^2 m^2 \sigma^6}{\hbar^4} \begin{cases} \gg 1 & \text{primeiro caso} \\ \ll 1 & \text{segundo caso} \end{cases} \quad (5.23)$$

No primeiro caso podemos aproximar o tempo de decoerência como

$$\tau_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}f\sigma} \quad (5.24)$$

e no segundo como

$$\tau_2 = \sqrt{\frac{2\sqrt{2}m\sigma}{f}}. \quad (5.25)$$

Obtido o tempo de decoerência, falta saber qual a separação dos pacotes, tanto no espaço de coordenadas como no de momento, ao longo deste tempo. A distância entre os pacotes no

espaço de coordenadas (segundo fator da 5.19) é dada pelo valor da razão $\overline{\Delta z}(\tau)/\sigma(\tau)$. Esta assume os seguintes valores:

$$\frac{\overline{\Delta z}(\tau_1)}{\sigma(\tau_1)} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar^2}{2\sqrt{2}f m \sigma^3} \ll 1 \quad (5.26)$$

e

$$\frac{\overline{\Delta z}(\tau_2)}{\sigma(\tau_2)} \approx \sqrt{\frac{2\sqrt{2}f m \sigma^3}{\hbar^2}} \ll 1. \quad (5.27)$$

Portanto em ambos os casos os feixes (pacotes) ainda não se separaram quando a coerência é perdida, sendo a separação entre os pacotes no espaço de momento o responsável pela decoerência.

Os dois casos considerados em 5.23, podem ser vistos de outra forma: o tempo t no qual os dois termos no expoente de 5.21 se igualam é $t_0 = \frac{4m\sigma^2}{\hbar}$. O valor assumido por eles fica

$$\frac{f^2}{8m^2\sigma^2} t_0^4 = \frac{2f^2\sigma^2}{\hbar^2} t_0^2 = 4 \frac{8f^2 m^2 \sigma^6}{\hbar^4}. \quad (5.28)$$

Então, no primeiro caso, a coerência é perdida num tempo muito menor que t_0 sendo o termo quadrático responsável por esta perda. No segundo caso a coerência é perdida num tempo muito maior que t_0 e o responsável por esta perda é o termo em t^4 . Note que para tempos $t \ll 2m\sigma^2/\hbar$ podemos desprezar o alargamento do pacote e para tempos $t \gg 2m\sigma^2/\hbar$ esse alargamento é considerável, o que nos leva a concluir que, em ambos os casos, o tempo de decoerência é muito menor que o tempo para separar os feixes.

Na experiência de Stern-Gerlach alguns valores típicos são[16]: $m=1,8 \times 10^{-25} \text{ Kg}$ (massa de uma átomo de prata), $\partial B/\partial z = 10^3 \text{ T/m}$ e $\sigma = 10^{-5} m$. Com estes valores e lembrando que

$$f = \mu \frac{\partial B}{\partial z} = \gamma_g S_z \frac{\delta B}{\delta z}. \quad (5.29)$$

Temos

$$\frac{8B_0^2 m^2 \sigma^6}{\hbar^4} \approx 10^{16}, \quad (5.30)$$

onde usamos $\gamma_g = 10^{11}$ (fator giromagnético), o que nos leva ao primeiro caso considerado.

Podemos observar a perda de coerência e a separação dos pacotes no espaço de coordenadas nas figuras abaixo, nas quais utilizamos os valores mencionados acima.

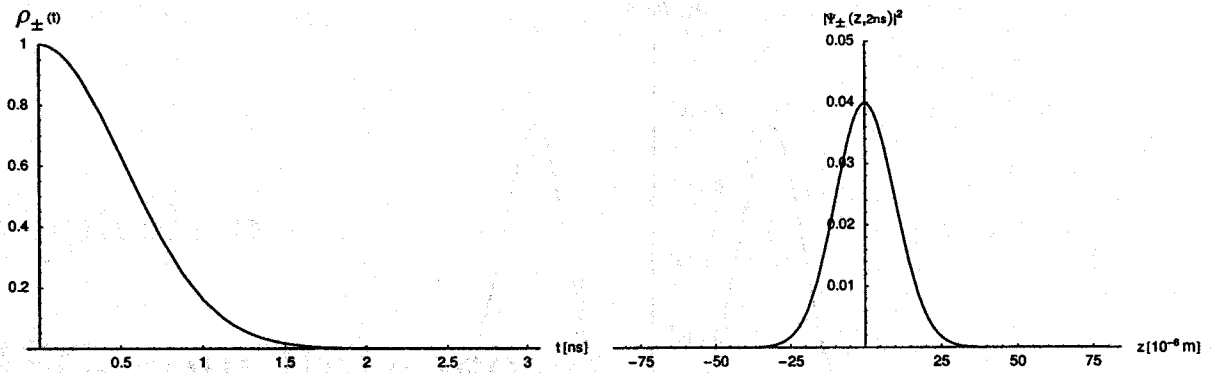


Figura 5.2: Elementos não diagonais da matriz densidade reduzida no espaço de spin e densidade de probabilidade associada com spin para cima e para baixo em $t = 2ns$ quando a coerência já foi perdida.

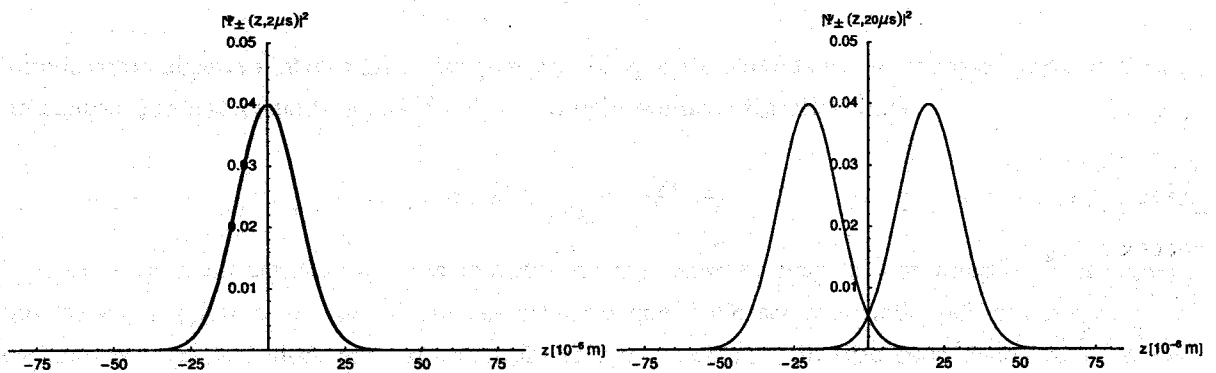


Figura 5.3: Densidade de probabilidade associada ao spin up e down em $t = 2\mu s$ e $t = 20\mu s$

Nestas figuras, como argumentado anteriormente, a coerência é perdida muito antes dos pacotes se separarem no espaço de coordenadas. Deste modo esta perda de coerência é devida à separação dos pacotes no espaço de momento, como pode ser observado abaixo no gráfico da densidade de probabilidade no espaço de momento. Note que em $t = 2ns$ os pacotes já estão bem afastados apesar do momento adquirido ser muito pequeno, pois o que é relevante é a razão $\frac{\Delta p}{\hbar/2\sigma}$.

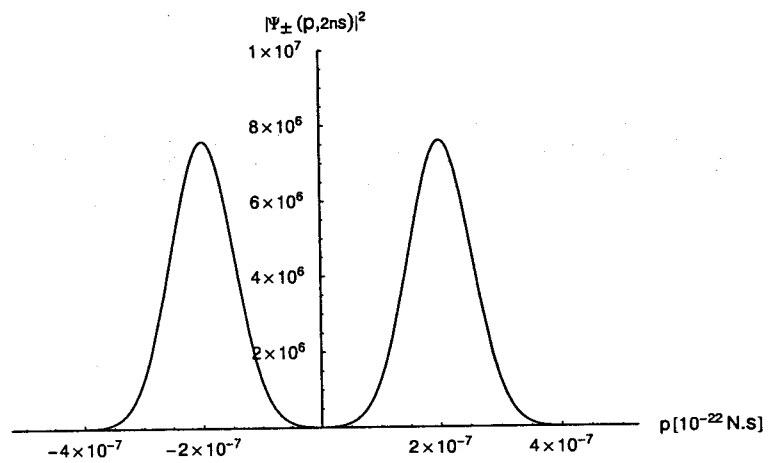


Figura 5.4: Densidade de probabilidade no espaço de momento, mostrando que os pacotes já estão bem separados sendo assim responsáveis pela perda de coerência.

Capítulo 6

ISG com flutuações

Nos dois últimos capítulos analisamos a perda de coerência de spin em uma experiência de Stern-Gerlach e a influência do alargamento do pacote na tentativa de obter o estado inicial, puro, no ISG. Em ambos os casos o campo magnético foi tratado classicamente. Neste capítulo pretendemos introduzir fontes de flutuações quânticas na análise do ISG.

6.1 Hamiltoniana com flutuações

Temos como objetivo introduzir flutuações no ISG que até o momento, a menos da parte uniforme do campo que não consideramos, foi descrito pela seguinte Hamiltoniana:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sigma_z f(t)z. \quad (6.1)$$

Como visto no capítulo 4, uma maneira de adicionar flutuações e dissipação em mecânica quântica é acoplar o sistema a um reservatório que pode ser modelado por um conjunto de osciladores cuja Hamiltoniana de interação com a partícula é do tipo coordenada-coordenada. Esse modelo é uma boa aproximação quando cada grau de liberdade do reservatório não é fortemente perturbado pelo sistema. Sob estas condições contruiremos uma Hamiltoniana que adicione flutuações ao nosso modelo e seja exatamente solúvel. No momento não daremos uma justificativa para a Hamiltoniana proposta, ficando esta para o final deste trabalho.

Com as idéias acima em mente propomos a seguinte Hamiltoniana:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \sigma_z f_0(t)z + \epsilon \sigma_z z \sum_k C_k x_k + \sum_k \left[\frac{P_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2}{2} x_k^2 + \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k^2} \epsilon^2 z^2 \right]. \quad (6.2)$$

Apesar de deixarmos a justificativa a posteriori podemos pensar que estamos escrevendo a parte flutuante do gradiente do campo magnético como a soma de osciladores, $\delta f(t) = \epsilon \sum C_k x_k$, estando a informação sobre o momento magnético da partícula contida em ϵ .

Nessa Hamiltoniana temos o sistema acoplado a um reservatório de osciladores através da posição, com a ressalva que o acoplamento depende do spin da partícula. Enfatizamos que qualquer outro tipo de acoplamento não nos permitiria um cálculo exato. Também estamos supondo as mesmas aproximações de [1, 2].

Um modelo similar foi estudado em [15], onde a Hamiltoniana acima foi proposta, com a diferença de um acoplamento posição-posição não dependente do spin da partícula, na análise da decoerência no experimento de Stern-Gerlach. Este acoplamento posição-posição não dependente do spin da partícula modelaria uma Stern-Gerlach em um gás diluído. O caso do ISG não foi abordado nesse estudo.

6.2 Cálculo do operador densidade do sistema

De posse dessa Hamiltoniana podemos calcular o operador densidade reduzido do sistema a fim de analisar como ele é influenciado pelas flutuações do campo. Este longo cálculo será feito usando o formalismo apresentado no capítulo 5, contudo nos restringiremos a apresentar somente o resultado final e algumas idéias envolvidas, ficando os detalhes para o apêndice.

O operador densidade é escrito como

$$\rho_{ss'}(x, y, t) = \int \int dx' dy' J_{ss'}(x, y, t; x', y', 0) \langle x' S | \rho_1(0) | y' S' \rangle, \quad (6.3)$$

com

$$J_{ss'}(x, y, t; x', y', 0) = \int \int \int d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' K_s(x, \vec{R}, t; x' \vec{R}', 0) \langle \vec{R}' | \rho_2(0) | \vec{Q}' \rangle K_s^*(y, \vec{R}, S', t; y' \vec{Q}', 0). \quad (6.4)$$

No cálculo do funcional de influência haverá um acoplamento entre as trajetórias $x(t)$ e $y(t)$, que serão desacopladas através da seguinte transformação de coordenadas:

$$q = \frac{x+y}{2} \quad e \quad \xi = x - y. \quad (6.5)$$

Feita esta transformação definiremos uma ação, que nos fornecerá uma trajetória "clássica" conveniente sobre a qual expandiremos um caminho qualquer, ou seja,

$$q = \tilde{q} + q_{class} \quad e \quad \xi = \tilde{\xi} + \xi_{class}. \quad (6.6)$$

Com isso dividiremos nossa ação em duas partes: uma clássica, que contém os extremos e que sai da integração funcional e uma segunda, que deve ser integrada resultando em uma função somente do tempo pois os caminhos $\tilde{q}$ e $\tilde{\xi}$ têm como extremos o valor nulo.

Seguindo este procedimento, usando uma função espectral Ohmica e assumindo um pacote

inicial gaussiano com largura σ e centrado em zero obtemos

$$\begin{aligned} \rho_d(q, \xi, t) = G(t) \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp \left\{ -\frac{M^2}{4a\hbar^2} \left(q \mp \frac{Z}{M} \right)^2 - \xi^2 \left[\frac{\epsilon^2 A}{2\hbar} + \frac{N^2 \sigma^2}{2\hbar^2} - \frac{1}{4a\hbar^4} (\sigma^2 N L_+ - \epsilon^2 \hbar B)^2 \right] + \right. \\ \left. + \frac{i}{\hbar} \left[L_- - \frac{M}{2a\hbar^2} (\sigma^2 N L_+ - \epsilon^2 \hbar B) \right] q \xi \pm \frac{i}{\hbar} \left[X + \frac{Z}{2a\hbar^2} (\sigma^2 N L_+ - \epsilon^2 \hbar B) \right] \xi \right\} \end{aligned} \quad (6.7)$$

para os elemento diagonais no espaço de spin e

$$\begin{aligned} \rho_{od}(q, \xi, t) = G(t) \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp \left\{ \left[-\frac{2\sigma^2 N^2}{\hbar^2} \left(1 - \frac{\sigma^2 L_+^2}{2a\hbar^2} \right) + \frac{2\epsilon^2}{\hbar} \left(\frac{\epsilon^2 B^2}{2a\hbar} - A \right) \right] q^2 + \right. \\ + \frac{i}{\hbar} \left[(\xi M \mp 2Z) \left[\frac{\epsilon^2 B}{2a\hbar} - \frac{\sigma^2 N L_+}{2a\hbar^2} \right] + (\xi L_- \pm 2X) \right] q + \\ \left. - \frac{(\xi M \mp 2Z)^2}{16a\hbar^2} - \frac{2\sigma^2 \epsilon^2 L_+ N B}{a\hbar^3} q^2 \right\} \end{aligned} \quad (6.8)$$

para os elementos não diagonais no espaço de spin. Utilizamos nas expressões acima as seguintes definições:

$$a(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{L_+^2(t) \sigma^2}{2} + \frac{\hbar C(t) \epsilon^2}{2} + \frac{\hbar^2}{8\sigma^2} \right), \quad (6.9)$$

$$L_{\pm}(t) = m\gamma [\coth(\gamma t) \pm 1], \quad (6.10)$$

$$N(t) = m\gamma \frac{e^{-\gamma t}}{\sinh \gamma t}, \quad (6.11)$$

$$M(t) = m\gamma \frac{e^{\gamma t}}{\sinh \gamma t}, \quad (6.12)$$

$$X(t) = \frac{e^{-\gamma t}}{\sinh(\gamma t)} \int_0^t dt' f(t') e^{\gamma t'} \sinh \gamma t', \quad (6.13)$$

$$Z(t) = \frac{1}{\sinh(\gamma t)} \int_0^t dt' f(t') e^{\gamma t'} \sinh \gamma (t - t'), \quad (6.14)$$

$$\alpha_R(t' - t'') = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty J(\omega) \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2KT} \right) \cos \omega (t' - t'') d\omega, \quad (6.15)$$

$$G(t) = \frac{m\gamma e^{\gamma t}}{2\pi\hbar \sinh \gamma t} = \frac{M(t)}{2\pi\hbar}, \quad (6.16)$$

$$A(\theta) = \frac{e^{-2\theta}}{2 \sinh^2 \theta} \left[8I((0) - I(\theta)) - 4(1 - e^{2\theta}) \dot{I}(\theta) + (1 - e^{2\theta})^2 \ddot{I}(0) \right], \quad (6.17)$$

$$B(\theta) = \frac{1}{\sinh^2 \theta} \left[4(I(\theta) - I(0)) - 2 \sinh 2\theta \dot{I}(\theta) - (1 - \cosh 2\theta) \ddot{I}(\theta) \right], \quad (6.18)$$

$$C(\theta) = \frac{1}{\sinh^2 \theta} \left[4e^{2\theta} (I(0) - I(\theta)) - 2(1 - e^{2\theta}) \dot{I}(\theta) + (1 - \cosh 2\theta) \ddot{I}(0) \right], \quad (6.19)$$

$$I(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{J(\lambda) \cos \lambda \theta}{\lambda^2 (\lambda^2 + 4)} \coth \kappa \lambda d\lambda, \quad \dot{I}(\theta) = \frac{dI(\theta)}{d\theta}. \quad (6.20)$$

Nas quatro últimas definições, que contêm a dependência com a temperatura, usamos $\theta = \gamma t$, $\lambda = \omega/\gamma$ e $\kappa = \hbar\gamma/2KT$. Note que devido à dissipação os elementos não diagonais no espaço de spin não obedecem a mesma dinâmica dos elementos diagonais.

A densidade de probabilidade de se obter a partícula em um ponto q é dada por

$$\rho_d(q, 0, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\tilde{\sigma}(t)} \exp - \frac{1}{2\tilde{\sigma}(t)^2} \left[q \mp \frac{Z}{M} \right]^2, \quad (6.21)$$

com

$$\tilde{\sigma}(t) = \frac{\hbar\sqrt{2a(t)}}{M(t)}, \quad (6.22)$$

ou seja, uma gaussiana de largura $\tilde{\sigma}(t)$ cujo centro é descrito por

$$z(t) = \frac{Z(t)}{M(t)} = \frac{1}{2m\gamma} \int_0^t dt' f_0(t') (1 - e^{-2\gamma(t-t')}), \quad (6.23)$$

que é a trajetória clássica de uma partícula sujeita à força $f_0(t)$ e à força viscosa ηv .

No limite $\gamma t \ll 1$, temos

$$\lim_{\gamma t \rightarrow 0} z(t) = \frac{1}{m} \int_0^t dt' f(t') (t - t') \quad (6.24)$$

recuperando a equação para uma partícula sujeita somente à força $f(t)$. Note que este limite é válido para tempos muito menores que o tempo de relaxação, $t \ll \gamma^{-1}$ ou para o limite de baixa dissipação, $\gamma \rightarrow 0$. Nesse limite também recuperamos as expressões obtidas no capítulo 5 para a largura do pacote, $\tilde{\sigma}(t)$, e para a distância do centro do pacote, $\Delta\tilde{z}(t) = Z(t)/M(t)$,

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \tilde{\sigma}(t) = \sigma^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma} \right)^2$$

e

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{\Delta \tilde{z}}{2\sqrt{2}\tilde{\sigma}(t)} = \frac{\Delta z}{2\sqrt{2}\sigma(t)}. \quad (6.25)$$

Como queremos analisar a coerência de spin, dada pelos termos não diagonais de $\hat{\rho}$ no espaço de spin, iremos fazer o traço parcial em relação às coordenadas espaciais, obtendo

$$\rho_{od}(t) = h(t) \exp \left\{ -\frac{1}{a'\hbar^2} \left[Z \left(\frac{\epsilon^2 B}{2a\hbar} - \frac{\sigma^2 N L_+}{2a\hbar^2} \right) - X \right]^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta \tilde{z}}{\tilde{\sigma}(t)} \right)^2 \right\}$$

onde

$$h(t) = \frac{M(t)}{2\hbar\sqrt{a(t)a'(t)}}$$

e

$$a'(t) = \frac{2\sigma^2 N^2}{\hbar^2} \left(1 - \frac{\sigma^2 L_+^2}{2a\hbar^2} \right) - \frac{2\epsilon^2}{\hbar} \left(\frac{\epsilon^2 B^2}{2a\hbar} - A \right) + \frac{2\sigma^2 \epsilon^2 L_+ N B}{a\hbar^3}. \quad (6.26)$$

Para o caso de altas temperaturas, $KT \gg \hbar\gamma \rightarrow \kappa \ll 1$, e dissipação Ohmica, $J(\lambda) = 2m\gamma\lambda$, podemos fazer a seguinte aproximação:

$$I(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\lambda \frac{J(\lambda) \cos \lambda\theta}{\lambda^2 (\lambda^2 + 4)} \coth \kappa\lambda \approx \frac{m\gamma}{2\pi} \int_0^\infty d\lambda \frac{\cos \lambda\theta}{\lambda (\lambda^2 + 4)} \frac{1}{\kappa\lambda} \quad (6.27)$$

que é válida quando $\kappa\lambda \ll 1$. Note que a integração em λ é feita até o infinito onde aproximação $\coth \kappa\lambda \approx 1/\kappa\lambda$ não seria mais válida, mas devido fator $1/\lambda (\lambda^2 + 4)$ estes termos não irão contribuir para a integração.

Deste modo temos

$$A(\theta) = \frac{m\gamma}{\kappa} \frac{e^{-2\theta}}{\sinh^2 \theta} \left[4\theta + 3 + e^{4\theta} - 4e^{2\theta} \right], \quad (6.28)$$

$$B(\theta) = \frac{m\gamma}{4\kappa} \frac{1}{\sinh^2 \theta} \left[e^{2\theta} - e^{-2\theta} - 4\theta \right] \quad (6.29)$$

e

$$C(\theta) = \frac{m\gamma}{4\kappa} \frac{1}{\sinh^2 \theta} \left[4\theta e^{2\theta} - 3e^{2\theta} + 4 - e^{-2\theta} \right]. \quad (6.30)$$

Tomando o limite $\lambda \rightarrow 0$ recuperamos o caso sem dissipação, no qual

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} h(t) = 1. \quad (6.31)$$

Portanto podemos dizer que a decoerência é dada pelo fator $h(t)$ na frente da exponencial e podemos reescrever

$$\rho_{od}(t) = h(t) \tilde{\rho}_{od}(t),$$

onde $\tilde{\rho}_{od}(t)$ se reduz ao caso sem dissipação no limite $\gamma \rightarrow 0$. Observe que $h(t)$ não depende da dinâmica do centro do pacote. Assim mesmo, escolhendo um campo médio de tal modo que os feixes fossem recombinados com perfeição no final do ISG o fator $h(t)$ poderia levar a uma perda da coerência.

Lembremos que estamos usando a aproximação de que a velocidade da partícula na direção y é constante, o que, além das aproximações citadas no capítulo 3, supõe não haver dissipação nessa direção.

No caso não dissipativo as partículas gastavam tempos iguais em cada uma das quatro partes do ISG para que no final fossem recombinadas. Porém, com a introdução da dissipação o tempo gasto para desacelerar a partícula é menor que para acelerá-la devido à força viscosa. Desse modo se gastamos um tempo t_0 na primeira região, com gradiente positivo, acelerando a partícula o tempo gasto para desacelerá-la será

$$t_1 = \frac{1}{2\gamma} \ln [2 - e^{-2\gamma t_0}].$$

Na figura abaixo mostramos um esquema, clássico, das forças atuantes na partícula de spin para cima.

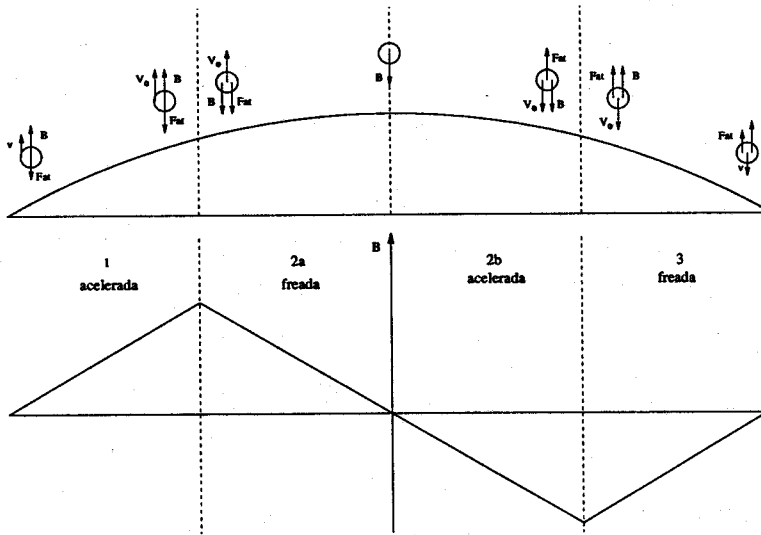


Figura 6.1: Esquema da trajetória e forças atuantes em uma partícula passando pelo ISG. A partícula deve gastar um menor tempo nas regiões 2a e 3.

De qualquer forma $\tilde{\rho}_{od}(t)$ seria o responsável por um “revival” da coerência quando os feixes fossem recombinados, porém o fator $h(t)$ pode impedir que este revival aconteça. Nos gráficos abaixo mostramos, qualitativamente, utilizando unidades arbitrárias, o comportamento do pré-fator de $\tilde{\rho}_{od}(t)$ e do operador densidade reduzido no espaço de spin num ISG para o caso em que o gradiente do campo varia abruptamente entre as regiões do ISG. Nesses gráficos a partícula atinge o tempo de relaxação do reservatório na primeira região do ISG.

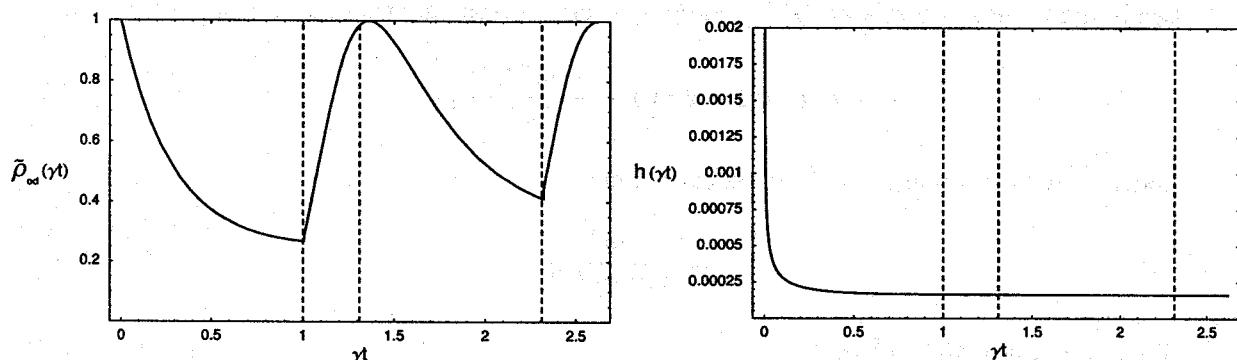


Figura 6.2: Comportamento do termo não diagonal no espaço de spin sem o fator $h(t)$, mostrando uma possível recuperação da coerência, e comportamento do fator $h(t)$.

Nestes dois gráficos observamos que a recombinação pode levar a uma recuperação da coerência, porém o fator $h(t)$ decai continuamente, podendo fazer com que esta recuperação seja desprezível, como podemos ver no gráfico abaixo. Neste gráfico apesar de haver uma pequena recuperação da coerência, no final do experimento temos uma coerência da ordem de $10^{-6} \%$.

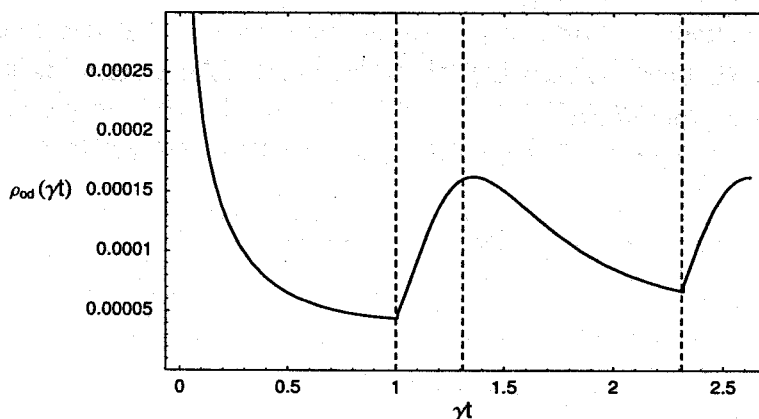


Figura 6.3: Elemento não diagonal no espaço de spin.

Apesar da característica qualitativa dos gráficos acima podemos dizer que para termos uma recuperação significativa da coerência o tempo da recombinação deve ser muito menor que o tempo de decoerência. Para o caso de recombinação perfeita dos feixes teremos $\bar{\rho}_{od}(t) = 1$ e assim a recuperação da coerência ficará restrita ao valor de $h(t)$.

Vamos agora obter o tempo de decoerência do fator $h(t)$. A análise desse fator é bem complicada porém podemos expandi-lo em torno do zero até primeira ordem no tempo obtendo

$$h(t) \approx 1 + 2\gamma \left(1 - \frac{4m\sigma^2 KT}{3\hbar^2} (1 + 2\epsilon^2) \right) t. \quad (6.32)$$

Lembrando que $\epsilon = \gamma_g \hbar / 2 \approx 10^{-23}$, sendo γ_g o fator giromagnético da partícula, temos

$$h(t) \approx 1 + 2\gamma \left(1 - \frac{4m\sigma^2 KT}{3\hbar^2} \right) t. \quad (6.33)$$

Podemos definir o tempo de decoerência τ como

$$\tau = \frac{3\hbar^2}{8m\gamma\sigma^2 KT}, \quad (6.34)$$

já que, em geral, $\frac{4m\sigma^2 KT}{3\hbar^2} \gg 1$.

Para o caso em que o campo magnético é gerado por SQUIDS, modelo que será justificado no próximo capítulo, temos $\gamma = 10^{-1} s^{-1}$. Para os valores utilizados no capítulo 5 e uma temperatura da ordem de $1K$ temos $\tau = 10^{-16} \gamma^{-1} = 10^{-15} s$. Este tempo de relaxação foi obtido para um SQUID com dimensões da ordem de microns, assim o tempo em que a partícula interage com o campo, supondo que suas velocidades sejam aproximadamente $1000 m/s$, é da ordem de $10^{-10} s$. Portanto o tempo de decoerência é algumas ordens de grandeza menor que o tempo da experiência.

Então para o caso em que as flutuações do campo magnético têm como origem as flutuações do fluxo magnético em um SQUID a dissipação impõe um limite à recuperação da coerência em um ISG. Note que este resultado é devido ao fato de estarmos usando SQUIDS de dimensões microscópicas. Aumentando a dimensão deste SQUID podemos controlar o tempo de decoerência e assim observá-la durante o experimento.

Capítulo 7

Modelo

No capítulo 6 propusemos uma Hamiltoniana como modelo sem justificá-la. Neste capítulo pretendemos justificar esta Hamiltoniana propondo um aparato experimental que irá elucidar as possíveis fontes de flutuação do campo magnético.

7.1 Aparato experimental

Uma possibilidade de aparato para o ISG seria imaginar que o campo magnético em cada região do ISG é gerado por um SQUID. Para diminuir os efeitos de borda imaginamos dois SQUIDS retangulares de diferentes tamanhos dispostos um acima do outro como mostra a figura abaixo.

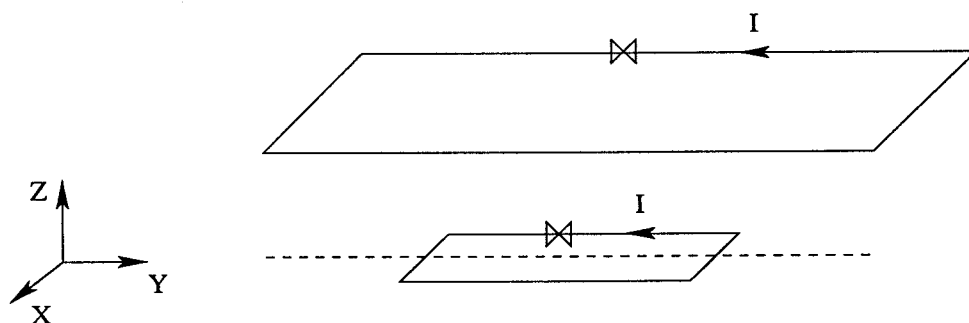


Figura 7.1: Disposição dos SQUIDS geradores do campo magnético em uma das regiões do ISG.

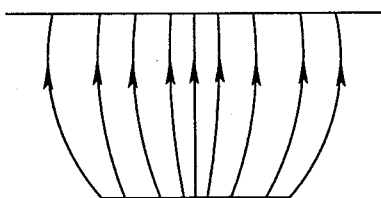


Figura 7.2: Visão lateral dos dois SQUIDS, mostrando as linhas de campo no plano yz .

As partículas incidiriam logo acima do SQUID de menor área, pelo centro do retângulo (linha pontilhada), de forma a podermos considerar somente a componente $\hat{z}$ do campo magnético e ainda expandí-la até primeira ordem. Deste modo escrevemos

$$B_z(z) = B_0 + \frac{\partial B}{\partial z} z, \quad (7.1)$$

onde ainda temos que incluir uma dependência em $\hat{y}$ para que possamos separar e juntar os feixes. Esta dependência em $\hat{y}$ é trocada por uma dependência no tempo quando consideramos que a velocidade nesta direção é constante. Assim temos as mesmas aproximações usadas em [1, 2].

Deste modo o campo é gerado a partir do fluxo magnético no SQUID que como mostraremos adiante, tem uma dinâmica dissipativa. Agora, temos que escrever o campo magnético em função do fluxo no SQUID. Para o fluxo gerado pelo SQUID podemos escrever

$$\Phi = B(z) A(z) \rightarrow B(z) \frac{\partial A}{\partial z} + A(z) \frac{\partial B}{\partial z} = 0 \rightarrow \frac{\partial B}{\partial z} = a(z) \Phi \quad (7.2)$$

e daí obter a Hamiltoniana de uma partícula de spin 1/2 no campo magnético como

$$H_{part} = \frac{p^2}{2m} + \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{p^2}{2m} + \mu_z B_0 + \mu_z a \Phi z. \quad (7.3)$$

Nesta Hamiltoniana temos a posição da partícula acoplada ao fluxo magnético dentro do SQUID, que acoplaremos a um reservatório de osciladores que, por sua vez, irão gerar as flutuações e a dinâmica dissipativa do fluxo magnético.

Vale lembrar que a dependência do campo magnético em y ou no tempo deve levar a uma recombinação dos feixes. Para isso nosso ISG deve ter três regiões cada uma com o gradiente do campo em uma direção.

7.2 Dinâmica do fluxo em um SQUID

Pode-se mostrar [11] que o fluxo Φ em um SQUID, de capacitância C , indutância L e resistência R , obedece a equação

$$C\ddot{\Phi} + \frac{1}{R}\dot{\Phi} + U'(\Phi) = 0, \quad (7.4)$$

com o potencial $U(\Phi)$ dado por

$$U(\Phi) = \frac{(\Phi - \Phi_x)^2}{2L} - \frac{\Phi_0 i_0}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}\right), \quad (7.5)$$

no qual i_0 é a corrente crítica, Φ_x é o fluxo externo e Φ_0 é o quantum de fluxo do campo eletromagnético

Desse modo o fluxo dentro do SQUID obedece uma equação de Langevin e portanto tem uma

dinâmica dissipativa que pode ser mapeada no problema de uma partícula Browniana de massa C e coordenada Φ sujeita ao potencial $U(\Phi)$.

Este potencial pode assumir várias formas dependendo do valor do fluxo externo Φ_x . Em nosso caso queremos que o campo tenha flutuações em torno de um mínimo global não ocorrendo tunelamento entre mínimos locais, e isto ocorre para fluxos externos $\Phi_x = n\Phi_0$, onde o potencial tem um mínimo global em $\Phi = \Phi_x = n\Phi_0$. Expandindo até segunda ordem em torno deste mínimo temos

$$U(\Phi) \approx \frac{(\Phi - n\Phi_0)^2}{2L_0} - \frac{\Phi_0 i_0}{2\pi}, \quad (7.6)$$

$$\text{com } L_0 = \left[\frac{1}{L} + \frac{2\pi i_0}{\Phi_0} \right]^{-1}.$$

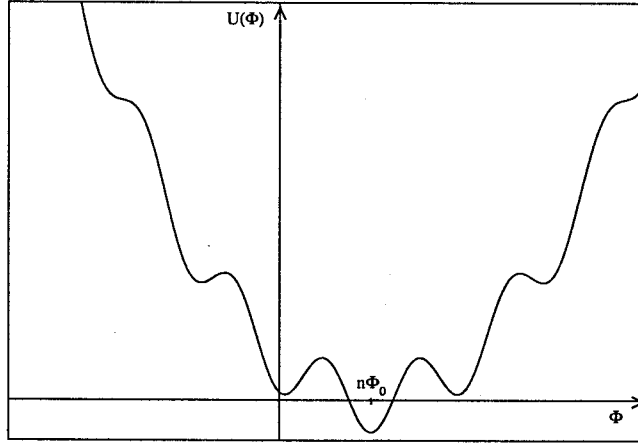


Figura 7.3: Potencial do SQUID

A Hamiltoniana do SQUID fica

$$H_{squid} = \frac{P_\phi^2}{2C} + \frac{(\Phi - n\Phi_0)^2}{2L_0} - \frac{\Phi_0 i_0}{2\pi}. \quad (7.7)$$

Escrevendo $\Phi' = \Phi - n\Phi_0$ temos

$$H_{squid} = \frac{P_\phi^2}{2C} + \frac{\Phi'^2}{2L_0} - \frac{\Phi_0 i_0}{2\pi}. \quad (7.8)$$

com Φ' se referindo à flutuação em torno do mínimo do potencial. Para ter uma dinâmica dissipativa vamos acoplar Φ' às coordenadas de um banho de osciladores, obtendo

$$H_{squid+osc} = \frac{P_\phi^2}{2C} + \frac{\Phi'^2}{2L_0} + \sum_k \left[\frac{P_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2}{2} \left(x_k + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} \Phi' \right)^2 \right], \quad (7.9)$$

na qual excluimos o termo constante $\frac{\Phi_0 i_0}{2\pi}$. Com esta Hamiltoniana temos um SQUID que gera um campo magnético com flutuações.

A Hamiltoniana da partícula no campo magnético era

$$H_{part} = \frac{p^2}{2m} + \mu_z B_0 + \mu_z a (\Phi' + n\Phi_0) z. \quad (7.10)$$

Incluindo o SQUID e o banho de osciladores, 7.9, obtemos a Hamiltoniana total que se escreve

$$H = \frac{P^2}{2m} + \sigma_z f_0 z + \epsilon \sigma_z \Phi' z + \frac{P_\phi^2}{2C} + \frac{\Phi'^2}{2L_0} + \sum_k \left[\frac{P_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2}{2} \left(x_k + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} \Phi' \right)^2 \right], \quad (7.11)$$

com

$$f_0 = \frac{\gamma_g \hbar}{2} a n \Phi_0 \quad e \quad \epsilon = \frac{\gamma_g \hbar}{2} a. \quad (7.12)$$

Portanto temos a partícula sujeita a um campo médio, que faria a recombinação perfeita, e também às flutuações que podem interferir na recombinação dos feixes.

Nesta Hamiltoniana há um acoplamento indireto entre a posição da partícula e os osciladores, sendo o fluxo a variável intermediária. Podemos obter uma Hamiltoniana “efetiva” na qual a partícula estaria diretamente acoplada a novos osciladores,

$$\tilde{H} = \frac{P^2}{2m} + \sigma_z f_0 z + \sum_k \left[\frac{\tilde{P}_k^2}{2\tilde{m}_k} + \frac{\tilde{m}_k \tilde{\omega}_k^2}{2} \left(\tilde{x}_k + \frac{\tilde{C}_k}{\tilde{m}_k \tilde{\omega}_k^2} \lambda \sigma_z z \right)^2 \right], \quad (7.13)$$

com uma nova função espectral efetiva J_{eff} (ver abaixo). Assim justificamos a Hamiltoniana proposta no capítulo 6, faltando colocar a dependência no tempo em f_0 e obter a função espectral efetiva.

7.3 Cálculo da função espectral efetiva

Um dos modos de se calcular a função espectral efetiva seria achar a transformação que leva a $\tilde{H}$ e portanto calcular as novas variáveis. Porém não vamos usar este método trabalhoso e sim seguir a prescrição utilizada em [12].

Para uma Hamiltoniana do tipo

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) + \frac{P_y^2}{2\mu} + \frac{\mu \Omega^2}{2} y^2 + \lambda y q + \sum_k \left[\frac{P_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2}{2} \left(x_k + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} y \right)^2 \right]. \quad (7.14)$$

Devemos escrever as equações clássicas de movimento e depois definir a transformada de Laplace,

$$q(\omega) = \int_0^\infty q(t) e^{-i\omega t} dt \quad \text{Im}(\omega) < 0, \quad (7.15)$$

de todas as variáveis envolvidas.

Em seguida escrevemos a equação resultante para $q(\omega)$ como

$$K(\omega) q(\omega) = -V'_q(\omega), \quad (7.16)$$

onde $U'_q(\omega)$ é a transformada de Laplace de $V'(q)$. Desta expressão obtém-se J_{eff} como

$$J_{eff} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \text{Im}[K(\omega - i\epsilon)] \quad \omega \text{ real}. \quad (7.17)$$

Note que estamos eliminando a variável y em nossas equações clássicas. Seguindo estes passos primeiramente obtemos as equações de movimento no espaço de frequência

$$-m\omega^2 q(\omega) = -V'_q(\omega) - \lambda y(\omega), \quad (7.18)$$

$$-\mu\omega^2 y(\omega) = -\mu\Omega^2 y(\omega) - \lambda q(\omega) - \sum_k \left[C_k x_k(\omega) + \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} y(\omega) \right], \quad (7.19)$$

$$-m_k \omega^2 x_k(\omega) = -m_k \omega_k^2 x_k(\omega) - C_k y(\omega). \quad (7.20)$$

Da última equação,

$$x_k(\omega) = \frac{C_k}{m_k} \frac{y(\omega)}{[\omega^2 - \omega_k^2]}. \quad (7.21)$$

Que levada na segunda nos dá

$$y(\omega) = \frac{-\lambda}{[\mu\Omega^2 + L(\omega)]} q(\omega) \quad L(\omega) = -\omega^2 \left(\mu + \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{[\omega_k^2 - \omega^2]} \right) \quad (7.22)$$

que, finalmente substituída em (7.18) resulta, com o auxílio de (7.16), em

$$K(\omega) = - \left[m\omega^2 + \frac{\lambda^2}{\mu\Omega^2 + L(\omega)} \right]. \quad (7.23)$$

Usando, então,

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k) \quad (7.24)$$

obtemos

$$L(\omega) = -\omega^2 \left(\mu + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\omega')}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)} d\omega' \right). \quad (7.25)$$

Assim temos uma expressão para $K(\omega)$ em termos da função espectral original, que neste caso é dada por

$$J(\omega) = \eta_0 \omega e^{-\omega/\omega_c}. \quad (7.26)$$

Com isto podemos calcular $L(\omega)$ usando o teorema dos resíduos e lembrando que $\text{Im}[\omega] < 0$.

Obtemos assim

$$L(\omega) = -\mu\omega^2 + i\omega\eta_0 e^{-\omega/\omega_c}. \quad (7.27)$$

Calculando o limite da equação (7.17)

$$J_{eff}(\omega) = \frac{\lambda^2 \eta_0 \omega e^{-\omega/\omega_c}}{\mu^2 [\Omega^2 - \omega^2]^2 + \eta_0^2 \omega^2 e^{-2\omega/\omega_c}}. \quad (7.28)$$

Para obter J_{eff} no nosso caso faremos as seguintes correspondências:

$$\lambda \rightarrow \epsilon\sigma_z \quad \mu \rightarrow C \quad \Omega^2 \rightarrow \frac{1}{CL_0} \quad \eta_0 \rightarrow \frac{1}{R} \quad (7.29)$$

com as quais obtemos

$$J_{eff}(\omega) = \frac{(\epsilon\sigma_z)^2 \frac{1}{R} \omega e^{-\omega/\omega_c}}{C^2 [1/CL_0 - \omega^2]^2 + \frac{1}{R^2} \omega^2 e^{-2\omega/\omega_c}}. \quad (7.30)$$

A função espectral pode ser reescrita como

$$J_{eff}(\omega) = \frac{\epsilon^2 \frac{1}{R} L_0^2 \omega}{1 + C^2 L_0^2 \omega^4 + \omega^2 (L_0^2/R^2 - 2CL_0)} = \frac{\eta\omega}{1 + \left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^2 + \left(\frac{\omega}{\Omega'}\right)^4}, \quad (7.31)$$

na qual $\eta = \epsilon^2 L_0^2/R^2$, $\Omega = 1/\sqrt{L_0^2/R^2 - 2CL_0}$, $\Omega' = 1/\sqrt{CL_0}$ e fizemos $\omega_c \rightarrow \infty$. Assim a função espectral efetiva tem uma nova frequência de corte dada por $\min[\Omega, \Omega']$.

Para um SQUID típico [11] temos os seguintes valores: $C \sim 10^{-12} F$, $L \sim 10^{-10} H$, $i_0 \sim 10^{-5} A$, e $R \sim 1 \Omega$. Supondo um campo magnético de $0,1 T$, o que exige SQUIDS com áreas, $A = Li/B$, da ordem de $10^{-14} m^2$ e $10^{-13} m^2$ separados por uma distância da ordem de $10^{-5} m$, temos

$$a(z) = \frac{1}{A(z)^2} \frac{\partial A}{\partial z} \approx 10^{20} m^{-3}.$$

Com estas especificações para nosso aparato obtemos $L_0 \sim 10^{-10} H$ e $\eta = 10^{-32} Kg s^{-1}$. Para uma partícula de massa $m = 1,8 \times 10^{-25} kg$ (átomo de prata) o tempo de relaxação, γ^{-1} , é da ordem de $10 s$. Note que este tempo de relaxação tem grande dependência com as dimensões do SQUID através do parâmetro $a(z)$. Para SQUIDS de maior área esperamos encontrar tempos de relaxação maiores de tal modo que a partícula será insensível as flutuações do fluxo magnético.

Nos capítulos anteriores resolvemos o problema para o caso de uma função espectral Ohmica, assim nossa solução é válida para tempo muito menores que Ω^{-1} e Ω'^{-1} . Para os valores mencionados acima temos $\Omega^{-1} \sim 10^{-10} s$ e $\Omega'^{-1} \sim 10^{-11} s$ respectivamente.

Capítulo 8

Conclusões

Nesse trabalho investigamos efeitos de decoerência de spin discutindo experiências de feixes de partículas submetidos a campos magnéticos. Primeiramente analisamos a influência do alargamento do pacote na experiência da recombinação dos feixes proposta em[1], na qual o campo magnético é tratado classicamente. Com esta mesma análise clássica do campo investigamos como ocorre a perda da coerência de spin em uma experiência de Stern-Gerlach. Por fim preenchemos uma lacuna existente, até o momento, na literatura analisando os efeitos de inevitáveis flutuações do campo magnético, portanto tratado quanticamente, na parte espacial da função de onda.

Usando a descrição de Schrödinger observamos que o alargamento da parte espacial da função de onda pode aumentar a contribuição da separação dos pacotes no espaço de momento para a perda de coerência. Como exemplo mostramos que para uma dada configuração do campo magnético na qual a recuperação era de 80% para o caso em que o alargamento era desprezível; essa recuperação diminuiria para 74% quando o pacote dobrava sua largura.

Com o mesmo formalismo nos surpreendemos com o fato de que na experiência de Stern-Gerlach, a coerência de spin era perdida muito antes dos pacotes se separarem no espaço de coordenadas, sendo esta perda devida à separação dos pacotes no espaço de momento. Deste modo obtemos um mistura estatística tão logo as partículas entram no magneto.

Por último estendemos a análise do interferômetro de Stern-Gerlach incluindo flutuações do campo magnético, através do acoplamento do sistema com um banho de osciladores harmônicos. A introdução dessas flutuações, entre outras coisas, adicionou um fator nos elementos não diagonais do operador densidade no espaço de spin que decai num tempo τ , chamado de tempo de decoerência. Deste modo para que a recuperação de coerência seja possível, devemos ter um tempo de decoerência muito maior que o tempo da experiência que é da ordem de milissegundos.

Para o caso em que as flutuações do campo magnético têm como origem as flutuações do fluxo magnético de um SQUID, com dimensões da ordem de microns, usado como o gerador do campo, observamos que a dissipação deve ser levada em conta, pois obtivemos tempos de decoerência da ordem de microsegundos enquanto que o tempo da experiência é da ordem de

0,1 milisegundos. Portanto a dissipação nos fornece um limite superior para a recuperação da coerência.

Apesar de obtermos um tempo de coerência algumas ordens de grandeza menor que o tempo da experiência não podemos nos esquecer que a recombinação dos feixes não é trivial, necessitando de grandes precisões no controle do campo magnético, além de que as aproximações utilizadas favorecem o sucesso da experiência como apontado no final do capítulo 3. Estas aproximações são, sem dúvida, muito mais importantes que as flutuações intrínsecas do campo em geral.

No caso de SQUIDS maiores o tempo de relaxação é muito longo e a decoerência devido às flutuações do campo pode ser desprezada. A vantagem de se trabalhar com SQUIDS micrométricos é que eles nos proporcionam uma grande ampliação das flutuações intrínsecas do campo magnético, permitindo que se possa controlar a decoerência através da variação dos seus parâmetros. Neste caso poderíamos testar diretamente os efeitos da perda de coerência do spin.

Apêndice A

Cálculo do operador densidade reduzido

Neste apêndice mostraremos os detalhes do cálculo do operador densidade reduzido do sistema, apresentado no capítulo 6. A Hamiltoniana proposta pode ser dividida da seguinte forma:

$$H = H_0 + H_I + H_R. \quad (\text{A.1})$$

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \sigma_z f_0(t) z \quad (\text{A.2})$$

$$H_I = \epsilon \sigma_z z \sum_k C_k x_k \quad (\text{A.3})$$

$$H_R = \sum_k \left[\frac{P_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2}{2} x_k^2 + \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} (\epsilon \sigma_z z)^2 \right]. \quad (\text{A.4})$$

Queremos calcular a matriz densidade reduzida para o sistema proposto. Sua expressão foi deduzida no capítulo 4 e escreve-se como

$$\begin{aligned} \rho_{ss'}(x, y, t) = & \int \int \int \int \int d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' dx' dy' \sum_{s''} \sum_{s'''} \langle x \vec{R} S | U(t, t_0) | x' \vec{R}' S'' \rangle * \\ & * \langle x' \vec{R}' S'' | \rho(0) | y' \vec{Q}' S''' \rangle \langle y' \vec{Q}' S''' | U^\dagger(t, t_0) | y \vec{R} S' \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

ou

$$\begin{aligned} \rho_{ss'}(x, y, t) = & \int \int \int \int \int d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' dx' dy' \sum_{s''} \sum_{s'''} K(x, \vec{R}, S, t; x' \vec{R}', S'', 0) \langle x' \vec{R}' S'' | \rho(0) | y' \vec{Q}' S''' \rangle * \\ & * K^*(y, \vec{R}, S', t; y' \vec{Q}', S''', 0) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Lembrando que como consideramos que a velocidade na direção $\hat{y}$ é constante, estamos tratando o problema unidimensionalmente. Logo as variáveis x, y, z correspondem a coordenadas direção $\hat{z}$.

Como na Hamiltoniana S_z comuta com os outros operadores temos

$$K(x, \vec{R}, S, t; x' \vec{R}', S'', 0) = \langle S | S'' \rangle K_S(x, \vec{R}, t; x' \vec{R}', 0) \quad (\text{A.7})$$

no qual o índice S se refere ao valor da variável de spin que se tornou um “parâmetro”, e não mais um operador.

Então ficamos com

$$\rho_{ss'}(x, y, t) = \int \int \int \int \int d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' dx' dy' K_s(x, \vec{R}, t; x' \vec{R}', 0) \langle x' \vec{R}' S | \rho(0) | y' \vec{Q}' S' \rangle K_s^*(y, \vec{R}, S', t; y' \vec{Q}', 0). \quad (\text{A.8})$$

Para condições iniciais separáveis, nas quais a interação entre o sistema e o reservatório é ligada no instante $t = 0$,

$$\langle x' \vec{R}' S | \rho(0) | y' \vec{Q}' S' \rangle = \langle x' S | \rho_1(0) | y' S' \rangle \langle \vec{R}' | \rho_2(0) | \vec{Q}' \rangle. \quad (\text{A.9})$$

Deste modo podemos escrever

$$\rho_{ss'}(x, y, t) = \int \int dx' dy' J_{ss'}(x, y, t; x', y', 0) \langle x' S | \rho_1(0) | y' S' \rangle, \quad (\text{A.10})$$

com

$$J_{ss'}(x, y, t; x', y', 0) = \int \int \int d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' K_s(x, \vec{R}, t; x' \vec{R}', 0) \langle \vec{R}' | \rho_2(0) | \vec{Q}' \rangle K_s^*(y, \vec{R}, S', t; y' \vec{Q}', 0) \quad (\text{A.11})$$

O super-propagador J pode-se ser reescrito da seguinte maneira

$$J_{ss'}(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{i}{\hbar}(S_0^s[x(t')] - S_0^{s'}[y(t')])} F_{ss'}[x(t'), y(t')] \quad (\text{A.12})$$

$$F_{ss'}[x(t'), y(t')] = \int \int \int d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' \rho_2(\vec{R}', \vec{Q}', 0) \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D\vec{R}(t') \int_{\vec{Q}'}^{\vec{Q}} D\vec{Q}(t') * e^{\frac{i}{\hbar}(S_I^s[x(t'), \vec{R}(t')] - S_I^{s'}[y(t'), \vec{Q}(t')])} e^{\frac{i}{\hbar}(S_R^s[\vec{R}(t')] - S_R^{s'}[\vec{Q}(t')])} \quad (\text{A.13})$$

Sabemos calcular o funcional de influência [11] para um oscilador forçado pelas forças $x(t')$ e $y(t')$ que em nosso caso resultam da seguinte correspondência

$$\begin{aligned} x(t) &\rightarrow \epsilon S x(t) \\ y(t) &\rightarrow \epsilon S' y(t) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

e, então, ficamos com

$$F_{ss'} [x(t'), y(t')] = e^{-\frac{1}{\hbar} \Phi_{ss'} [x(t'), y(t')]} \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \Phi_{ss'} [x(t'), y(t')] &= \frac{im}{2} \epsilon^2 [Sx(0) - S'y(0)] \int_0^t dt' \gamma(t') [Sx(t') - S'y(t')] + \\ &+ \frac{im}{2} \epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [Sx(t') - S'y(t')] \gamma(t' - t'') [S\dot{x}(t'') + S'\dot{y}(t'')] + \\ &+ \lambda^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [Sx(t') - S'y(t')] \alpha_R(t' - t'') [Sx(t'') - S'y(t'')] \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

na qual

$$\gamma(t) = \frac{2}{m\pi} \theta(t) \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega t d\omega \quad (\text{A.17})$$

$$\alpha_R(t' - t'') = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2KT}\right) \cos \omega(t' - t'') d\omega \quad (\text{A.18})$$

Agora temos que saber a forma de $J(\omega)$, a função espectral do reservatório. Para o caso de dissipação Ohmica,

$$J(\omega) = \begin{cases} \eta\omega & \text{para } \omega < \Omega \\ 0 & \text{para } \omega > \Omega \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

em que temos uma frequência de corte Ω . Com esta função espectral obtemos

$$\gamma(t) = \frac{2\eta}{m} \delta(t). \quad (\text{A.20})$$

Temos, então,

$$J_{ss'}(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{i}{\hbar} (S_0^s[x(t')] - S_0^{s'}[y(t')])} e^{-\frac{1}{\hbar} \Phi_{ss'}[x(t'), y(t')]} \quad (\text{A.21})$$

$$J_{ss'}(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{i}{\hbar} \beta_{ss'}[x(t'), y(t')]} \quad (\text{A.22})$$

e lembrando que

$$S_0^s[x(t')] = \int_0^t dt' \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - f_0(t') Sx) \quad (\text{A.23})$$

obtemos

$$\beta_{ss'}[x(t'), y(t')] = i \int_0^t dt' \left[\frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \dot{y}^2) - f_0(t') (Sx - S'y) - \frac{\eta}{2} \epsilon^2 (Sx - S'y) (S\dot{x} + S'\dot{y}) \right] +$$

$$- \epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [Sx(t') - S'y(t')] \alpha_R(t' - t'') [Sx(t'') - S'y(t'')] . \quad (\text{A.24})$$

Calculando os termos diagonais($S = S' = \pm 1$) e não diagonais($S \neq S' = \pm 1$) temos

$$\begin{aligned} \beta_d [x(t'), y(t')] &= i \int_0^t dt' \left[\frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \dot{y}^2) \mp f_0(t') (x - y) - \frac{\eta}{2} \epsilon^2 (x - y) (\dot{x} + \dot{y}) \right] + \\ &- \epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [x(t') - y(t')] \alpha_R(t' - t'') [x(t'') - y(t'')] \quad (\text{A.25}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_{od} [x(t'), y(t')] &= i \int_0^t dt' \left[\frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \dot{y}^2) \mp f_0(t') (x + y) - \frac{\eta}{2} \epsilon^2 (x + y) (\dot{x} - \dot{y}) \right] + \\ &- \epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [x(t') + y(t')] \alpha_R(t' - t'') [x(t'') + y(t'')] \quad (\text{A.26}) \end{aligned}$$

Assim eliminamos a variável S de spin. Então vemos que a evolução dos termos fora da diagonal no espaço de spin é diferente da dos termos diagonais. Escrevendo a expressão acima nas novas coordenadas

$$q = \frac{x + y}{2} \quad \xi = x - y \quad (\text{A.27})$$

temos

$$\beta_d = i \int_0^t dt' \left[m\dot{q}\dot{\xi} - \eta\epsilon^2 \xi \dot{q} \mp f_0(t') \xi \right] - \epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \xi(t') \alpha_R(t' - t'') \xi(t'') \quad (\text{A.28})$$

$$\beta_{od} = i \int_0^t dt' \left[m\dot{q}\dot{\xi} - \eta\epsilon^2 \xi \dot{q} \mp 2f_0(t') q \right] - 4\epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' q(t') \alpha_R(t' - t'') q(t'') \quad (\text{A.29})$$

Escrevendo $\beta = i\beta' - \beta''$ temos os super-propagadores diagonais e não diagonais

$$J_d(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{i}{\hbar} [i\beta'_d - \beta''_d]} \quad (\text{A.30})$$

e

$$J_{od}(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{i}{\hbar} [i\beta'_{od} - \beta''_{od}]} \quad (\text{A.31})$$

com

$$\beta'_d = \int_0^t dt' \left[m\dot{q}\dot{\xi} - \eta\epsilon^2 \xi \dot{q} \mp f_0(t') \xi \right] \quad (\text{A.32})$$

$$\beta''_d = \epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \xi(t') \alpha_R(t' - t'') \xi(t'') \quad (\text{A.33})$$

$$\beta'_{od} = \int_0^t dt' \left[m\dot{q}\dot{\xi} - \eta\epsilon^2 \xi q \mp 2f_0(t') q \right] \quad (\text{A.34})$$

$$\beta''_{od} = 4\epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' q(t') \alpha_R(t' - t'') q(t'') \quad (\text{A.35})$$

Em geral quando queremos resolver uma integração funcional, primeramente obtemos os caminhos clássicos convenientes que, extremizam a ação, para depois expandir em torno deles. Para isso definiremos uma ação (ou Lagrangeana) conveniente que neste caso não inclui o termo “forçante” dependente de $f(t')$ e se escreve

$$S_d = \int_0^t dt' \left[m\dot{q}\dot{\xi} - \eta\epsilon^2 \xi \dot{q} \right] \quad (\text{A.36})$$

$$S_{od} = \int_0^t dt' \left[m\dot{q}\dot{\xi} - \eta\epsilon^2 \dot{\xi} q \right] \quad (\text{A.37})$$

$$\left[\frac{\delta S}{\delta x} \right]_{x=x_c} = 0 \quad \left[\frac{\delta S}{\delta y} \right]_{y=y_c} = 0 \quad (\text{A.38})$$

Destas equações obtemos as “equações clássicas de movimento”

$$\ddot{q}_d + 2\gamma\dot{q}_d = 0 \quad (\text{A.39})$$

$$\ddot{\xi}_d - 2\gamma\dot{\xi}_d = 0 \quad (\text{A.40})$$

para os elementos diagonais e

$$\ddot{q}_{od} - 2\gamma\dot{q}_{od} = 0 \quad (\text{A.41})$$

$$\ddot{\xi}_{od} + 2\gamma\dot{\xi}_{od} = 0 \quad (\text{A.42})$$

para os elementos fora da diagonal.

As soluções clássicas destas equações ficam:

$$q_d(t') = \frac{e^{-\gamma t}}{\sinh(\gamma t)} \left[q(t) e^{\gamma t} \sinh(\gamma t') + q(0) \sinh(\gamma(t - t')) \right], \quad (\text{A.43})$$

$$\xi_{od}(t') = \frac{e^{-\gamma t}}{\sinh(\gamma t)} \left[\xi(t) e^{\gamma t} \sinh(\gamma t') + \xi(0) \sinh(\gamma(t - t')) \right], \quad (\text{A.44})$$

$$\xi_d(t') = \frac{e^{\gamma t}}{\sinh(\gamma t)} \left[\xi(t) e^{-\gamma t} \sinh(\gamma t') + \xi(0) \sinh(\gamma(t - t')) \right], \quad (\text{A.45})$$

$$q_{od}(t') = \frac{e^{\gamma t}}{\sinh(\gamma t)} \left[q(t) e^{-\gamma t} \sinh(\gamma t') + q(0) \sinh(\gamma(t - t')) \right], \quad (\text{A.46})$$

com a definição

$$\gamma = \frac{\eta\epsilon^2}{2m}.$$

Agora rescrevemos as trajetórias como a soma de uma parte “clássica” mais uma variação:

$$q = \tilde{q} + q_c \quad \xi = \tilde{\xi} + \xi_c \quad (\text{A.47})$$

com os seguintes extremos

$$\tilde{q}(t) = \tilde{q}(0) = 0, \quad (\text{A.48})$$

$$\tilde{\xi}(t) = \tilde{\xi}(0) = 0. \quad (\text{A.49})$$

Expandindo em torno deles temos

$$\beta'_d = S_d^{class} + \tilde{S}_d \mp \int_0^t dt' f_0(t') [\xi_c + \tilde{\xi}] = \beta_d'^{class} + \tilde{\beta}'_d \quad (\text{A.50})$$

$$\beta''_d = \beta_d''^{class} + \frac{\epsilon^2}{2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \tilde{\xi}(t') \alpha_R(t' - t'') [2\xi_c(t'') + \tilde{\xi}(t'')] \quad (\text{A.51})$$

$$\beta'_{od} = S_{od}^{class} + \tilde{S}_{od} \mp \int_0^t dt' 2f_0(t') [q_c + \tilde{q}] = \beta_{od}'^{class} + \tilde{\beta}'_{od} \quad (\text{A.52})$$

$$\beta''_{od} = \beta_{od}''^{class} + 2\epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \tilde{q}(t') \alpha_R(t' - t'') [2q_c(t'') + \tilde{q}(t'')] \quad (\text{A.53})$$

em que dividimos a “ação” em duas partes; uma clássica que não varia e pode sair da integração funcional e uma segunda que varia com seus extremos fixos em zero. Essa é a vantagem de expandir em torno dos “caminhos clássicos”, pois estes não variam e saem da integração funcional, fornecendo a ação “clássica” que sabemos calcular. A integração funcional que sobra tem como extremos o zero, não dependendo assim das coordenadas iniciais e finais do movimento, condições de contorno. Em grande parte dos problemas esta última integração funcional é uma função do tempo, podendo ser obtida por outros métodos que não o da integração funcional.

Reescrevendo o super propagador, temos

$$J_d(x, y, t; x', y', 0) = e^{\frac{1}{\hbar} [i\beta_d'^{class} - \beta_d''^{class}]} \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{1}{\hbar} [i\tilde{\beta}'_d - \tilde{\beta}''_d]} \quad (\text{A.54})$$

$$J_{od}(x, y, t; x', y', 0) = e^{\frac{1}{\hbar} [i\beta_{od}'^{class} - \beta_{od}''^{class}]} \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{1}{\hbar} [i\tilde{\beta}'_{od} - \tilde{\beta}''_{od}]} \quad (\text{A.55})$$

$$\beta_d'^{class} = S_d'^{class} \mp \int_0^t dt' f_0(t') \xi_c \quad (\text{A.56})$$

$$\beta_{od}'^{class} = S_{od}'^{class} \mp 2 \int_0^t dt' f_0(t') q_c \quad (\text{A.57})$$

A parte clássica da ação pode ser calculada, com o auxílio das equações de movimento (3.47 a 3.50) obtendo-se

$$\beta_d^{''class} = \frac{\epsilon^2}{2} [\xi^2(t) A(t) + 2\xi(t) \xi(0) B(t) + \xi^2(0) C(t)] \quad (A.58)$$

$$\beta_{od}^{''class} = 2\epsilon^2 [q^2(t) A(t) + 2q(t) q(0) B(t) + q^2(0) C(t)] \quad (A.59)$$

para a parte real, na qual usamos que $\alpha_R(t' - t'')$ é par,

$$\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' = \frac{1}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \quad (A.60)$$

e definimos as seguintes funções

$$A(t) = \frac{e^{-2\gamma t}}{\sinh^2 \gamma t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{\gamma(t'+t'')} \sinh \gamma t' \alpha_R(t' - t'') \sinh \gamma t'' \quad (A.61)$$

$$C(t) = \frac{1}{\sinh^2 \gamma t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{\gamma(t'+t'')} \sinh \gamma(t - t') \alpha_R(t' - t'') \sinh \gamma(t - t'') \quad (A.62)$$

$$B(t) = \frac{e^{-\gamma t}}{\sinh^2 \gamma t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{\gamma(t'+t'')} \sinh \gamma t' \alpha_R(t' - t'') \sinh \gamma(t - t'') \quad (A.63)$$

A parte imaginária fica

$$\begin{aligned} \beta_d^{'class} &= \xi(t) q(t) L_-(t) + \xi(0) q(0) L_+(t) - \xi(t) q(0) N(t) - \xi(0) q(t) M(t) \\ &\mp X(t) \xi(t) \mp Z(t) \xi(0) \end{aligned} \quad (A.64)$$

$$\begin{aligned} \beta_{od}^{'class} &= \xi(t) q(t) L_-(t) + \xi(0) q(0) L_+(t) - \xi(t) q(0) M(t) - \xi(0) q(t) N(t) \\ &\mp 2X(t) q(t) \mp 2Z(t) q(0) \end{aligned} \quad (A.65)$$

nas quais novamente definimos algumas funções

$$L_{\pm}(t) = m\gamma [\coth(\gamma t) \pm 1] \quad (A.66)$$

$$N(t) = m\gamma \frac{e^{-\gamma t}}{\sinh \gamma t} \quad (A.67)$$

$$M(t) = m\gamma \frac{e^{\gamma t}}{\sinh \gamma t} \quad (A.68)$$

$$X(t) = \frac{e^{-\gamma t}}{\sinh(\gamma t)} \int_0^t dt' f_0(t') e^{\gamma t'} \sinh \gamma t' \quad (\text{A.69})$$

$$Z(t) = \frac{1}{\sinh(\gamma t)} \int_0^t dt' f_0(t') e^{\gamma t'} \sinh \gamma (t - t') \quad (\text{A.70})$$

A parte “não clássica” da ação, que ainda precisa ser integrada, fica

$$\tilde{\beta}_d'' = \frac{\epsilon^2}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \alpha_R(t' - t'') [\tilde{\xi}(t') \tilde{\xi}(t'') + 2\tilde{\xi}(t') \xi_c(t'')] \quad (\text{A.71})$$

$$\tilde{\beta}_{od}'' = 2\epsilon^2 \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \alpha_R(t' - t'') [\tilde{q}(t') \tilde{q}(t'') + 2\tilde{q}(t') q_c(t'')] \quad (\text{A.72})$$

$$\tilde{\beta}_d' = \int_0^t dt' [m\dot{\tilde{q}}\dot{\tilde{\xi}} - \eta\epsilon^2 \tilde{\xi}\dot{\tilde{q}} \mp f_0(t') \tilde{\xi}]$$

$$\tilde{\beta}_{od}' = \int_0^t dt' [m\dot{\tilde{q}}\dot{\tilde{\xi}} - \eta\epsilon^2 \tilde{q}\dot{\tilde{\xi}} \mp f_0(t') \tilde{q}]$$

Finalmente obtemos

$$J_d(x, y, t; x', y', 0) = e^{\frac{1}{\hbar} [i\beta_d'^{class} - \beta_d''^{class}]} \int_{x'}^x Dx(t') \int_{y'}^y Dy(t') e^{\frac{1}{\hbar} [i\tilde{\beta}_d' - \tilde{\beta}_d'']} \quad (\text{A.73})$$

Como o jacobiano da transformação de coordenadas (A.27) é 1 temos

$$J_d(q, \xi, t; q', \xi', 0) = e^{\frac{1}{\hbar} [i\beta_d'^{class} - \beta_d''^{class}]} \int_0^0 Dq(t') \int_0^0 D\xi(t') e^{\frac{1}{\hbar} [i\tilde{\beta}_d' - \tilde{\beta}_d'']} \quad (\text{A.74})$$

$$J_d(q, \xi, t; q', \xi', 0) = e^{\frac{1}{\hbar} [i\beta_d'^{class} - \beta_d''^{class}]} G_d(q, \xi, t; q', \xi', 0) \quad (\text{A.75})$$

Agora só falta resolver a integral funcional

$$G_d(q, \xi, t; q', \xi', 0) = \int_0^0 Dq(t') \int_0^0 D\xi(t') e^{\frac{1}{\hbar} [i\tilde{\beta}_d' - \tilde{\beta}_d'']} \quad (\text{A.76})$$

com

$$i\tilde{\beta}_d' - \tilde{\beta}_d'' = i \int_0^t dt' [m\dot{\tilde{q}}\dot{\tilde{\xi}} - \eta\epsilon^2 \tilde{\xi}\dot{\tilde{q}} \mp f(t') \tilde{\xi}] - \frac{\epsilon^2}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \alpha_R(t' - t'') \tilde{\xi}(t') [\tilde{\xi}(t'') + 2\xi_c(t'')] \quad (\text{A.77})$$

A seguir mostraremos que G_d é apenas uma função do tempo, o que aqui não é um resultado óbvio devido a dependência funcional em $\xi_c(t'')$.

Ao discretizar a integral funcional, podemos representar a forma resultante por

$$G_d = N \int \delta U e^{U^T M U} e^{B U} \quad (\text{A.78})$$

na qual $U^T = [\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_{N-1}, \tilde{\xi}_1, \dots, \tilde{\xi}_{N-1}]$ é um vetor de $2(N-1)$ dimensões e δU é o elemento de volume neste espaço. B é um outro vetor em $2(N-1)$ dimensões oriundo da discretização de $\xi_c(t'')$ e M é uma matriz $2(N-1) \times 2(N-1)$.

O que há de interessante é que

$$B = \begin{bmatrix} 0 \\ b \end{bmatrix} \quad e \quad M = \begin{bmatrix} 0 & p \\ p & r \end{bmatrix} \quad (\text{A.79})$$

com b um vetor $N-1$ dimensional e p e r matrizes $(N-1) \times (N-1)$. As formas específicas de A e M são devidas ao fato de não haver acoplamento da forma $q(t')q(t'')$.

A integral A.78 é um exemplo bem conhecido de integrais gaussianas multidimensionais e o resultado é

$$N \int \delta U e^{-\frac{i}{2} U^T M U} e^{-B U} = \frac{1}{\sqrt{\det[iM]}} e^{-\frac{i}{2} B M^{-1} B} \quad (\text{A.80})$$

Mas devido ao fato de M ter o seu bloco superior esquerdo nulo, sua inversa terá, necessariamente, o bloco inferior direito nulo. Assim sendo o produto $B M^{-1} B$ será, obviamente, igual a zero. Como toda a dependência de (A.78) em q, ξ, q' e ξ' está contida em B , concluímos que G é única e exclusivamente função do tempo e pode assim ser determinada por outros métodos.

Estas mesmas conclusões podem ser obtidas em relação ao elemento não diagonal, mas não as apresentamos aqui.

Com isto podemos escrever

$$J_d(q, \xi, t; q', \xi', 0) = e^{\frac{i}{\hbar} [\beta_d'^{class} - \beta_d''^{class}]} G_d(t) \quad (\text{A.81})$$

e usando a seguinte notação

$$\xi(t) = \xi \quad \xi(0) = \xi' \quad (\text{A.82})$$

$$q(t) = q \quad q(0) = q' \quad (\text{A.83})$$

temos

$$\begin{aligned} \beta_d'^{class} &= \xi q L_-(t) + \xi' q' L_+(t) - \xi q' N(t) - \xi' q M(t) \\ &\mp X(t) \xi \mp Z(t) \xi' \end{aligned} \quad (\text{A.84})$$

$$\beta_{od}'^{class} = \xi q L_-(t) + \xi' q' L_+(t) - \xi q' M(t) - \xi' q N(t)$$

$$\mp 2X(t)q \mp 2Z(t)q' \quad (\text{A.85})$$

$$\beta_d^{''class} = \frac{\epsilon^2}{2} [\xi^2 A(t) + 2\xi\xi' B(t) + \xi'^2 C(t)] \quad (\text{A.86})$$

$$\beta_{od}^{''class} = 2\epsilon^2 [q^2 A(t) + 2qq' B(t) + q'^2 C(t)] \quad (\text{A.87})$$

Se no início tivermos um pacote gaussiano centrado na origem tal que

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \quad (\text{A.88})$$

o operador densidade escreve-se como

$$\rho_r(q', \xi', 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{q'^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{\xi'^2}{8\sigma^2}} \quad (\text{A.89})$$

Para encontrar $G(t)$ podemos fazer o traço de $\rho(q', \xi', t)$ usando o operador densidade inicial acima e a condição de normalização

$$\int dx \rho(x, x, t) = 1 \rightarrow \int dx \int dq' \int d\xi' J(x, 0, t, q', \xi', 0) G(t) \rho(q', \xi', 0) = 1 \quad (\text{A.90})$$

Tomando o limite $\sigma \rightarrow 0$, na integral acima, a exponencial em q' se torna uma função delta. Fazendo a integração em x e ξ' e igualando a 1 obtemos

$$G(t) = \frac{m\gamma e^{\epsilon t}}{2\pi\hbar \sinh \gamma t} \quad (\text{A.91})$$

Agora podemos calcular o operador densidade reduzido do sistema para o estado inicial A.89.

O elemento diagonal no espaço de spin fica

$$\begin{aligned} \rho_d(q, \xi, t) = & \sqrt{\frac{\pi}{a}} G(t) \exp \left\{ -\frac{M^2}{4a\hbar^2} \left(q \mp \frac{Z}{M} \right)^2 - \xi^2 \left[\frac{\epsilon^2}{2} \frac{A}{\hbar} + \frac{N^2 \sigma^2}{2\hbar^2} - \frac{1}{4a\hbar^4} (\sigma^2 N L_+ - \epsilon^2 \hbar B)^2 \right] \right. \\ & \left. + \frac{i}{\hbar} \left[L_- - \frac{M}{2a\hbar^2} (\sigma^2 N L_+ - \epsilon^2 \hbar B) \right] q \xi \pm \frac{i}{\hbar} \left[X + \frac{Z}{2a\hbar^2} (\sigma^2 N L_+ - \epsilon^2 \hbar B) \right] \xi \right\} \end{aligned}$$

com

$$a = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{L_+^2 \sigma^2}{2} + \frac{\hbar C \epsilon^2}{2} + \frac{\hbar^2}{8\sigma^2} \right) \quad (\text{A.92})$$

Os elementos não diagonais no espaço de spin ficam

$$\begin{aligned} \rho_{od}(q, \xi, t) = & G(t) \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp \left\{ \left[-\frac{2\sigma^2 N^2}{\hbar^2} \left(1 - \frac{\sigma^2 L_+^2}{2a\hbar^2} \right) + \frac{2\epsilon^2}{\hbar} \left(\frac{\epsilon^2 B^2}{2a\hbar} - A \right) \right] q^2 + \right. \\ & \left. + \frac{i}{\hbar} \left[(\xi M \mp 2Z) \left[\frac{\epsilon^2 B}{2a\hbar} - \frac{\sigma^2 N L_+}{2a\hbar^2} \right] + (\xi L_- \pm 2X) \right] q + \right\} \end{aligned}$$

$$- \left\{ \frac{(\xi M \mp 2Z)^2}{16a\hbar^2} - \frac{2\sigma^2\epsilon^2 L_+ N B}{a\hbar^3} q^2 \right\} \quad (\text{A.93})$$

As funções $A(t)$ e $B(t)$ e $C(t)$, que contém a dependência com a temperatura, podem ser reescritas como

$$A(\theta) = \frac{e^{-2\theta}}{\sinh^2 \theta} \int_0^\theta d\theta' \int_0^\theta d\theta'' e^{\theta'+\theta''} \sinh \theta' \alpha_R(\theta' - \theta'') \sinh \theta'', \quad (\text{A.94})$$

$$B(\theta - \theta'') = \frac{e^{-\theta-\theta''}}{\sinh^2 \theta} \int_0^\theta d\theta' \int_0^\theta d\theta'' e^{\theta'+\theta''} \sinh \theta' \alpha_R(\theta' - \theta'') \sinh \gamma(\theta - \theta''), \quad (\text{A.95})$$

$$C(\theta) = \frac{1}{\sinh^2 \theta} \int_0^\theta d\theta' \int_0^\theta d\theta'' e^{\theta'+\theta''} \sinh(\theta - \theta') \alpha_R(\theta' - \theta'') \sinh(\theta - \theta''), \quad (\text{A.96})$$

nas quais $\theta = \gamma t$,

$$\alpha_R(\theta' - \theta'') = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty J(\lambda) \coth(\kappa\lambda) \cos \lambda(\theta' - \theta'') d\lambda, \quad (\text{A.97})$$

$$J(\lambda) = \frac{J(\omega)}{\gamma}, \quad \lambda = \frac{\omega}{\gamma} \quad e \quad \kappa = \frac{\hbar\gamma}{2KT}. \quad (\text{A.98})$$

Fazendo as integrações em θ' e θ''

$$A(\theta) = \frac{e^{-2\theta}}{2\sinh^2 \theta} \left[8I(0) - I(\theta) - 4(1 - e^{2\theta}) \dot{I}(\theta) + (1 - e^{2\theta})^2 \ddot{I}(0) \right], \quad (\text{A.99})$$

$$B(\theta) = \frac{1}{\sinh^2 \theta} \left[4(I(\theta) - I(0)) - 2\sinh 2\theta \dot{I}(\theta) - (1 - \cosh 2\theta) \ddot{I}(\theta) \right], \quad (\text{A.100})$$

$$C(\theta) = \frac{1}{\sinh^2 \theta} \left[4e^{2\theta} (I(0) - I(\theta)) - 2(1 - e^{2\theta}) \dot{I}(\theta) + (1 - \cosh 2\theta) \ddot{I}(0) \right], \quad (\text{A.101})$$

$$I(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{J(\lambda) \cos \lambda\theta}{\lambda^2(\lambda^2 + 4)} \coth \kappa\lambda d\lambda, \quad \dot{I}(\theta) = \frac{dI(\theta)}{d\theta}, \quad (\text{A.102})$$

Referências Bibliográficas

- [1] Berthold-Georg Englert et. al., Found. of Phys. **18**, 1045 (1988).
- [2] J. Schwinger et. al., Z. Phys. D **10**, 135 (1988).
- [3] M.O. Scully et. al., Phys. Rev. A **40**, 1775 (1989).
- [4] R. do V. Navarro, Tese de Mestrado-UNICAMP-1998.
- [5] C. Cohen-Tannoudji et. al., Quantum Mechanics Vol.1, John Wiley, New York (1977).
- [6] P.A.M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, fourth edition (Oxford University Press, 1958).
- [7] U. Weiss, Quantum Dissipative Systems, World Scientific (1993).
- [8] R. Kubo, Selected papers of professor Ryogo Kubo on the occasion of his sixtieth birthday, 268, Tokyo, Syokabo (1980).
- [10] R.P. Feynman and A.R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill, Inc. (1965).
- [11] A. O. Caldeira, Alguns Aspectos da dinâmica Quântica de uma Partícula Browniana, Notas de Física IFGW-UNICAMP. (1994).
- [12] A. Garg, J. N. Onuchic e V. Ambegaokar, J. Chem. Phys. **83**(9), 4491 (1985).
- [13] A. O. Caldeira e A. J. Leggett, Annals of Physics **149**, 374 (1983).
- [14] L. S. Schulman, Techniques and Applications of Path Integration, first edition(Wiley-VHC Berlin)
- [15] S. Banerjee e R. Ghosh, Phys. Rev. A **62**, 42105-1 (2000).
- [16] B. Friedrich e D. Herschbach, Physics Today December, **53** (2003)