

Este exemplar corresponde a redação final da Tese de mestrado defendida pela aluna Cristiane de Moraes Smith e aprovada pela comissão examinadora

28/05/89

Amir Ordaggi Caldeira

EFEITOS DE PREPARAÇÃO DO ESTADO INICIAL NA

DINÂMICA DE UMA PARTICULA BROWNIANA QUANTICA

por

CRISTIANE DE MORAIS SMITH

Orientador

AMIR ORDAGGI CALDEIRA

Tese apresentada como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física pelo Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas.

Campinas, abril de 1989.

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

Ao Mauro, que com
seu amor e estímulo, tornou
mais fácil a realização
deste trabalho.

Mais, comme un homme qui
marche seul et dans les ténèbres, je
me résolus d'aller si lentement et d'
user de tant de circonspection en
toutes choses, que, si je n'avançais
que fort peu, je me garderais bien
au moins de tomber...

D'après René Descartes dans
"Le Discours de la Méthode".

AGRADECIMENTOS

Nesta hora feliz, em que chego ao final de mais um período desta longa caminhada que promete ser a carreira de um físico, gostaria de compartilhar o meu júbilo com todos aqueles que de alguma forma contribuíram para a realização desta Tese.

Gostaria de agradecer em especial ao meu Orientador, Professor Amir Caldeira, pela amizade, colaboração e grande dedicação nesta difícil arte que é ensinar alguém a dar os primeiros passos na carreira científica. A ele, que com maestria soube me conduzir, ora a terrenos mais suaves e tranquilos, ora a outros, densos e nebulosos, levantando-me ou deixando-me levantar sozinha, com perfeição, como se a arte de orientar lhe fosse uma velha amiga íntima, o meu muito obrigado.

A minha avó, Carmem, que tão de perto acompanhou toda esta evolução, com sua presença terna e seus mimos.

Aos meus pais e familiares, pelo amor e estímulo dispensados.

Aos meus amigos que compartilharam da minha alegria cada vez que um termo espúrio desaparecia ou uma integral era resolvida.

Aos professores e funcionários do IFGW, que com sua eficiência e amizade, propiciaram a existência de um ambiente de trabalho agradável.

Ao Professor Edison Zacarias da Silva, que permitiu o uso do seu microcomputador para a edição desta tese.

Ao CNPQ, FAPESP e UNICAMP pelo apoio financeiro.

Enfim, a todos que com amizade e incentivo ajudaram-me a concluir esta etapa da minha vida.

Resumo

Neste trabalho nós desenvolvemos e aplicamos uma generalização da aproximação de Feynman e Vernon para o caso de um oscilador quântico dissipativo. Nós desenvolvemos um método variacional para tratar a integral de trajetória que controla a dinâmica do operador densidade reduzido daquele sistema quando ele está sujeito a uma condição inicial arbitrária. O método é completamente independente das simetrias específicas envolvidas no problema e embora nós o tenhamos aplicado para o oscilador harmônico nós acreditamos que ele poderia ser estendido para sistemas mais complexos.

Abstract

In this work we apply and develop a generalization of the Feynman-Vernon approach to the case of a quantum mechanical damped oscillator. We develop a variational method to treat the path integral that controls the dynamics of the reduced density operator of that system once this is subject to an arbitrary initial condition. The method is completely independent of the specific symmetries involved in the problem. Although we have particularly applied it to the harmonic oscillator we believe it could be extended to more complex systems.

ÍNDICE

I. INTRODUÇÃO	1
II. O MODELO	5
A) LIMITE CLÁSSICO	5
B) LIMITE QUÂNTICO	14
III. O OSCILADOR HARMÔNICO DISSIPATIVO	34
A) O NOVO FUNCIONAL DE INFLUÊNCIA	34
B) O SUPERPROPAGADOR J	53
C) O OPERADOR DENSIDADE REDUZIDO	67
IV. VALORES MÉDIOS DOS OBSERVÁVEIS	70
A) O OSCILADOR HARMÔNICO	70
B) PARTÍCULA LIVRE	74
V. CONCLUSÕES	79
VI. APÊNDICES	83
VII. FIGURAS	139
VIII. REFERÊNCIAS	141

I. INTRODUÇÃO

O problema da descrição de um sistema quântico dissipativo tem despertado grande interesse nos últimos anos. A quantização de sistemas dissipativos é um problema difícil, uma vez que a formulação usual da quantização canônica não pode ser aplicada. Este impasse pode ser resolvido de duas maneiras. Ou tentamos modificar o esquema canônico de quantização, ou então, mantemo-lo inalterado e modificamos o sistema.

Neste trabalho adotaremos esta última abordagem, que se baseia no fato de os sistemas dissipativos não serem isolados. Acopla-se então o sistema a um reservatório para depois efetuar-se a quantização do sistema composto segundo o processo usual. Posteriormente eliminam-se as variáveis do banho e obtém-se a dinâmica do sistema de interesse.

Este problema foi primordialmente estudado por Feynman e Vernon, através da técnica de integração funcional. Eles estudaram o comportamento quântico de sistemas a temperaturas arbitrariamente baixas e dissipação arbitrariamente forte.

Caldeira e Leggett apresentaram um estudo detalhado do Movimento Browniano quântico no caso de dissipação ôhmica, ou seja, quando a função densidade espectral do reservatório varia linearmente com a frequência.

Entretanto, da mesma forma que Feynman e Vernon, eles admitiram uma condição inicial fatorizável para o problema. Supondo que inicialmente a partícula e o reservatório estavam desacoplados, eles podiam fatorizar o operador densidade inicial em duas partes, uma que dependia apenas da partícula e outra que

continha informações referentes apenas ao reservatório. Apesar de simplificar enormemente o problema, tal suposição não corresponde a uma descrição muito adequada da realidade. O mais natural seria considerarmos inicialmente o sistema e o reservatório em equilíbrio e não desacoplados.

Nesta linha, Hakim e Ambegaokar estudaram a evolução no tempo de estados iniciais não fatorizáveis de uma partícula livre com dissipação ôhmica. No entanto, o formalismo adotado por eles explora a invariância translacional da Hamiltoniana total e não pode ser generalizado para qualquer sistema.

Este trabalho visa tratar a condição inicial não fatorizável segundo o formalismo de Feynman e Vernon e deste modo obter resultados mais gerais do que os obtidos por Hakim e Ambegaokar. Assim, as correlações entre o banho e o sistema de interesse no estado inicial são descritas por uma integral funcional Euclidiana adicional. Os resultados são desenvolvidos para um modelo quântico específico, que é o de uma partícula quântica se movendo num campo potencial e interagindo linearmente com um reservatório representado por um conjunto de N osciladores harmônicos (N é um número infinito se comparado com as dimensões do problema). Partindo de um tratamento geral com o formalismo de integrais funcionais resolvemos exatamente o caso de uma partícula sujeita a um potencial harmônico e no limite deste, o caso de uma partícula livre. Em ambas as situações, a partícula está acoplada a um reservatório com dissipação ôhmica. O processo utilizado é válido também para casos mais gerais, onde a função densidade espectral do reservatório $J(\omega)$ tem a forma $\eta\omega^i$, com $i = 2,3,\text{etc.}$ O caso de $i = 3$ é obtido quando se estuda uma partícula carregada em movimento interagindo com o seu próprio campo de radiação no

limite de baixas frequências. Tal estudo foi desenvolvido por Barone e Caldeira [9], dentro do mesmo formalismo.

No segundo capítulo deste trabalho apresentaremos o modelo e discutiremos seus aspectos mais gerais. Analisaremos o comportamento do modelo proposto no limite clássico e verificaremos que ele é adequado. Em seguida, passaremos ao limite quântico. Vamos então escrever o operador densidade do sistema total (sistema de interesse + reservatório), que como sabemos nos permite obter qualquer informação referente a este sistema.

Posteriormente, eliminaremos a informação concernente aos osciladores do banho, pois tomaremos o traço do operador densidade com relação às variáveis do reservatório e assim obteremos o operador densidade reduzido, que contém informações referentes apenas ao sistema de interesse.

Entretanto, como este operador densidade reduzido da partícula depende do operador densidade do sistema total no instante inicial, vamos especificar a condição inicial do problema. Em seguida, adotaremos a representação em integrais funcionais dos propagadores que regem a evolução do sistema composto (sistema de interesse + reservatório) e definiremos o superpropagador J em termos do chamado "Funcional de Influência" seguindo as mesmas diretrizes de Feynman e Vernon, salvo que não faremos a suposição do operador densidade inicial do sistema composto ser fatorizável. Escreveremos então o novo funcional de influência e o compararemos ao anteriormente obtido por Caldeira e Leggett com a condição inicial fatorizável.

No terceiro capítulo aplicaremos os resultados do capítulo 2 no caso específico de uma partícula sujeita a um potencial harmônico. Nós calcularemos as trajetórias de mínima

ação, começando pela integral no caminho "térnico" (tempo complexo) que vai de y' a x' e efetuando posteriormente as outras nos caminhos reais, de x' a x e de y' a y . Poderemos então escrever a expressão para o operador densidade reduzida do sistema, que como sabemos, nos permite obter qualquer informação sobre este mesmo sistema. Em seguida, compararemos os nossos resultados com aqueles disponíveis na literatura.

No quarto capítulo calcularemos os valores médios e os valores quadráticos médios da posição e do momento de uma partícula em termos da posição e do momento iniciais. Um estudo comparativo será feito entre o oscilador harmônico e a partícula livre, considerando-se as diferentes condições iniciais.

O quinto capítulo será destinado às conclusões advindas dos resultados obtidos.

A) LIMITE CLASSICO

1. A Equação de Langevin

No limite clássico, a descrição da dinâmica de uma partícula Browniana é feita através da equação de Langevin:

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

onde M é a massa da partícula, η é a constante de dissipação, $V(q)$ é o potencial externo ao qual a partícula está sujeita e $F(t)$ é uma força flutuante, puramente aleatória, tal que:

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad \langle F(t) F(t') \rangle = 2 \eta k_B T \delta(t-t') \quad 2.2$$

Aqui, $\langle \rangle$ representa a média estatística sobre um conjunto de sistemas identicamente preparados.

Como a equação de Langevin se baseia numa descrição fenomenológica, ela está sujeita a algumas restrições. A massa M da partícula deve ser muito maior do que a massa m das moléculas do fluido e além disso, devemos estudar o movimento em tempos longos quando comparados com o tempo médio entre as colisões moleculares.

No tratamento de um sistema dissipativo, ao decidirmos

considerar explicitamente o acoplamento do sistema de interesse a um reservatório, devemos conhecer o sistema que serve de reservatório para o primeiro e também a maneira como eles interagem entre si.

Em muitos casos, isto pode ser complicado. Entretanto, sistemas compostos diferentes podem ter o subsistema apresentando o mesmo movimento browniano clássico. Isto nos permite assumir que diferentes reservatórios possam apresentar características em comum e nos leva a adotar um modelo que seja simples e que reproduza o limite clássico nas condições apropriadas.

Vamos supor que o sistema composto seja descrito pela seguinte Lagrangeana:

$$L = L_0 + L_I + L_R \quad 2.3$$

onde

$$L_0 = 1/2 M \dot{q}^2 - V_0(q) \quad 2.4$$

$$L_I = - \sum_k C_k q q_k \quad 2.5$$

$$L_R = \sum_k \left[1/2 m_k \dot{q}_k^2 - 1/2 m_k \omega_k^2 q_k^2 \right] \quad 2.6$$

são respectivamente as Lagrangeanas do sistema s , de interação i e do reservatório r . O reservatório é formado por um conjunto de N osciladores de massas m_k , coordenadas q_k , e constantes de acoplamento C_k .

O conjunto de osciladores deve ter certas características

de modo a se comportar como um reservatório real. Sabemos, por exemplo, que um reservatório real deve ter tamanho infinito para que a energia perdida pelo sistema de interesse não retorne a ele mesmo num intervalo de tempo finito.

Mas considerar o limite de volume infinito é análogo a considerar frequências permitidas contínuas para o oscilador.

Assim, definiremos uma densidade espectral do meio através de:

$$J(\omega) = \sum_k \frac{\pi c_k^2}{2 m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k) \quad 2.7$$

que por hipótese se comporta como:

$$J(\omega) = \begin{cases} \eta \omega & \text{se } \omega \leq \Omega \\ 0 & \text{se } \omega > \Omega \end{cases} \quad 2.8$$

onde Ω é uma frequência de corte, bem maior do que as frequências típicas do sistema s . A constante de dissipação η pode ser relacionada com os parâmetros microscópicos do sistema:

$$\int_0^{\Omega} \omega J(\omega) d\omega = \sum_k \frac{\pi c_k^2}{2 m_k} = \frac{\eta \Omega^3}{3}$$

de onde concluímos que

$$\eta = \sum_k 3 \pi c_k^2 / 2 m_k \Omega^3 \quad 2.9$$

Começaremos estudando a equação de movimento clássica da variável $q(t)$ quando a partícula e o reservatório são descritos por 2.4, 2.5 e 2.6.

Escrevendo as equações de Euler-Lagrange para o sistema composto temos:

$$M \ddot{q} = -V_0'(q) - \sum_k c_k q_k \quad 2.10$$

$$m_k \ddot{q}_k = -m_k \omega_k^2 q_k - c_k q \quad 2.11$$

Tomando a transformada de Laplace destas equações obtemos

$$M s^2 \tilde{q}(s) - M s q(0) - M q'(0) = -\tilde{V}_0'(s) - \sum_k c_k \tilde{q}_k(s) \quad 2.12$$

$$m_k s^2 \tilde{q}_k(s) - m_k s q_k(0) - m_k q_k'(0) = -m_k \omega_k^2 \tilde{q}_k(s) - c_k \tilde{q}(s) \quad 2.13$$

onde
$$\tilde{q}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} q(t) dt$$

$$\tilde{q}_k(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} q_k(t) dt$$

$$\tilde{v}'_o(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} v'_o(q(t)) dt$$

Admitiremos então as seguintes condições iniciais:

$$\begin{aligned} q(0) &= 0 & q'(0) &= 0 \\ q_k(0) &= q_k^0 & q'_k(0) &= \dot{q}_k^0 \end{aligned} \quad 2.14$$

onde o símbolo linha (') representa a derivada da função.

Substituindo as condições 2.14 em 2.12 e 2.13 obtemos:

$$M s^2 \tilde{q}(s) = -\tilde{v}'_o(s) - \sum_k C_k \tilde{q}_k(s) \quad 2.15$$

$$m_k \tilde{q}_k(s) [s^2 + \omega_k^2] = m_k s q_k^0 + m_k \dot{q}_k^0 - C_k \tilde{q}(s) \quad 2.16$$

Isolando $\tilde{q}_k(s)$ na equação 2.16 e substituindo o resultado em 2.15 obtemos:

$$M s^2 \tilde{q}(s) = -\tilde{v}'_o(s) - \sum_k \frac{C_k (s q_k^0 + \dot{q}_k^0)}{(s^2 + \omega_k^2)} + \sum_k \frac{C_k^2 \tilde{q}(s)}{m_k (s^2 + \omega_k^2)} \quad 2.17$$

O último termo da equação 2.17 acima pode ser reescrito:

$$\sum_k \frac{C_k^2 \tilde{q}(s)}{m_k (s^2 + \omega_k^2)} = \sum_k \frac{C_k^2 \tilde{q}(s)}{m_k \omega_k^2} - \sum_k \frac{C_k^2 s^2 \tilde{q}(s)}{m_k \omega_k^2 (s^2 + \omega_k^2)} \quad 2.18$$

Por sua vez, o último termo da equação 2.18, com o auxílio da definição de $J(\omega)$ em 2.7 e 2.8 torna-se:

$$- \sum_k \frac{C_k^2 s^2 \tilde{q}(s)}{m_k \omega_k^2 (s^2 + \omega_k^2)} = \frac{-2 s^2 \tilde{q}(s)}{\Pi} \int_0^{\Omega} \frac{J(\omega') d\omega'}{\omega' (\omega'^2 + s^2)} = \frac{-2 s^2 \tilde{q}(s)}{\Pi} \int_0^{\Omega} \frac{\eta d\omega'}{\omega'^2 + s^2} = \left[-\eta s + O\left(\frac{\eta s^2}{\Omega}\right) \right] \tilde{q}(s) \quad 2.19$$

Desprezando os termos da $O\left(\frac{\eta s^2}{\Omega}\right)$, pois $\Omega \gg \eta \omega$, e usando as equações 2.18 e 2.19, podemos reescrever 2.17:

$$M s^2 \tilde{q}(s) + Y'_0(s) - \sum_k \frac{C_k^2 \tilde{q}(s)}{m_k \omega_k^2} + \eta s \tilde{q}(s) = - \sum_k \frac{C_k (s q_k^0 + \dot{q}_k^0)}{(s^2 + \omega_k^2)} \quad 2.20$$

Nosso objetivo é identificar este resultado com uma equação do tipo 2.1. Então, aplicando a transformada de Laplace na

equação de Langevin (2.1) temos:

$$M s^2 \tilde{q}(s) + \tilde{V}'(s) + \eta s \tilde{q}(s) = \tilde{F}(s) \quad 2.21$$

Comparando 2.20 com 2.21, vemos que

$$\tilde{F}(s) = - \sum_k \frac{C_k (s q_k^0 + \dot{q}_k^0)}{(s^2 + \omega_k^2)} \quad 2.22$$

Tomando a antitransformada de $\tilde{F}(s)$ temos:

$$F(t) = - \sum_k C_k q_k^0 \cos(\omega_k t) - \sum_k \frac{C_k}{\omega_k} \dot{q}_k^0 \sin(\omega_k t) \quad 2.23$$

Mas do teorema de equipartição da energia sabemos que:

$$\langle \dot{q}_k^0{}^2 \rangle = \frac{k_B T}{m_k} \quad \langle q_k^0{}^2 \rangle = \frac{k_B T}{m_k \omega_k^2} \quad 2.24$$

Usando 2.24 e 2.7 obtemos para a função correlação:

$$\langle F(t) F(t') \rangle = \sum_k \frac{C_k^2 k_B T}{m_k \omega_k^2} \cos \omega_k (t - t') =$$

$$= \frac{2 k_B T}{\pi} \int_0^{\Omega} \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega (t - t') d\omega \quad 2.25$$

Usando 2.8 e considerando Ω muito maior do que as escalas de frequências de interesse $(\Omega + \omega)$ temos

$$\langle F(t) F(t') \rangle = \frac{2 \eta k_B T}{\pi} \frac{\text{sen } \Omega (t-t')}{(t-t')} = 2 \eta k_B T \delta(t-t') \quad 2.26$$

Quanto ao valor médio de $F(t)$, ele dependerá de $\langle q_k^0 \rangle$ e de $\langle q_k^0 \rangle$. Se eles se anularem,

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad 2.27$$

2. A Renormalização do Potencial

Na comparação das equações 2.20 e 2.21, vimos que o terceiro termo da equação 2.20 não encontrou similar na equação 2.21. Ele representa uma correção $M (\Delta\omega)^2$ à parte harmônica do potencial $V_0(q)$. Ao acoplarmos uma partícula sujeita a um potencial $V_0(q)$ a um banho de osciladores, este potencial é renormalizado por um termo harmônico da forma:

$$\Delta V = - \frac{1}{2} M (\Delta\omega)^2 q^2 \quad 2.28$$

onde

$$M(\Delta\omega)^2 = \sum_k \frac{c_k^2}{m_k \omega_k^2} \quad 2.29$$

Na prática, estas correções não são muito importantes, pois na maior parte dos sistemas em que estamos interessados seria impossível observar o potencial não renormalizado $V_0(q)$. O que realmente importa é o potencial efetivo $V(q) = V_0(q) + \Delta V$.

Há alguns exemplos onde $V(q) = V_0(q)$. Se ao invés de considerarmos a Lagrangeana de interação 2.5 adotarmos um modelo onde:

$$L_j = - \sum_k \tilde{c}_k \dot{q}_k q_k \quad 2.30$$

não haverá diferença entre $V_0(q)$ e $V(q)$. Isto pode ser facilmente verificado. De qualquer forma é conveniente considerarmos a existência do contra-termo na Lagrangeana cujo acoplamento é do tipo coordenada-coordenada para que possamos, desde o início, usar o potencial original $V_0(q)$ na Lagrangeana total.

Assim, um reservatório composto de N osciladores harmônicos acoplados a uma partícula Browniana e desacoplados entre si no regime de dissipação ôhmica nos permite recuperar a equação de Langevin que descreve a dinâmica de uma partícula browniana no limite clássico.

Vamos portanto que o modelo adotado, apesar de simples, é conveniente pois descreve de maneira apropriada a dinâmica do problema no limite clássico. Vamos então ao limite quântico.

B) LIMITE QUANTICO

1. O Operador Densidade Reduzido

Passaremos agora ao tratamento da dinâmica de uma partícula Browniana no limite quântico.

Seja o sistema composto descrito pela Hamiltoniana:

$$H = H_S(p, q) + H_I(q, q_k) + H_R(p_k, q_k) \quad 2.31$$

com

$$H_S = \frac{p^2}{2M} + V_0(q) \quad 2.32$$

$$H_R = \sum_k \frac{1}{2} \left[\frac{p_k^2}{m_k} + m_k \omega_k^2 q_k^2 \right] \quad 2.33$$

$$H_I = \sum_k \left[c_k q_k q + \frac{c_k^2}{2 m_k \omega_k^2} q^2 \right] \quad 2.34$$

onde H_S , H_I e H_R representam respectivamente as Hamiltonianas do sistema de interesse, de interação e do reservatório. Podemos computar o operador densidade do sistema composto através de:

$$\hat{\rho}(t) = \exp \left[\frac{-i H t}{\hbar} \right] \hat{\rho}(0) \exp \left[\frac{i H t}{\hbar} \right] \quad 2.35$$

Como sabemos, toda informação referente a um determinado

subsistema quântico pode ser obtida através do operador densidade reduzido do sistema, que por sua vez é obtido tomando-se o traço parcial do operador densidade do sistema composto com respeito às variáveis do reservatório acoplado ao subsistema.

Assim, se $\hat{O} = \hat{O}(p, q)$ é um operador genérico:

$$\begin{aligned} \langle \hat{O}(p, q) \rangle &= \text{tr}_{\mathcal{R}} \left\{ \hat{\rho}(t) \hat{O} \right\} = \text{tr}_{\mathcal{S}} \left\{ \left[\text{tr}_{\mathcal{R}} \hat{\rho}(t) \right] \hat{O} \right\} = \\ &= \text{tr}_{\mathcal{S}} \left\{ \tilde{\rho}(t) \hat{O} \right\} \end{aligned} \quad 2.36$$

onde $\tilde{\rho}(t) = \text{tr}_{\mathcal{R}} \hat{\rho}(t)$ é o operador densidade reduzido do sistema de interesse.

Então, introduzindo o vetor $\hat{R} = (R_1, R_2, \dots, R_N)$ onde R_k é o valor assumido pela coordenada q_k e usando a relação de completude:

$$\int \int dx' dR' |x' \hat{R}'\rangle \langle x' \hat{R}'| = 1 \quad 2.37$$

podemos escrever o operador densidade do sistema composto $\hat{\rho}(t)$ na representação de coordenadas como :

$$\begin{aligned} \langle x \hat{R} | \hat{\rho}(t) | y \hat{Q} \rangle &= \int \int \int \int dx' dy' dR' dQ' \langle x \hat{R} | e^{-iHt/\hbar} | x' \hat{R}' \rangle * \\ &* \langle x' \hat{R}' | \hat{\rho}(0) | y' \hat{Q}' \rangle \langle y' \hat{Q}' | e^{+iHt/\hbar} | y \hat{Q} \rangle \end{aligned} \quad 2.38$$

Reconhecendo o elemento de matriz $\langle x\hat{R} | e^{-iHt} | x'\hat{R}' \rangle$ como o propagador de Feynman $K(x, \hat{R}, t; x', \hat{R}', 0)$ do sistema completo podemos escrever:

$$\langle x \hat{R} | \hat{\rho}(t) | y \hat{Q} \rangle = \int \int \int \int dx' dy' d\hat{R}' d\hat{Q}' K(x, \hat{R}, t; x', \hat{R}', 0) * \\ * K^*(y, \hat{Q}, t; y', \hat{Q}', 0) \langle x' \hat{R}' | \hat{\rho}(0) | y' \hat{Q}' \rangle \quad 2.39$$

Vamos agora eliminar as variáveis do banho, uma vez que estamos interessados apenas no comportamento da partícula browniana.

Tomando o traço parcial com respeito às variáveis do reservatório (fazendo $\hat{R} = \hat{Q}$ e integrando em \hat{R}) temos que o operador densidade reduzido se escreve:

$$\tilde{\rho}(x, y, t) = \int d\hat{R} \langle x \hat{R} | \hat{\rho}(t) | y \hat{R} \rangle = \\ = \int \int \int \int \int d\hat{R} dx' dy' d\hat{R}' d\hat{Q}' K(x, \hat{R}, t; x', \hat{R}', 0) K^*(y, \hat{R}, t; y', \hat{Q}', 0) * \\ * \langle x' \hat{R}' | \hat{\rho}(0) | y' \hat{Q}' \rangle \quad 2.40$$

Como podemos notar, o operador densidade reduzido da partícula no tempo t depende do operador densidade total no tempo zero. Portanto, precisamos agora especificar a condição inicial do problema.

2. O estado inicial:

Caldeira e Leggett assumiram que o sistema de interesse e o reservatório estavam inicialmente desacoplados e que a interação era bruscamente ligada em $t = 0^+$. Isto lhes permitia fatorizar o operador densidade inicial do sistema composto na forma:

$$\langle x'R' | \hat{\rho}(0) | y'Q' \rangle = \hat{\rho}(x', R', y', Q', 0) = \hat{\rho}_S(x', y', 0) \hat{\rho}_R(R', Q', 0) \quad 2.41$$

onde $\hat{\rho}_S$ e $\hat{\rho}_R$ são respectivamente, operadores densidade do sistema e do reservatório quando isolados. Além disso, eles consideravam que $\hat{\rho}_R$ representava o reservatório em equilíbrio.

Neste trabalho, consideraremos que inicialmente o sistema de interesse, ou seja, a partícula Browniana, está em equilíbrio com o reservatório, quando então o sistema é perturbado.

Podemos considerar três diferentes possibilidades:

Caso (1):

$$\rho_0(x', y', R', Q') = \rho_0^S(x', y') \rho_{eq}^{RS}(x', y', R', Q') \quad 2.42$$

Aqui, ρ_0^S é uma função arbitrária que depende apenas das variáveis do sistema de interesse, enquanto que ρ_{eq}^{RS} representa o operador densidade no equilíbrio do universo completo formado pelo sistema e pelo reservatório. Esta primeira condição significa que a partícula e o reservatório estão em equilíbrio térmico em $t = 0$ e então se efetua uma medida da posição da partícula. No apêndice 1 mostramos que a expressão 2.42 realmente corresponde a esta

Caso (ii)

$$\rho_0(x',y',\vec{R}',\vec{Q}') = \overline{\rho_{eq}^{RS}}(x',y',\vec{R}',\vec{Q}') \quad 2.43$$

Aqui, $\overline{\rho_{eq}^{RS}}$ é o operador densidade no equilíbrio do sistema total quando a partícula está sujeita a um potencial $\overline{V}_0(q)$ que é abruptamente modificado para $V_0(q)$ em $t = 0$. ($\overline{V}_0(q)$ é o potencial de preparação). Quando esta modificação ocorre, $\overline{\rho_{eq}^{RS}}$ deixa de ser o estado de equilíbrio do sistema total. Consequentemente ele relaxa para um novo estado de equilíbrio $\overline{\rho_{eq}^{RS}}(x,y,\vec{R},\vec{Q})$, que é o estado de equilíbrio do sistema total quando a partícula de interesse está sujeita a $V_0(q)$.

Caso (iii)

$$\rho_0(x',y',\vec{R}',\vec{Q}') = \rho_0^S(x',y') \overline{\rho_{eq}^{RS}}(x',y',\vec{R}',\vec{Q}') \quad 2.44$$

Este caso é uma combinação dos dois anteriores. Em $t = 0$ a partícula de interesse está sujeita a um potencial de preparação $\overline{V}_0(q)$. Então efetua-se uma medida da posição da partícula e simultaneamente altera-se o potencial de preparação para $V_0(q)$. Se analisarmos o apêndice 1, podemos facilmente verificar que ρ_0^S continua a ser descrito pela equação A1.12.

Uma vez que este é o caso mais geral, a partir de agora trabalharemos explicitamente com ele. Vamos desenvolver o novo funcional de influência apenas para o caso (iii) e quando necessário, vamos particularizá-lo para os casos (i) e (ii).

Vamos agora proceder aos cálculos. Substituindo 2.44 em

2.40 temos:

$$\tilde{\rho}(x,y,t) = \int \int dx' dy' J(x,y,t; x',y',0) \rho_0^S(x',y') \quad 2.45$$

onde $J(x,y,t; x',y',0) = \int \int \int d\tilde{R}' d\tilde{Q}' d\tilde{R} K(x, \tilde{R}, t; x', \tilde{R}', 0) *$

$$* K^*(y, \tilde{R}, t; y', \tilde{Q}', 0) \overline{\rho_{eq}^{**}}(x', y', \tilde{R}', \tilde{Q}') \quad 2.46$$

Se não houvesse interação entre o sistema e o reservatório, a equação 2.46 reduzir-se-ia a:

$$J(x,y,t; x',y',0) = K_S(x,t; x',0) K_S^*(y,t; y',0) *$$

$$* \int \int \int d\tilde{R} d\tilde{R}' d\tilde{Q}' K_R(\tilde{R}, t; \tilde{R}', 0) K_R^*(\tilde{R}, t; \tilde{Q}', 0) \hat{\rho}_R(\tilde{R}', \tilde{Q}', 0)$$

2.47

A integral do lado direito da equação 2.47 é facilmente reconhecida como $\text{tr}_R \rho_R(t) = 1$, o que nos leva a:

$$J(x,y,t; x',y',0) = K_S(x,t; x',0) K_S^*(y,t; y',0) \quad 2.48$$

Vemos assim que $J(x,y,t; x',y',0)$ funciona como um superpropagador que rege a evolução de $\tilde{\rho}(x,y,t)$ e que no caso do sistema S estar isolado se reduz a um produto de propagadores que regem a evolução de $\psi(x,t)$ e $\psi^*(y,t)$ separadamente

3. Representação em Integrais Funcionais:

Resta-nos agora calcular o propagador $K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0)$ do sistema composto. Para isto devemos conhecer os auto-estados do sistema composto, o que nem sempre é fácil. Assim, adotaremos a notação de integrais de trajetória de Feynman para os propagadores e evitaremos o uso de funções de onda $N+1$ dimensionais.

a) Integral Funcional para Tempo Real

Em termos de integrais funcionais o propagador $K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0)$ se escreve:

$$K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) = \int_{x'}^x \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D\mathbf{x}(t') D\vec{R}(t') \exp \frac{i}{\hbar} S[x(t'), \vec{R}(t')] \quad 2.49$$

$$\text{onde } S[x(t'), \vec{R}(t')] = \int_0^t L[x(t'), \vec{R}(t'); \dot{x}(t'), \dot{\vec{R}}(t')] dt'$$

é a ação correspondente à Lagrangeana do sistema $R+S$. No nosso caso, R é um banho de N osciladores e L é dada pela equação 2.3. As integrais em 2.49 são efetuadas sobre os caminhos $x(t')$ e $\vec{R}(t')$ tais que

$$x(0) = x', \quad x(t) = x, \quad \vec{R}(0) = \vec{R}' \quad \text{e} \quad \vec{R}(t) = \vec{R}$$

b) Integral Funcional Euclideana

O operador densidade pode ser visto como um operador de evolução em tempo imaginário $t = -i\hbar\beta$. A mudança para tempo imaginário altera o sinal da energia cinética e transforma $i S[x, \dot{x}]$ em $-S_E[z, \dot{z}]$:

$$\rho_{eq}^{RS}(x', y', \dot{x}', \dot{y}', 0) = \int_{y'}^{x'} \int_{\dot{y}'}^{\dot{x}'} Dz(u) D\dot{R}'(u) \exp -S_E[z(u), \dot{R}'(u)] / \hbar \quad 2.50$$

onde $S_E[z(u), \dot{R}'(u)]$ é a ação Euclideana do sistema composto.

4. O Novo Funcional de Influência

Substituindo então as representações em integrais funcionais 2.49 e 2.50 em 2.46 temos:

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x \int_{y'}^y \int_{y'}^{x'} Dx(t') Dy(t') Dz(u) F[x], [y], [z] *$$

$$* \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ S_E[x] - S_E[y] - S_{CT}[x] + S_{CT}[y] \right\} *$$

$$* \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \bar{S}_S^E[z] + S_{CT}^E[z] \right\} \quad 2.51$$

onde

$$\begin{aligned}
 F \left[[x], [y], [z] \right] &= \int \int \int d\tilde{R}' \, d\tilde{Q}' \, d\tilde{R} \int \int \int_{\tilde{R}' \tilde{Q}' \tilde{Q}'} D\tilde{R}(t') \, D\tilde{Q}(t') \, D\tilde{R}'(u) * \\
 &* \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ S_I[x, \tilde{R}] + S_R[\tilde{R}] - S_I[y, \tilde{Q}] - S_R[\tilde{Q}] \right\} * \\
 &* \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \bar{S}_{SR}^E [z, \tilde{R}'] + \bar{S}_R^E [\tilde{R}'] \right\} \quad 2.52
 \end{aligned}$$

é o funcional de influência na aceção proposta por Feynman e Vernon e onde:

$$S_S [x] = \int_0^t dt' L_S(x, x, t') \quad 2.53$$

$$S_I [x, \tilde{R}] = \int_0^t dt' L_I(x, \tilde{R}, x, \tilde{R}, t') \quad 2.54$$

$$S_R [\tilde{R}] = \int_0^t dt' L_R(\tilde{R}, \tilde{R}, t') \quad 2.55$$

com L_S , L_I e L_R definidos respectivamente nas equações 2.4, 2.5 e 2.6. Temos também que

$$\bar{S}_R^E [z] = \int_0^{\hbar\beta} du \left\{ \frac{1}{2} M \dot{z}(u)^2 + \bar{V}_0(z) \right\} \quad 2.56$$

$$S_{BR}^E[\vec{R}'] = \int_0^{\hbar\beta} du \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} C_k z R'_k \right\} \quad 2.57$$

$$S_R^E[\vec{R}'] = \int_0^{\hbar\beta} du \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1}{2} m_k \dot{R}'_k{}^2 + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 R'_k{}^2 \right] \right\} \quad 2.58$$

$$S_{cr}^{[z]} = \int_0^t dt' \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{C_k^2}{2 m_k \omega_k^2} \right\} z^2 \quad 2.59$$

$$S_{cr}^E[z] = \int_0^{\hbar\beta} du \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{C_k^2}{2 m_k \omega_k^2} \right\} z^2 \quad 2.60$$

É importante notar que em 2.56 $\bar{V}_0(z)$ é o potencial de preparação, enquanto que em 2.53 $V_0(q)$ é o potencial modificado. No caso particular da condição inicial 2.42, nós devemos substituir $\bar{V}_0(z)$ por $V_0(z)$ em 2.56.

Observando a equação 2.52 vemos que o funcional de influência descreve o produto de propagadoras do sistema quando sujeitos às forças externas $x(t)$ e $y(t)$ e além disso a um outro propagador sujeito à força $z(u)$ onde u é um "tempo complexo".

Calculando as integrais nas variáveis do reservatório na equação 2.52 e definindo $U = \hbar\beta$ obtemos a seguinte expressão para o funcional de influência (Apêndice 2)

$$F[x,y,z] = F[x,y] \prod_k \frac{1}{2} \operatorname{cosech}(\omega_k U/2) \exp \left\{ \frac{C_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} \int_0^U du * \right.$$

$$\bullet \int_0^U du' \frac{\cosh \omega_k (|u - u'| - U/2)}{\sinh \omega_k U/2} z(u) z(u') + \frac{C_k^2}{2 \hbar m_k \omega_k}$$

$$\bullet \int_0^t dt' \int_0^U du z(u) [x(t') - y(t')] \left\{ \left[\coth \omega_k U/2 \sinh \omega_k u \sin \omega_k t' - \cosh \omega_k u \sin \omega_k t' \right] + i \left[\coth \omega_k U/2 \cosh \omega_k u \cos \omega_k t' - \cos \omega_k t' \right] \right\} \sinh \omega_k u \quad \left. \right\} \quad 2.61$$

onde

$$F[x, y] = \prod_k \exp \left\{ - \frac{C_k^2 \coth \omega_k U/2}{2 \hbar m_k \omega_k} \int_0^t dt' \int_0^U dt'' [x(t') - y(t'')] \right.$$

$$\bullet [x(t') - y(t'')] \cos \omega_k (t' - t'') + \frac{1}{2} \frac{C_k^2}{\hbar m_k \omega_k} \int_0^t dt' \int_0^U dt'' \bullet$$

$$\bullet [x(t') - y(t'')] [x(t'') + y(t'')] \sin \omega_k (t' - t'') \left. \right\} \quad 2.62$$

é o funcional de influência obtido por Caldeira e Leggett com a condição inicial fatorizável. Observando a equação 2.61 notamos

que o funcional de influência obtido no caso da condição inicial não fatorizável nada mais é do que o antigo funcional de Caldeira e Leggett $F(x,y)$ multiplicado por um novo termo. Agora, além de $F(x,y)$ que carrega um tipo de acoplamento retardado e avançado entre trajetórias que se movem para frente e para trás no tempo, temos dois novos termos; um que representa uma autointeração de uma trajetória térmica e outro que acopla a trajetória térmica $z(u)$ às trajetórias dinâmicas $x(t)$ e $y(t)$.

Podemos ainda escrever a expressão 2.61 para o funcional de influência de uma forma mais compacta. Para isto, definimos um contorno no plano complexo para tempo imaginário (figura 1) tal que:

$$z(\lambda) = \begin{cases} \lambda + i\varepsilon & \text{para } 0 \leq \lambda \leq t \\ 2t - \lambda - i\varepsilon & \text{para } t \leq \lambda \leq 2t \\ -i(\lambda - 2t) & \text{para } 2t \leq \lambda \leq 2t + \hbar\beta \end{cases} \quad 2.63$$

Assim, podemos definir $F(x,y,z)$ como:

$$F = \exp \phi / \hbar$$

com

$$\phi(R) = \frac{1}{4} \int_{\gamma} d\tau \int_{\gamma} d\sigma \left[f_R(\tau, \sigma) + i \operatorname{sgn}_{\gamma}(\tau, \sigma) f_I(\tau, \sigma) \right] I \left[R(\tau) - R(\sigma) \right] \quad 2.65$$

onde

$$f_R(\tau, \sigma) = \sum_k \frac{c_k^2}{2 m_k \omega_k} \cos \omega_k(\tau - \sigma) \operatorname{coth} \omega_k U/2 \quad 2.66$$

$$f_I(\tau, \sigma) = - \sum_k \frac{C_k^2}{2 m_k \omega_k} \text{sen } \omega_k (\tau - \sigma) \quad 2.67$$

$$\text{sgn}_\gamma = \begin{cases} 1 & \text{se } \tau > \sigma \text{ sobre } \gamma \\ -1 & \text{se } \tau < \sigma \text{ sobre } \gamma \end{cases} \quad 2.68$$

$$I \left\{ R(\tau) - R(\sigma) \right\} = [R(\tau) - R(\sigma)]^2 \quad 2.69$$

e onde $R(z)$ é tal que:

$$R(z) = \begin{cases} R(\lambda + i\varepsilon) & = x(\lambda) \\ R(2t - \lambda - i\varepsilon) & = y(2t - \lambda) \\ R(-i(\lambda - 2t)) & = z(\lambda - 2t) \end{cases} \quad 2.70$$

A verificação de que as expressões 2.64 e 2.61 são equivalentes envolve um cálculo tedioso que omitiremos aqui.

Retornando à expressão 2.61, se usarmos a identidade

$$x(u) x(u') = 1/2 \left\{ x(u)^2 + x(u')^2 - [x(u) - x(u')]^2 \right\} \quad 2.71$$

teremos:

$$F(x, y, z) = F(x, y) \prod_k 1/2 \text{ cossech} \left(\frac{\omega_k u}{2} \right) \exp \left\{ \frac{C_k^2}{4 h m_k \omega_k} \right\}$$

$$\begin{aligned}
& * \int_0^U du \int_0^U du' \frac{\cosh \omega_k (|u - u'| - U/2)}{\sinh (\omega_k U/2)} \left[\frac{z(u)^2 + z(u')^2}{2} \right] - \\
& - \frac{C_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} \int_0^U du \int_0^U du' \frac{\cosh \omega_k (|u - u'| - U/2)}{\sinh (\omega_k U/2)} \frac{[z(u) - z(u')]^2}{2} + \\
& + \frac{C_k^2}{2 \hbar m_k \omega_k} \int_0^t dt' \int_0^U du z(u) [x(t') - y(t')] \left[1 + \coth \left(\omega_k U/2 \right) * \right. \\
& * \left. \cos \omega_k (t' + iu) - \sin \omega_k (t' + iu) \right] \tag{2.72}
\end{aligned}$$

O primeiro termo na exponencial 2.72 pode ser trivialmente integrado e nos fornece como resultado a correção harmônica anteriormente mencionada, anulando assim o contra-termo $(\exp -S_{CT}^{\mathbb{R}} |z| / \hbar)$ que aparece na exponencial real em 2.61 (Apêndice 9). Além disso, se definirmos a função $z(u)$ para o intervalo $0 \leq u \leq \hbar\beta$ como sendo periódica de período $\hbar\beta$, podemos escrever (referência 8):

$$\begin{aligned}
F[x, y, z] &= F[x, y] \prod_k \frac{1}{2} \operatorname{cosech} \left(\frac{\omega_k U}{2} \right) \exp \left\{ - \frac{C_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} * \right. \\
& * \int_{-\infty}^{\infty} du' \int_0^U du e^{-\omega_k |u - u'|} \frac{[z(u) - z(u')]^2}{2} + \frac{C_k^2}{2 \hbar m_k \omega_k} \int_0^t dt' *
\end{aligned}$$

$$* [x(t') - y(t')] [x(t'') - y(t'')] \cos \omega(t' - t'') + i \int_0^{\Omega} d\omega \frac{J(\omega)}{\pi \hbar} *$$

$$* \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [x(t') - y(t')] [x(t'') + y(t'')] \sin \omega(t' - t'') \left. \right\} \quad 2.75$$

Se tomamos o caso particular em que o reservatório tem dissipação ôhmica ($J(\omega) = \eta\omega$) e consideramos $\Omega \rightarrow \infty$ podemos ainda escrever:

$$F[x, y, z] = F[x, y] \prod_k \frac{1}{2} \operatorname{cosech} \left(\frac{\omega_k U}{2} \right) \exp \left\{ - \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\eta \omega}{2 \pi \hbar} * \right.$$

$$* \int_{-\infty}^{\infty} du' \int_0^U du e^{-\omega |u - u'|} [z(u) - z(u')]^2 / 2 - \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\eta \omega}{\pi \hbar} \int_0^t dt' * \left. \right\}$$

$$* \int_0^U du z(u) [x(t') - y(t'')] \left[-1 \operatorname{cotgh} \left(\frac{\omega U}{2} \right) \cos \omega(t' + tu) \right. \\ \left. + \sin \omega(t' + tu) \right] \left. \right\} \quad 2.76$$

onde $F[x, y]$ agora, conforme referência [1], é dado por

$$F[x, y] = \exp \left\{ - \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\eta \omega}{\pi \hbar} \operatorname{cotgh} \frac{\omega U}{2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' * \right.$$

$$\bullet [x(t') - y(t')] [x(t'') - y(t'')] \cos \omega(t' - t'') = 1 - \frac{\eta}{2 \hbar} \bullet$$

$$\bullet \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] [x(t') + y(t')] + \frac{i \eta \Omega}{\pi \hbar} \int_0^t dt' [x(t')]^2$$

$$- y(t')]^2 - \frac{i \eta}{\hbar} [x' + y'] \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \delta(t')$$

2.77

É importante notar que o penúltimo termo de 2.77 cancela exatamente o contra-termo $(\exp i/\hbar (S_{\text{cr}}[y] - S_{\text{cr}}[x]))$ na expressão 2.51. Conforme já mencionamos, este contra-termo foi introduzido devido à renormalização do potencial.

Além disso, sabemos que

Mas

$$\int_0^{\Omega} d\omega \omega e^{-\omega |u - u'|} = \frac{-d}{d|u - u'|} \int_0^{\Omega} d\omega e^{-\omega |u - u'|}$$

$$= \frac{1}{|u - u'|^2} = \frac{1}{(u - u')^2} \quad 2.78$$

pois $\frac{e^{-\Omega |u - u'|}}{|u - u'|} \rightarrow 0$, uma vez que Ω é muito maior do que

as frequências típicas do sistema.

Substituindo então 2.78 em 2.76 e definindo

$$I_0 = \prod_k \frac{1}{2} \operatorname{cosech} \left[\omega_k U/2 \right] \quad 2.79$$

$$f(u) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \eta \omega \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \left[-1 \operatorname{cotgh} \left(\omega U/2 \right) * \right. \\ \left. * \cos \omega (t' + iu) + \operatorname{sen} \omega (t' + iu) \right] \quad 2.80$$

podemos finalmente escrever:

$$F(x, y, z) = F(x, y) I_0 \exp - \tilde{S}_{\text{eff}} / \hbar \quad 2.81$$

onde

$$\tilde{S}_{\text{eff}} = \frac{\eta}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du' \int_0^U du \frac{[z(u) - z(u')]^2}{(u - u')^2} + \int_0^U du z(u) f(u) \quad 2.82$$

Neste ponto seria interessante substituírmos o resultado da equação 2.81 na equação 2.51 para melhor compreendermos as alterações ocorridas na descrição da dinâmica da partícula Browniana devido à consideração da condição inicial não fatorizável. Fazendo isto temos que a equação 2.51 se torna:

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x \int_{y'}^y \int_{y'}^{x'} Dx(t') Dy(t') Dz(u) F(x, y) I_0 *$$

$$* \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ S_S[x] - S_S[y] \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \bar{S}_S^K [z] \exp \frac{-1}{\hbar} \tilde{S}_{\text{eff}} \quad 2.83$$

Se observarmos a expressão obtida por Caldeira e Leggett para o superpropagador J com a condição inicial fatorizável:

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x \int_{y'}^y Dx(t') Dy(t') F[x, y] *$$

$$* \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ S_S[x(t')] - S_S[y(t')] \right\} \quad 2.84$$

podemos notar que o único efeito da condição inicial não fatorizável é acrescentar o termo:

$$I_0 \int_{y'}^{x'} Dz(u) \exp \frac{-1}{\hbar} S_{\text{eff}} \quad 2.85$$

onde $S_{\text{eff}} = \tilde{S}_{\text{eff}} + \bar{S}_S^K [z(u)]$.

Este termo é justamente a representação do acoplamento entre os caminhos reais $x(t')$ e $y(t')$ e o caminho térmico $z(u)$, o que resulta do fato de estarmos considerando inicialmente a partícula Browniana em equilíbrio térmico com o banho de osciladores. Se definirmos um novo funcional de influência \mathbb{I}_N

$$F_N \left\{ (x), (y), (x'), (y') \right\} = I_0 F \left[(x), (y) \right] \int_{y'}^{x'} Dz(u) \exp \frac{-1}{h} S_{eff}$$

2.86

podemos continuar a usar a expressão 2.84 para representar o superpropagador que rege a evolução de uma partícula Browniana inicialmente em equilíbrio com um reservatório, basta substituímos F por F_N . Convém notar que F é apenas um funcional dos caminhos reais $x(t)$ e $y(t)$, enquanto que F_N é não apenas um funcional destes caminhos, mas também uma função das variáveis x' e y' que representam os pontos inicial e final da trajetória térmica.

Devemos enfatizar novamente que em S_S o potencial é $V_0(q)$ enquanto que em \bar{S}_S^E utilizamos o potencial de preparação $\ddot{V}_0(q)$. Em ambos os casos as contribuições devidas ao contra-termo já foram eliminadas. No caso particular da condição inicial 2.42 nós devemos substituir \bar{S}_S^E por S_S^E e aplicar 2.83 em 2.45. Para o caso (ii) devemos substituir 2.83 em 2.45, mas sem usar $\rho_0^S(x', y')$ na equação 2.45.

Para concluir, queremos salientar que fomos capazes de escrever a expressão para o funcional de influência no caso desta condição inicial mais geral sem fazer qualquer hipótese restritiva. Apesar de no final termos calculado o novo funcional de influência no caso específico de dissipação ohmica, os resultados obtidos são bastante gerais e podem ser aplicados para um reservatório com função $J(\omega)$ qualquer. Além disso, o potencial $V_0(q)$ ao qual a partícula está sujeita também não foi especificado e a priori pode ser qualquer. A seguir, efetuaremos uma aplicação desta teoria no caso do oscilador harmônico dissipativo em equilíbrio com um reservatório com dissipação ohmica.

III. O OSCILADOR HARMÔNICO DISSIPATIVO

Vamos agora exemplificar a teoria desenvolvida no capítulo anterior aplicando-a num caso específico. Tomaremos a condição inicial dada pela equação 2.42, em que $\bar{V}_0 = V_0$ e estudaremos o caso de uma partícula sujeita a um potencial harmônico do tipo:

$$V_0(z) = 1/2 M \omega_0^2 z(u)^2 \quad 3.1$$

Neste caso, o modelo é representado pela figura 2.

A) O NOVO FUNCIONAL DE INFLUÊNCIA

No capítulo anterior obtivemos a expressão para o novo funcional de influência F_N no caso em que $J(\omega)$ é dado pela equação 2.8 (dissipação ôhmica):

$$F_N = I_0 \int_{y'}^{x'} Dz(u) \exp \frac{-1}{\hbar} S_{\text{eff}}[z(u)] F(x,y) \quad 3.2$$

Vamos agora resolver esta integral de trajetória no caminho térmico $z(u)$. Para tanto, vamos definir

$$F_N = I_0 F(x,y) \tilde{I}_0 \quad 3.3$$

onde

$$\tilde{Y}_0 = \int_{y'}^{x'} Dz(u) \exp \frac{-1}{\hbar} S_{\text{eff}}[z(u)] \quad 3.4$$

e onde

$$S_{\text{eff}} = \tilde{S}_{\text{eff}} + S_S^E[z(u)] = \frac{\eta}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du' \int_0^U du \frac{|z(u) - z(u')|^2}{(u - u')^2} +$$

$$+ \int_0^U du f(u) z(u) + \int_0^U \left[\frac{M}{2} z(u)^2 + V_0(z) \right] du \quad 3.5$$

com $V_0(z)$ dado pela equação 3.1.

Aqui, $S_{\text{eff}}[z]$ é a ação avaliada ao longo da trajetória $z(u)$ que começa em y' no tempo zero e termina em x' no tempo U .

Temos portanto que resolver a equação 3.4 com S_{eff} descrito pela equação 3.5. A resolução desta integral de trajetória é uma tarefa a priori possível e que parece simples, uma vez que a ação efetiva S_{eff} é quadrática na variável $z(u)$. Basta tomarmos a derivada funcional de S_{eff} e encontrarmos a trajetória z_0 que extremiza a ação efetiva:

$$\left. \frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta z(u)} \right|_{z = z_0} = 0 \quad 3.6$$

Uma vez que tenhamos feito isto, calculamos a segunda derivada funcional de S_{eff} em $z_0(u)$ e resolvemos o problema de autovalores:

$$\int \frac{\delta^2 S_{\text{eff}}}{\delta z(u) \delta z(u')} \Big|_{z = z_c(u)} \delta z(u') du' = \lambda \delta z(u) \quad 3.7$$

O resultado final para 3.4 é então

$$\tilde{Y}_0 = N \sqrt{\frac{1}{\prod_{\alpha} \lambda_{\alpha}}} \exp \left[\frac{-1}{\hbar} S_{\text{eff}} [z_c] \right] \quad 3.8$$

onde N é uma constante de normalização e $\{\lambda_{\alpha}\}$ é o conjunto de autovalores de 3.7.

Entretanto, na prática isto não ocorre, pois a expressão 3.6 é uma equação integro-diferencial linear inhomogênea que não é fácil de ser resolvida. Por isto, vamos resolver a equação 3.4 de uma outra maneira. Vamos aplicar aqui o mesmo método desenvolvido por Caldeira e Leggett no apêndice B da referência [2], uma vez que ali eles resolveram a mesma integral funcional que temos aqui a menos do termo forçante $f(u)$.

O método consiste em fazer uma expansão para qualquer função definida dentro do intervalo $(0, 0)$. Assim, podemos expandir as funções $z(u)$ e $f(u)$ em séries de Fourier e escrever a ação efetiva em termos dos coeficientes da expansão. Deste modo, transformamos o problema que antes era contínuo num problema variacional discreto.

Como sabemos, a contribuição dominante para uma integral funcional vem de trajetórias para as quais a ação efetiva é extrema. Entretanto, antes de extremizar a ação, vamos separá-la em duas partes, uma parte real e outra imaginária. Isto simplifica

de maneira considerável os nossos cálculos, pois agora basta diferenciarmos a parte real ou a parte imaginária da ação para obtermos os coeficientes da expansão. As condições de contorno que determinam os pontos inicial e final da trajetória $z(u) = x(u) + iy(u)$ e $z(u') = x'(u') + iy'(u')$ serão também escritas em termos dos coeficientes da expansão e assim consideradas como vínculos do nosso problema variacional. Este é um problema padrão de multiplicadores de Lagrange.

Uma vez obtidos os coeficientes, podemos substituí-los na expressão da ação e com esta ação minimizada temos resolvido a integral de trajetória térmica. Na realidade, resta ainda uma integral de trajetória com a segunda derivada funcional de S_{eff} , mas como veremos adiante ela não precisa ser resolvida explicitamente.

Após esta breve explicação do que faremos, vamos passar efetivamente ao cálculo de \tilde{I}_0 . Começaremos efetuando uma redefinição de variáveis para centrar a integral em u na origem. A razão de tal procedimento será esclarecida em breve e deriva da necessidade de contornarmos o problema da descontinuidade da trajetória nos limites do intervalo de integração.

Definindo:

$$\tilde{x} = u - U/2 \quad \text{e} \quad \tilde{x}' = u' - U/2 \quad (3.9)$$

temos

$$z(u) = z(\tilde{x} + U/2) = \tilde{z}(\tilde{x}) \quad (3.10)$$

$$z(u') = z(\tilde{x}' + U/2) = \tilde{z}(\tilde{x}') \quad (3.11)$$

$$f(u) = f(\tilde{x} + U/2) = \tilde{f}(\tilde{x}) \quad (3.12)$$

onde

$$\tilde{f}(\tilde{x}) = \frac{\eta}{\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \left[\frac{-1 \cos \omega(t' + i\tilde{x})}{\sinh \omega U/2} \right] \quad (3.13)$$

Podemos então escrever, substituindo \tilde{x} por u :

$$S_{\text{aff}}[z] = \int_{-U/2}^{U/2} du \left\{ \frac{\eta}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du' \frac{[\bar{z}(u) - \bar{z}(u')]^2}{(u - u')^2} + \bar{f}(u) \bar{z}(u) + \right. \\ \left. + \frac{M}{2} \dot{\bar{z}}(u)^2 + \frac{M}{2} \omega_0^2 \bar{z}(u)^2 \right\} \quad (3.14)$$

onde

$$\bar{f}(u) = \frac{\eta}{\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \cosh \omega u * \\ * \left\{ 1 \cos \omega t' \cosh \omega u + \sin \omega t' \sinh \omega u \right\} \quad (3.15)$$

Expandindo agora $\bar{z}(u)$ e $\bar{f}(u)$ em séries de Fourier temos

$$\bar{z}(u) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{z}_n e^{-i\omega_n u} \quad \bar{f}(u) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{f}_n e^{-i\omega_n u} \quad 3.16$$

onde $\bar{z}_n = z_n^R + i z_n^I$ $\bar{f}_n = f_n^R + i f_n^I$

• $\omega_n = 2 n \pi / U$

Deste modo, temos que os coeficientes \bar{f}_n da expansão são dados por: (conforme apêndice 4)

$$\bar{f}_n = \frac{2i\eta (-1)^n}{U} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \omega_n e^{-\omega_n t'} + \bar{f}_0 (-1)^n \quad \text{se } n > 0 \quad 3.17$$

$$\bar{f}_n = \bar{f}_0 (-1)^n \quad \text{se } n < 0 \quad 3.18$$

$$\text{e } \bar{f}_0 = \frac{-2i\eta}{U} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \delta(t') \quad 3.19$$

no limite em que $\Omega \rightarrow \infty$.

Vamos agora escrever a ação efetiva em termos dos coeficientes da expansão. Desenvolvendo o primeiro termo da equação 3.14 temos, conforme apêndice 5:

$$\int_{-U/2}^{U/2} du \frac{\eta}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du' \frac{[\bar{z}(u) - \bar{z}(u')]^2}{(u - u')^2} = \frac{M U}{2} \sum_n \left(2\gamma |\omega_n| \bar{z}_n \bar{z}_{-n} \right) \quad 3.20$$

onde $\gamma = \eta / 2M$

Analogamente temos que:

$$\int_{-U/2}^{U/2} du \frac{M}{2} \dot{\bar{z}}(u)^2 = \frac{M U}{2} \sum_n \omega_n^2 \bar{z}_n \bar{z}_{-n} \quad 3.21$$

$$\int_{-U/2}^{U/2} du \frac{M}{2} \omega_0^2 \bar{z}(u)^2 = \frac{M U}{2} \sum_n \omega_0^2 \bar{z}_n \bar{z}_{-n} \quad 3.22$$

$$\int_{-U/2}^{U/2} du \bar{f}(u) \bar{z}(u) = U \sum_n \bar{f}_n \bar{z}_{-n} \quad 3.23$$

Substituindo 3.20, 3.21, 3.22 e 3.23 em 3.14 temos:

$$S_{\text{eff}}[z] = \frac{M U}{2} \sum_n \left(\omega_n^2 + 2\gamma |\omega_n| + \omega_0^2 \right) \bar{z}_n \bar{z}_{-n} + U \sum_n \bar{f}_n \bar{z}_{-n} \quad 3.24$$

ou ainda, transformando os limites da somatória, temos:

$$S_{\text{eff}}[z] = M U \sum_{n=1}^{\infty} (\omega_n^2 + 2\gamma |\omega_n| + \omega_0^2) \bar{z}_n \bar{z}_{-n} + U \sum_{n=1}^{\infty} \bar{f}_n \bar{z}_{-n} +$$

$$+ U \sum_{n=1}^{\infty} \bar{f}_{-n} \bar{z}_n + \frac{M U \omega_0^2 \bar{z}_0^2}{2} + U \bar{f}_0 \bar{z}_0 \quad (3.23)$$

onde agora

$$\bar{z}_{-n} = \bar{z}_{-n}^R + i \bar{z}_{-n}^I$$

$$\bar{f}_{-n} = \bar{f}_{-n}^R + i \bar{f}_{-n}^I$$

Lembrando então que os coeficientes \bar{z}_n^R , \bar{z}_n^I , \bar{z}_{-n}^R e

\bar{z}_{-n}^I podem ser números complexos; escrevê-los-emos como:

$$\bar{z}_n^R = \frac{a_n^R + i b_n^R}{2}$$

$$\bar{z}_{-n}^R = \frac{a_n^R - i b_n^R}{2}$$

$$\bar{z}_n^I = \frac{a_n^I + i b_n^I}{2}$$

$$\bar{z}_{-n}^I = \frac{a_n^I - i b_n^I}{2}$$

(3.24)

onde a_n^R , b_n^R , a_n^I , e $b_n^I \in \mathbb{R}$.

Além disso, sabemos que \bar{f}_n é um imaginário puro.

Definindo então

$$\tilde{f}_n = -i \bar{f}_n \quad \tilde{f}_0 = -i \bar{f}_0 \quad 3.27$$

e substituindo 3.26 e 3.27 em 3.25 podemos separar a ação em duas partes, uma parte real S_{eff}^R e uma parte imaginária S_{eff}^I , a seguir:

$$S_{\text{eff}}^R = \frac{M U}{g} A_0 (a_0^R)^2 - \frac{U \tilde{f}_0 a_0^I}{2} + \frac{U}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{f}_n (b_n^R - a_n^I) +$$

$$+ \frac{M U}{4} \sum_{n=1}^{\infty} A_n (a_n^R)^2 + b_n^R)^2 - a_n^I)^2 - b_n^I)^2 - \frac{U \tilde{f}_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n *$$

$$* (b_n^R + a_n^I) \quad 3.28$$

$$S_{\text{eff}}^I = \frac{M U}{4} A_0 a_0^R a_0^I + \frac{U \tilde{f}_0 a_0^R}{2} + \frac{U}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{f}_n (a_n^R + b_n^I) +$$

$$+ \frac{M U}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_n (a_n^R a_n^I + b_n^R b_n^I) + \frac{U \tilde{f}_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n +$$

$$i(a_n^R - b_n^I) \quad 3.29$$

$$\text{onde } A_n = \omega_n^2 + 2\gamma|\omega_n| + \omega_0^2 \quad \text{e } A_0 = \omega_0^2$$

Uma vez que separemos a equação numa parte real e em outra imaginária escritas em termos dos coeficientes da expansão, vamos tratar as condições de contorno. Para isto, vamos definir um novo conjunto de variáveis:

$$q(t') = \frac{x(t') + y(t')}{2} \quad \text{e} \quad \xi(t') = x(t') - y(t') \tag{3.30}$$

de modo que

$$q' = \frac{x' + y'}{2} \quad q = \frac{x + y}{2} \quad \xi' = x' - y' \quad \xi = x - y$$

onde $y' = y(0)$, $x' = x(0)$, $y = y(t)$, e $x = x(t)$.

Agora qualquer trajetória $\bar{z}(u)$ saindo de y' no "tempo" $-U/2$ e chegando a x' no "tempo" $U/2$ pode ser decomposta na soma de uma parte simétrica $\bar{z}_s(u)$, onde

$$\bar{z}_s(u) = \frac{\bar{z}(u) + \bar{z}(-u)}{2} \quad \text{e varia de } q' = \frac{x' + y'}{2} \quad \text{até } q'$$

com uma parte anti-simétrica $\bar{z}_a(u)$, onde

$$\bar{z}_a(u) = \frac{\bar{z}(u) - \bar{z}(-u)}{2} \quad \text{e varia de } \frac{-\xi'}{2} = \frac{x' - y'}{2} \quad \text{até } \frac{\xi'}{2}$$

Isto determina as condições de contorno. Substituindo então os coeficientes da expansão temos:

$$q' = \frac{x' + y'}{2} = \frac{\bar{z}(-U/2) + \bar{z}(U/2)}{2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{z}_n (-1)^n =$$

$$= \bar{z}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (\bar{z}_n + \bar{z}_{-n}) (-1)^n = \frac{a_0^R + i a_0^I}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n^R + i a_n^I] (-1)^n$$

3.31

Identificando as partes real e imaginária de cada lado da equação 3.31 temos:

$$q' = \frac{a_0^R}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^R (-1)^n \quad 3.32$$

$$0 = \frac{a_0^I}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^I (-1)^n \quad 3.33$$

A parte anti-simétrica $\bar{z}_a(u)$ deve ser analisada com mais cuidado. A descontinuidade da trajetória em zero e em U exige que se faça um deslocamento na origem do eixo "tempo" de modo que $-U/2 \leq u \leq U/2$. Isto foi feito anteriormente sem que tivéssemos justificado a razão de tal procedimento.

Assim, substituímos as condições de contorno $\bar{z}(U/2) =$

$\bar{z}(-U/2) = \xi'/2$ estipulando que $\bar{z}(u)$ seja periódica de período U mais a condição:

$$\bar{z}\left(\frac{U-\varepsilon}{2}\right) - \bar{z}\left(\frac{-(U-\varepsilon)}{2}\right) = \xi' \quad 3.34$$

onde ε é uma quantidade positiva e pequena que tenderá a zero no final dos cálculos. Estas condições produzem uma trajetória semiclássica que é suave na região de integração, mas tem um salto nas extremidades (com inclinação $\approx \xi'/\varepsilon$) que no limite de $\varepsilon \rightarrow 0$ tende a uma linha reta.

Desse modo, obtemos os vínculos:

$$\begin{aligned} \bar{z}\left(\frac{U-\varepsilon}{2}\right) - \bar{z}\left(\frac{-(U-\varepsilon)}{2}\right) &= \sum_{n=1}^{\infty} 2i(-1)^n (\bar{z}_n - \bar{z}_{-n}) \sin \omega_n \varepsilon / 2 = \\ &= \xi' = \sum_{n=1}^{\infty} 2i(-1)^n \sin \omega_n \varepsilon / 2 (i b_n^R - b_n^I) \end{aligned} \quad 3.35$$

Identificando as partes real e imaginária em ambos os lados da equação 3.35 temos:

$$\xi' = -2 \sum_{n=1}^{\infty} b_n^R (-1)^n \sin \omega_n \varepsilon / 2 \quad 3.36$$

$$0 = -2 \sum_{n=1}^{\infty} b_n^I (-1)^n \sin \omega_n \varepsilon / 2 \quad 3.37$$

Como já mencionamos, a contribuição dominante para a integral funcional 3.4 vem de trajetórias para as quais a ação S_{eff} é extrema. Minimizando então a parte real da ação (equação 3.28) ou a parte imaginária (equação 3.29) sujeitas aos vínculos 3.32, 3.33, 3.36 e 3.37 e usando o método de multiplicadores de Lagrange obtemos (conforme apêndice 6):

$$a_n^R = \frac{2 q' A_0 (-1)^n}{B A_n} \quad 3.38a$$

$$a_0^R = \frac{2 q'}{B} \quad 3.38b$$

$$a_n^I = \frac{2}{M B} \left[\frac{\tilde{f}_0}{2} + A_0 P \right] \frac{(-1)^n}{A_n} - \frac{1}{M} \frac{\tilde{f}_n}{A_n} \quad 3.38c$$

$$a_0^I = \frac{2}{M B} \left[P - \tilde{f}_0 V \right] \quad 3.38d$$

$$b_n^R = \frac{1}{M Q(\epsilon)} \left[4R(\epsilon) - 4 \tilde{f}_0 T(\epsilon) - 2 M \zeta' \right] \frac{(-1)^n}{A_n} \text{sen}(\omega_n \epsilon / 2) - \frac{1}{M} \frac{\tilde{f}_n}{A_n} + \frac{\tilde{f}_0}{M} \frac{(-1)^n}{A_n} \quad 3.38e$$

$$b_n^I = 0 \quad b_0^R = 0 \quad b_0^I = 0 \quad 3.38f$$

onde

$$V = \sum_{n=1}^{\infty} 1/A_n \quad 3.39$$

$$P = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tilde{f}_n (-1)^n}{A_n} \quad 3.40$$

$$B = 2 A_0 \left[\sum_{n=1}^{\infty} 1/A_n \right] + 1 \quad 3.41$$

$$T(\varepsilon) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{sen}(\omega_n \varepsilon/2)}{A_n} \quad 3.42$$

$$R(\varepsilon) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tilde{f}_n (-1)^n \text{sen}(\omega_n \varepsilon/2)}{A_n} \quad 3.43$$

$$Q(\varepsilon) = 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{sen}^2 \omega_n \varepsilon/2}{A_n} \quad 3.44$$

Substituindo 3.38 em 3.28 e 3.29 obtemos (apêndice 7):

$$\overline{S}_{\text{eff}} = \frac{M U q'^2}{2 \kappa} + \frac{M U \xi'^2}{4 Q(\varepsilon)} - \frac{U \xi' \overline{R}(\varepsilon)}{Q(\varepsilon)} - \frac{U \overline{P}^2}{2 M \kappa} + \frac{U \overline{R}(\varepsilon)^2}{M Q(\varepsilon)} \quad 3.45$$

$$\overline{S}_{\text{eff}}^I = \frac{U q' \overline{P}}{\kappa} + U q' \tilde{f}_0 \quad 3.46$$

onde

$$x = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{A_n} \quad 3.47$$

$$\bar{P} = P - \tilde{f}_0 v = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tilde{f}_n (-1)^n}{A_n} \quad 3.48$$

e

$$\bar{R}(\varepsilon) = R(\varepsilon) - \tilde{f}_0 T(\varepsilon) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tilde{f}_n (-1)^n \operatorname{sen}(\omega_n \varepsilon/2)}{A_n} \quad 3.49$$

com

$$\tilde{f}_n = \tilde{f}_n - \tilde{f}_0 (-1)^n = \frac{2n(-1)^n}{U} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \omega_n e^{-\omega_n t'} \quad 3.50$$

Aquí, \bar{S}_{eff} representa a ação minimizada sujeita aos vínculos 3.32, 3.33, 3.36 e 3.37.

Como $\bar{S}_{\text{eff}} = \bar{S}_{\text{eff}}^{\text{R}} + i \bar{S}_{\text{eff}}^{\text{I}}$ temos:

$$\begin{aligned} \bar{S}_{\text{eff}} = & \frac{M U \xi'^2}{4 Q(\varepsilon)} - \frac{U \bar{R}(\varepsilon) \xi'}{Q(\varepsilon)} + \frac{M U}{2 x} \left[q' + \frac{1}{M} \bar{P} \right]^2 + i U q' \tilde{f}_0^{-1} \\ & + \frac{U \bar{R}(\varepsilon)^2}{M Q(\varepsilon)} \quad 3.51 \end{aligned}$$

O último passo para obtermos o valor final de $\bar{S}_{\text{eff}}^{\text{min}}$ é

tomarmos o limite $\epsilon \rightarrow 0$ na equação 3.51. Faremos isto da mesma maneira que Caldeira e Leggett (apêndice B - referência [2]). Não é difícil mostrar que

$$Q(\epsilon) = \frac{U}{2} \left[\epsilon - Q_2 \epsilon^2 + O(\epsilon^2) \right] \quad 3.52$$

onde

$$Q_2 = \frac{1}{U} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[1 - \frac{\omega_n^2}{\lambda_n} \right] \quad 3.53$$

Deste modo, ao substituirmos 3.52 em 3.51 notamos que o primeiro termo de \bar{S}_{eff}^- diverge como ϵ^{-1} . Como foi argumentado em [2], isto é devido ao declive abrupto da trajetória nos extremos do intervalo $(-U/2, U/2)$ e uma vez que isto é consequência da expansão de uma função descontínua em termos de outras contínuas, esta contribuição divergente não deve ser levada em conta. Assim, temos que o primeiro termo da ação efetiva $\bar{S}_{\text{eff}}^{-(1)}$ torna-se:

$$\bar{S}_{\text{eff}}^{-(1)} = M Q_2 \zeta'^2 / 2. \quad 3.54$$

Além disso, temos que $\bar{R}(\epsilon)$ se escreve:

$$\bar{R}(\epsilon) = \frac{2 \eta}{U} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_n \exp(-\omega_n t') \text{sen}(\omega_n \epsilon/2)}{\omega_n^2 + 2 \gamma |\omega_n| + \omega_0^2} \quad 3.55$$

Esta série varia linearmente com z . Se ω_n for muito grande, a exponencial negativa anula os termos da série. Por outro lado, se ω_n não é grande, podemos escrever $\text{sen}(\omega_n \varepsilon/2) \approx \omega_n \varepsilon/2$ e assim verificamos a linearidade em ε .

Desta forma, notamos que o último termo de 3.51 se anula, pois o numerador é proporcional a ε^2 , enquanto que o denominador é proporcional a z . Além disso, o segundo termo de 3.51 ($\overline{S}_{\text{eff}}^{(2)}$) pode então ser escrito como:

$$\overline{S}_{\text{eff}}^{(2)} = - \frac{U \overline{R}(\varepsilon) \xi'}{Q(\varepsilon)} = \frac{-2 \eta \xi' \varepsilon}{U \varepsilon (1 - Q_2 \varepsilon)} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] *$$

$$* \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_n^2 \exp(-\omega_n t')}{\omega_n^2 + 2 \gamma |\omega_n| + \omega_0^2} =$$

$$= \frac{-2 \eta \xi'}{U} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_n^2 \exp(-\omega_n t')}{\omega_n^2 + 2 \gamma |\omega_n| + \omega_0^2}$$

3.56

Finalmente, temos que a ação se reduz a

$$\overline{S}_{\text{eff}} = \overline{S}_{\text{eff}}^{(1)} + \overline{S}_{\text{eff}}^{(2)} + \frac{M U}{2 * } \left[q' + \frac{i \overline{P}}{M} \right]^2 + i U q' \tilde{f}_0$$

3.57

onde $\bar{S}_{eff}^{(1)}$ e $\bar{S}_{eff}^{(2)}$ são dados respectivamente pelas equações 3.54 e 3.56.

Podemos ainda expressar \bar{S}_{eff} na forma integral, utilizando para isto os contornos apropriados de integração (conforme apêndice B). Temos então que a ação efetiva se escreve:

$$\begin{aligned} \bar{S}_{eff} = & \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\omega^3 \coth\left(\frac{\omega U}{2}\right)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2} \left[\xi'^2 - \xi' \int_0^t dt' \xi(t') + \right. \\ & \left. \left[\frac{2(\omega_0^2 - \omega^2)}{\omega} \sin \omega t' - \frac{2\eta}{M} \cos \omega t' \right] \right] + \frac{M U}{2x} \left\{ q' + \frac{2i\gamma}{\pi} \right. \\ & \left. + \int_0^t dt' \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\omega \coth\left(\frac{\omega U}{2}\right)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2} \xi(t') \left[(\omega_0^2 - \omega^2) \cos \omega t' - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{\eta}{M} \omega \sin \omega t' \right] \right\}^2 - i\eta q' \xi' \end{aligned} \quad 3.58$$

É importante salientar que no caso da partícula livre $\omega_0 = 0$ e $x \rightarrow \infty$, pois $x \propto \langle q^2 \rangle$. Neste caso, a equação 3.58 torna-se

$$\bar{S}_{eff} = \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\omega \coth\left(\frac{\omega U}{2}\right)}{\omega^2 + 4\gamma^2} \left[\xi'^2 - \xi' \int_0^t dt' \xi(t') + \right.$$

$$\left[2 \omega \sin \omega t' - \frac{2 \eta}{M} \cos \omega t' \right] - i \eta q' \xi' \quad 3.59$$

e coincide exatamente com a segunda exponencial da equação (57) da referência [7]. Convém ainda notar que o último termo de (3.59) cancela naturalmente um termo imaginário que surge em $\tilde{H}(x,y)$, como veremos adiante.

Outro limite interessante é quando negligenciamos a dependência no tempo em (3.58) ($\xi(t') = 0$). Neste caso, esta expressão torna-se, como era de se esperar, o expoente do operador densidade reduzido do oscilador em equilíbrio com o seu reservatório (equação B.15 do apêndice B da referência [2]).

Então, temos que \tilde{Y}_0 finalmente se escreve:

$$\tilde{Y}_0 = \tilde{G}(t) \exp \frac{-1}{\hbar} \bar{S}_{\text{eff}} \quad 3.60$$

onde \bar{S}_{eff} é dado pela equação 3.58 e $\tilde{G}(t)$ é o resultado de uma integral de trajetória gaussiana que devemos resolver com a segunda derivada funcional de \bar{S}_{eff} . Entretanto, não vamos resolveremos esta integral explicitamente e deixaremos $\tilde{G}(t)$ por ser determinado pela normalização no final dos cálculos, quando estivermos tratando do operador densidade reduzido.

Agora que já resolvemos a integral funcional no nível térmico, estamos aptos a resolver as integrais funcionais de trajetórias reais e assim obtermos uma nova expressão para o superpropagador J . Isto é exatamente o que faremos a seguir.

B) O SUPERPROPAGADOR J

Uma vez que resolvemos a integral de trajetória no caminho térmico, podemos substituir este resultado em 2.81 e então obtermos uma nova expressão para o superpropagador J

$$J(x,y,t;x',y',0) = G(t) \int_{x'}^x \int_{y'}^y Dx(t') Dy(t') F[x,y] *$$

$$* \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ S_S[x(t')] - S_S[y(t')] \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \bar{S}_{eff} \quad 3.61$$

onde \bar{S}_{eff} é dado pela equação 3.57 *

$$G(t) = \tilde{G}(t) I_0$$

Usando então as novas trajetórias definidas em 3.59 podemos reescrever a equação 2.77

$$F[q,\xi] = \exp \left\{ \frac{-\eta}{\pi \hbar} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \coth \frac{\omega \Omega}{2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \xi(t') \xi(t'') * \right. \\ \left. * \cos \omega (t' - t'') - \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \xi(t') q(t') - \right. \\ \left. - \frac{2}{\hbar} \int_0^t dt' \xi(t') \delta(t') \right\} \quad 3.62$$

Voltando a considerar a equação 3.61, temos que para o oscilador harmônico quântico com dissipação

$$S_g[x] = \int_0^t dt' \left[\frac{1}{2} M \dot{x}(t')^2 - \frac{1}{2} M \omega_0^2 x(t')^2 \right] \quad 3.63$$

Então,

$$S_o = S_g[x] - S_g[y] = \int_0^t dt' \left[\frac{1}{2} M \left(\dot{x}(t')^2 - \dot{y}(t')^2 \right) - \frac{1}{2} M \omega_0^2 \left(x(t')^2 - y(t')^2 \right) \right] \quad 3.64$$

Em termos de q e de ξ temos:

$$S_o = S_g[q, \xi] = \int_0^t dt' \left[M \dot{q}(t') \dot{\xi}(t') - M \omega_0^2 q(t') \xi(t') \right] \quad 3.65$$

Escrevendo então J em termos das novas variáveis temos

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = G(t) \int_{q'}^q \int_{\xi'}^{\xi} Dq(t') D\xi(t') \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ -\eta \int_0^t dt' \right.$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \xi(t') \dot{q}(t') + M \int_0^t dt' \dot{q}(t') \dot{\xi}(t') - M \omega_0^2 \int_0^t dt' q(t') \xi(t') - \\
& - 2 \eta q' \int_0^t dt' \xi(t') \delta(t') \} \cdot \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{\eta}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \omega \coth \eta \frac{\omega U}{2} \cdot \right. \\
& \cdot \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \xi(t') \xi(t'') \cos \omega (t' - t'') + \bar{S}_{\text{eff}}^{(1)} + \\
& \left. + \bar{S}_{\text{eff}}^{(2)} + \frac{M U}{2 \kappa} \left[q' + \frac{i \tilde{P}}{M} \right]^2 + i U q' \tilde{f}_0 \right\} \quad 3.66
\end{aligned}$$

Como podemos notar, o termo $i U q' \tilde{f}_0$ cancela exatamente o último termo da exponencial imaginária em 3.66. Este termo foi negligenciado por Caldeira e Leggett em [1] por um argumento errôneo. Aqui, como na referência [7], ele desaparece naturalmente.

Podemos ainda escrever:

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = \Theta(t) \int_{q'}^q \int_{\xi'}^{\xi} Dq(t') D\xi(t') \exp \frac{i S_1 - S_2 - S_3}{\hbar}$$

3.67

onde

$$S_1 = \int_0^t dt' \left[M \dot{q}(t') \dot{\xi}(t') - M \omega_0^2 q(t') \xi(t') - \eta \dot{q}(t') \xi(t') \right] \quad 3.68$$

$$S_2 = \overline{S_{\text{eff}}^{(1)}} + \overline{S_{\text{eff}}^{(2)}} + \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \operatorname{coth} \frac{\omega U}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' * \quad 3.69$$

$$* \xi(t') \xi(t'') \cos \omega (t' - t'') \quad 3.69$$

$$S_3 = \frac{M U}{2\pi} \left[\dot{q}' + \frac{1}{M} P' \right]^2 \quad 3.70$$

Integrando alguns termos de S_1 por partes, chegamos a

$$S_1 = M \dot{q} \xi - M q' \dot{\xi} - \eta q \xi + \eta q' \dot{\xi} - \int_0^t dt' q(t') * \quad 3.71$$

$$* \left[M \ddot{\xi}(t') - \eta \dot{\xi}(t') + M \omega_0^2 \xi(t') \right] \quad 3.71$$

onde o ponto sobre a função ξ representa a derivada temporal.

Como $S_2 = S_2[\xi(t')]$ e $S_3 = S_3[\xi(t')]$, temos que apenas S_1 é um funcional de $q(t')$. Então temos:

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = G(t) \int_{\xi'}^{\xi} D\xi(t') \exp \frac{-S_2 - S_3}{\hbar} \exp \frac{i}{\hbar} *$$

$$* \left\{ M q \dot{\xi} - M q' \dot{\xi}' - \eta q \xi + \eta q' \xi' \right\} \int_{q''}^q Dq(t') \exp \frac{-i}{\hbar} *$$

$$* \int_0^t dt' q(t') \left[M \ddot{\xi}(t') - \eta \dot{\xi}(t') + M \omega_0^2 \xi(t') \right] \quad 3.72$$

A integral funcional em $q(t')$ pode ser trivialmente efetuada e fornece como resultado $\delta(\xi - \xi_c)$, onde ξ_c é tal que:

$$M \ddot{\xi}_c(t') - \eta \dot{\xi}_c(t') + M \omega_0^2 \xi_c(t') = 0 \quad 3.73$$

Calculando ξ_c encontramos:

$$\xi_c(t') = \frac{1}{\sin \nu t} \left\{ \xi e^{-\gamma t} \sin \nu t' + \xi' \sin \nu(t - t') \right\} e^{\gamma t'} \quad 3.74$$

onde

$$\nu = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} \quad \text{se} \quad \omega_0 > \gamma \quad 3.75$$

$$\nu = 1 \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2} \quad \text{se} \quad \omega_0 < \gamma \quad 3.76$$

$$\nu = 1 - \gamma$$

se $\omega_0 = 0$ (partícula livre)

3.77

A integral funcional em ξ da equação 3.72 torna-se também elementar devido à existência da função delta no integrando. Temos finalmente:

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = G(t) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ M q \dot{\xi}_c - M q' \dot{\xi}'_c - \eta q \xi_c + \eta q' \xi'_c \right\} \cdot \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ S_2 [\xi_c] + S_3 [\xi'_c] \right\} \quad 3.78$$

Mas:

$$\xi_c = \xi_c(t) = \xi$$

$$\xi'_c = \xi'_c(0) = \xi'$$

$$\dot{\xi}_c = \dot{\xi}_c(t) = \xi \nu \cotg \nu t - \frac{\xi' \nu e^{\gamma t}}{\text{sen } \nu t} + \gamma \xi$$

$$\dot{\xi}'_c = \dot{\xi}'_c(0) = \frac{\xi \nu e^{-\gamma t}}{\text{sen } \nu t} - \xi' \nu \cotg \nu t + \gamma \xi'$$

3.79

Substituindo 3.79 em 3.78 temos:

$$\begin{aligned}
 J(q, \xi, t | q', \xi', 0) = & G(t) \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ K(t) [q \xi + q' \xi'] - L(t) q' \xi - \right. \\
 & \left. - N(t) q \xi' - M \gamma [q \xi - q' \xi'] \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ S_2 [\xi_c] + S_3 [\xi_c] \right\}
 \end{aligned}
 \tag{3.80}$$

onde

$$K(t) = M \nu \operatorname{cotg} \nu t \tag{3.81}$$

$$N(t) = \frac{M \nu e^{\gamma t}}{\operatorname{sen} \nu t} \tag{3.82}$$

$$L(t) = \frac{M \nu e^{-\gamma t}}{\operatorname{sen} \nu t} \tag{3.83}$$

$$\gamma = \eta / 2 M \tag{3.84}$$

Podemos ainda transformar as séries de S_2 em integrais (Apêndice B). Fazendo isto, podemos escrever:

$$S_2[\xi_c] = \frac{\eta}{2 \pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \operatorname{cotgh} \left(\omega \ell / 2 \right) \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \xi_c(t') \xi_c(t'') *$$

$$\begin{aligned}
 & \bullet \cos \omega(t' - t'') + \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\omega^3 \operatorname{cotgh} \left[\frac{\omega U}{2} \right]}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2} \left[\xi'^2 \right. \\
 & \left. - \xi' \int_0^t dt' \xi_C(t') \left[\frac{2(\omega^2 - \omega_0^2)}{\omega} \operatorname{sen} \omega t' - \frac{2\eta}{M} \cos \omega t' \right] \right]
 \end{aligned}$$

3.85

Substituindo então 3.74 em 3.85 temos:

$$S_p(\xi, \xi') = A(t) \xi^2 + B(t) \xi \xi' + C(t) \xi'^2 \quad 3.86$$

onde $A(t)$, $B(t)$ e $C(t)$ são da forma:

$$f(t) = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \operatorname{cotgh} \left[\frac{\omega U}{2} \right] f_{\omega}(t) \quad 3.87$$

onde

$$A_{\omega}(t) = \frac{e^{-2\gamma t}}{\operatorname{sen}^2 \nu t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \operatorname{sen} \nu t' \cos \omega(t' - t'') \operatorname{sen} \nu t'' e^{\gamma(t'+t'')} \quad 3.88$$

$$B_{\omega}(t) = \frac{2 e^{-\gamma t}}{\operatorname{sen}^2 \nu t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \operatorname{sen} \nu t' \cos \omega(t' - t'') \operatorname{sen} \nu(t - t'') \bullet$$

$$\bullet e^{\gamma(t'+t'')} + \frac{4\gamma\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \frac{e^{-\gamma t}}{\text{sen } \nu t} \int_0^t dt' \text{sen } \nu t' \bullet$$

$$\bullet \cos \omega t' e^{\gamma t'} - \frac{2\omega(\omega^2 - \omega_0^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \frac{e^{-\gamma t}}{\text{sen } \nu t} \int_0^t dt' \text{sen } \nu t' \bullet$$

$$\bullet \text{sen } \omega t' e^{\gamma t'} \quad 3.89$$

$$c_{\omega}(t) = \frac{1}{\text{sen}^2 \nu t} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \text{sen } \nu(t-t') \cos \omega(t'-t'') \text{sen } \nu(t-t'') \bullet$$

$$\bullet e^{\gamma(t'+t'')} + \frac{4\gamma\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \frac{1}{\text{sen } \nu t} \int_0^t dt' \text{sen } \nu(t-t') \bullet$$

$$\bullet \cos \omega t' e^{\gamma t'} - \frac{2\omega(\omega^2 - \omega_0^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \frac{1}{\text{sen } \nu t} \int_0^t dt' \text{sen } \omega t' \bullet$$

$$\bullet \text{sen } \nu(t-t') e^{\gamma t'} + \frac{\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \quad 3.90$$

Quanto à S_3 , podemos do mesmo modo escrever \hat{P} na forma integral. Assim, temos:

$$S_3 = \frac{M U}{2 \pi} \left\{ q' + \frac{2 i \gamma}{\pi} \int_0^t dt' \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\omega \operatorname{ctgh} \left(\frac{\omega U}{2} \right)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4 \gamma^2 \omega^2} \xi_0(t') \right\}^*$$

$$\left[(\omega_0^2 - \omega^2) \cos \omega t' - \frac{\eta}{M} \omega \operatorname{sen} \omega t' \right] \Bigg\}^2 \quad 3.91$$

Substituindo explicitamente o valor de ξ_0 temos:

$$S_3 = \frac{M U}{2 \pi} \left\{ q' + i D(t) \xi + i E(t) \xi' \right\}^2 \quad 3.92$$

onde $D(t)$ e $E(t)$ são da forma $f(t)$ com:

$$D_\omega(t) = \frac{2 e^{-\gamma t}}{M \operatorname{sen} \nu t} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4 \gamma^2 \omega^2} \int_0^t dt' \operatorname{sen} \nu t' e^{\gamma t'} \quad *$$

$$* \left[(\omega_0^2 - \omega^2) \cos \omega t' - \frac{\eta \omega}{M} \operatorname{sen} \omega t' \right] \quad 3.93$$

$$E_\omega(t) = \frac{2}{M \operatorname{sen} \nu t} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4 \gamma^2 \omega^2} \int_0^t dt' \operatorname{sen} \nu(t-t') e^{\gamma t'} \quad *$$

$$* \left[(\omega_0^2 - \omega^2) \cos \omega t' - \frac{\eta \omega}{M} \operatorname{sen} \omega t' \right] \quad 3.94$$

Finalmente, substituindo 3.86 e 3.92 em 3.80 temos:

$$\begin{aligned}
 J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = & G(t) \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ \left[K(t) - M \gamma \right] q \xi + \left[K(t) + \right. \right. \\
 & \left. \left. + M \gamma - \frac{M U E(t)}{\kappa} \right] q' \xi' - N(t) q \xi' - \left[\frac{M U D(t)}{\kappa} + L(t) \right] q' \xi \right\} * \\
 & * \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \left[\frac{M U}{2 \kappa} \right] q'^2 + \left[A(t) - \frac{M U D(t)^2}{2 \kappa} \right] \xi^2 + \right. \\
 & \left. + \left[B(t) - \frac{M U D(t) E(t)}{\kappa} \right] \xi \xi' + \left[C(t) - \frac{M U E(t)^2}{2 \kappa} \right] \xi'^2 \right\}
 \end{aligned}$$

3.95

Neste ponto, é interessante compararmos nossos resultados com aqueles obtidos por Caldeira e Leggett [1]. Considerando a condição inicial fatorizável, eles obtinham a seguinte expressão para o superpropagador: (equação 6.15 da referência 1).

$$\begin{aligned}
 J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = & G(t) \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ \left[K(t) - M \gamma \right] q \xi - N(t) q \xi' + \right. \\
 & \left. + \left[K(t) + M \gamma \right] q' \xi' - L(t) q' \xi \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \overline{A}(t) \xi^2 + \right.
 \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} &+ \overline{B}(t) \xi \xi' + \overline{C}(t) \xi'^2 \end{aligned} \right\} \quad 3.96$$

onde $\overline{A}(t)$, $\overline{B}(t)$ e $\overline{C}(t)$ são da forma

$$f(t) = \frac{M \gamma}{\Omega} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \operatorname{cotgh} \left[\omega U / 2 \right] f_{\omega}(t) \quad 3.97$$

com

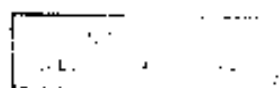
$$\overline{A}_{\omega}(t) = \frac{e^{-2\gamma t}}{\operatorname{sen}^2 \nu t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \operatorname{sen} \nu t' \cos \omega(t'-t'') \operatorname{sen} \nu t'' e^{\gamma(t'+t'')} \quad 3.98$$

$$\overline{B}_{\omega}(t) = \frac{2 e^{-\gamma t}}{\operatorname{sen}^2 \nu t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \operatorname{sen} \nu t' \cos \omega(t'-t'') \operatorname{sen} \nu(t-t'') e^{\gamma(t'+t'')} *$$

$$* e^{\gamma(t'+t'')} \quad 3.99$$

$$\overline{C}_{\omega}(t) = \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \nu t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \operatorname{sen} \nu(t-t') \cos \omega(t'-t'') \operatorname{sen} \nu(t-t'') e^{\gamma(t'+t'')} *$$

$$* e^{\gamma(t'+t'')} \quad 3.100$$



É importante notar que $\overline{\overline{A}}(t) = A(t)$ (eq.3.88), enquanto que $\overline{B}(t)$ e $\overline{C}(t)$ contém apenas o primeiro termo de $B(t)$ e $C(t)$ respectivamente (eqs.3.89 e 3.90)

Verificamos portanto que no caso do oscilador harmônico com a condição inicial fatorizável a expressão 3.67 que descreve o superpropagador no caso da condição inicial não fatorizável continua válida, salvo que agora $S_2 = 0$ e S_2 deve ser tomado com $\overline{B}(t)$ e $\overline{C}(t)$ no lugar de $B(t)$ e $C(t)$, pois agora temos que

$$S_2[\xi_c] = \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \coth \left[\frac{\omega U}{2} \right] \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \xi_c(t') \xi_c(t'') *$$

$$* \cos \omega(t' - t'') = \overline{A}(t) \xi^2 + \overline{B}(t) \xi \xi' + \overline{C}(t) \xi'^2 \quad 3.101$$

Um outro limite interessante é aquele em que $\omega_0 \rightarrow 0$ ($V_0(q) = 0$). Calculando então o valor do superpropagador para o caso da partícula livre ($\omega_0 = 0$, $\nu = i\gamma$) com a condição inicial não fatorizável devemos obter os mesmos resultados obtidos por Hellmuth e Ambegaokar. Neste caso, o modelo é descrito pela figura 3.

Teremos então $J(q, \xi, t; q', \xi', 0)$ dado pela expressão 3.67 onde agora

$$S_1 = \int_0^t dt' \left[M \dot{q}(t') \dot{\xi}(t') - \eta \dot{q}(t') \xi(t') \right] \quad 3.102$$

$$\begin{aligned}
S_2 &= \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \operatorname{cotgh} \frac{\omega U}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \xi_c(t') \xi_c(t'') \cos \omega(t'-t'') + \\
&+ \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\omega \operatorname{cotgh} (\omega U/2)}{(\omega^2 + \eta^2/M^2)} \left\{ \xi_c^2 + \xi_c' \int_0^t dt' \xi_c(t') \right\} * \\
&* \left[\frac{2\eta}{M} \cos \omega t' - 2\omega \operatorname{sen} \omega t' \right] \} \quad 3.103
\end{aligned}$$

$$S_3 = 0 \quad 3.104$$

pois $\propto \langle q^2 \rangle$ e para a partícula livre $\langle q^2 \rangle + \omega$.

Este resultado é idêntico à expressão 57 da referência

[7].

No caso da partícula livre com a condição inicial fatorizável, basta fazermos $\nu = i\gamma$ e $\omega_0 = 0$ nos resultados obtidos para o oscilador harmônico. Temos então que J é representado pela equação 3.87 com:

$$S_1 = \int_0^t dt' \left[M \dot{q}(t') \dot{\xi}(t') - \eta \dot{q}(t') \xi(t') \right] \quad 3.105$$

$$S_2 = \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \operatorname{cotgh} \frac{\omega U}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \xi_c(t') \xi_c(t'') \cos \omega(t'-t'')$$

3.106

C) NORMALIZAÇÃO DO OPERADOR DENSIDADE REDUZIDO

Efetuada a transformação de variáveis na equação 2.45, temos que o operador densidade reduzido do sistema se escreve:

$$\tilde{\rho}(q, \xi, t) = \int \int dq' d\xi' J(q, \xi, t; q', \xi', 0) \rho_0^S(q', \xi') \quad 3.107$$

onde $J(q, \xi, t; q', \xi', 0)$ é dado por 3.95 ou 3.96, depende de qual condição inicial estamos considerando.

Procederemos agora à normalização do operador densidade reduzido no caso da condição inicial não fatorizável. Sabemos que $\text{tr } \rho(q, \xi, t) = 1$. Então

$$\int \rho(q, 0, t) dq = 1 \quad 3.108$$

Tomando $\xi = 0$ em 3.95 temos que

$$\tilde{\rho}(q, 0, t) = \int \int dq' d\xi' \rho_0^S(q', \xi', 0) \exp \frac{i}{\hbar} \left[\alpha q' \xi' - N(t) q \xi' \right] *$$

$$* \exp \frac{-1}{\hbar} \left[\frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right] G(t) \quad 3.109$$

onde $G(t)$ é a função de t a ser determinada pela normalização e

$$\alpha = K(t) + M \gamma - M U E(t) / \kappa \quad 3.110$$

$$\Delta = G(t) - M U E(t)^2 / 2 \kappa \quad 3.112$$

Então

$$\int \int dq' d\xi' \exp \left[\frac{i \alpha q' \xi'}{\hbar} \right] \exp \frac{-1}{\hbar} \left[\frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right] *$$

$$* \rho_0^S(q', \xi', 0) \int dq \exp \left[\frac{-i N(t) \xi' q}{\hbar} \right] G(t) =$$

$$\int \int dq' d\xi' \exp \left[\frac{i \alpha q' \xi'}{\hbar} \right] \exp \frac{-1}{\hbar} \left[\frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right] *$$

$$* \rho_0^S(q', \xi', 0) \frac{2 \pi \hbar}{N(t)} \delta(\xi') G(t) =$$

$$= \int dq' \exp \left[\frac{-q'^2}{2 \hbar \lambda} \right] \rho_0^S(q', 0, 0) \frac{2 \pi \hbar}{N(t)} G(t) = 1 \quad 3.113$$

$$\text{Mas } \int dq' \exp \left[\frac{-q'^2}{2 \hbar \lambda} \right] \rho_0^S(q', 0, 0) = 1 \quad 3.114$$

Então $G(t) = N(t) / 2 \pi \hbar$ e o operador densidade reduzido normalizado $\tilde{\rho}_N(q, \xi, t)$ se escreve:

$$\tilde{\rho}_N(q, \xi, t) = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} \int \int dq' d\xi' J(q, \xi, t; q', \xi', 0) \rho_0^S(q', \xi')$$

No caso da condição inicial fatorizável, ao considerarmos que inicialmente a partícula e o reservatório estão desacoplados, na realidade estamos dizendo que

$$\int dq' \rho_o^S(q', 0, 0) = 1 \quad 3.116$$

Assim, ao fazermos

$$\int \rho(q, 0, t) dq = 1 \quad 3.117$$

temos que (fazendo $\xi = 0$ em 3.96)

$$\rho(q, 0, t) = \int \int dq' d\xi' \rho_o^S(q', \xi', 0) \exp \frac{1}{\hbar} \left[\alpha q' \xi' - N(t) q \xi' \right] *$$

$$* \exp \frac{-1}{\hbar} \left[\overline{C}(t) \xi'^2 \right] G(t) \quad 3.118$$

onde agora $\alpha = K(t) + M\gamma$

Como antes, podemos obter trivialmente de 3.118 que

$$G(t) = N(t) / 2 \pi \hbar \quad 3.119$$

Finalmente, uma vez que obtivemos a expressão final para o operador densidade reduzido da partícula, podemos calcular o valor médio de qualquer observável.

No próximo capítulo analisaremos os valores médios e os valores quadráticos médios da posição e do momentum para o oscilador harmônico dissipativo com a condição inicial não fatorizável e compararemos nossos resultados com os disponíveis na literatura.

IV. VALORES MEDIOS

Neste capítulo escreveremos os valores médios e os valores quadráticos médios da posição e do momentum para um instante t genérico. Serão analisados os casos de partícula sujeita a um potencial harmônico e partícula livre, ambos considerando-se as diferentes condições iniciais (fatorizável e não fatorizável).

A) OSCILADOR HARMÔNICO

Do apêndice 9 temos que

$$\langle q \rangle_t = \frac{1}{N(t)} \left\{ \left[K(t) + M\gamma - E(t)/\lambda \right] \langle q' \rangle_0 + \langle p \rangle_0 \right\} \quad 4.1$$

$$\begin{aligned} \langle q^2 \rangle_t = & \frac{\alpha}{N(t)^2} \langle q'p + p q' \rangle_0 + \frac{2 \hbar \Delta}{N(t)^2} + \frac{1}{N(t)^2} \langle p^2 \rangle_0 + \\ & + \frac{\alpha^2}{N(t)^2} \langle q' \rangle_0^2 \end{aligned} \quad 4.2$$

Escrevendo a equação de movimento clássica para um oscilador harmônico dissipativo temos:

$$M \ddot{q} + 2 M \gamma \dot{q} + M \omega_0^2 q = 0 \quad 4.3$$

onde $\gamma = \eta / 2 M$.

Passaremos agora ao cálculo de $q(t)$, admitindo as seguintes condições iniciais:

$$q(0) = q_0 \quad \text{e} \quad \dot{q}(0) = p_0 / M \quad 4.4$$

Supondo uma solução do tipo $q(t) = e^{\mu t}$ e substituindo esta expressão na equação 4.3 encontramos que

$$\mu = -\gamma \pm i\nu \quad 4.5$$

onde ν é dado pelas equações 3.75 3.76 e 3.77. Temos então que

$$q(t) = A e^{i\nu t} e^{-\gamma t} + B e^{-i\nu t} e^{-\gamma t} \quad 4.6$$

Usando as condições iniciais encontramos A e B e chegamos à seguinte expressão:

$$q(t) = q_0 \cos \nu t e^{-\gamma t} + \left[q_0 \gamma / \nu \right] \sin \nu t e^{-\gamma t} + \left[p_0 / M \nu \right] \sin \nu t e^{-\gamma t} \quad 4.7$$

Mas substituindo os valores de $K(t)$ e $N(t)$ na equação 4.1 temos:

$$\langle q \rangle_t = \frac{\text{sen } \nu t e^{-\gamma t}}{M \nu} \left\{ \langle p \rangle_0 + \left[M \gamma + M \nu \cotg \nu t - \frac{E(t)}{\lambda N(t)} \right] \langle q' \rangle_0 \right\}$$

4.8

Como podemos notar, nós recuperamos a função clássica a menos do termo forçante:

$$- \frac{E(t) \text{sen } \nu t e^{-\gamma t}}{\lambda N(t) M \nu} \langle q' \rangle_0$$

A primeira vista este termo parece errado, mas ele pode ser entendido como uma influência da preparação do sistema em $t = 0$ no subsequente movimento do mesmo. Na verdade, pode-se interpretá-lo como uma peculiaridade do modelo empregado para descrever o reservatório. Voltaremos a este ponto no próximo capítulo.

Além disso, do apêndice 10 temos que

$$\langle p \rangle_t = \left\{ \frac{\alpha \left[\frac{K(t) - M\gamma}{N(t)} \right] - \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right]}{N(t)} \right\} \langle q' \rangle_0 +$$

$$+ \frac{\left[\frac{K(t) - M\gamma}{N(t)} \right]}{N(t)} \langle p \rangle_0 \quad 4.9$$

$$\langle p^2 \rangle_t = 2 \hbar \left[A(t) - \frac{D(t)^2}{2 \lambda} \right] + \frac{2 \hbar}{N(t)} \left[K(t) - M\gamma \right] \left[B(t) - \frac{D(t) E(t)}{\lambda} \right] +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2 \hbar \Delta}{N(t)^2} \left[K(t) - M\gamma \right]^2 + \left\{ \frac{\alpha^2}{N(t)^2} \left[K(t) - M\gamma \right]^2 + \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right]^2 \right. \\
& - \frac{2 \alpha}{N(t)} \left[K(t) - M\gamma \right] \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] \left. \right\} \langle q'^2 \rangle_0 + \left[\frac{K(t) - M\gamma}{N(t)} \right]^2 \langle p'^2 \rangle_0 \\
& + \left\{ \frac{\alpha}{N(t)^2} \left[K(t) - M\gamma \right]^2 - \left[\frac{K(t) - M\gamma}{N(t)} \right] \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] \right\} \langle q'p + p'q \rangle_0
\end{aligned}$$

4.10

Derivando a função posição (equação 4.7) obtemos a equação clássica para o momento:

$$p(t) = \frac{-M q_0 e^{-\gamma t} \text{sen } \nu t}{\nu} \left[\nu^2 + \gamma^2 \right] + \frac{p_0 e^{-\gamma t}}{\nu} \left[\nu \cos \nu t - \gamma \text{sen } \nu t \right]$$

4.11

Da equação 4.9 temos, ao substituírmos os valores de $K(t)$, $N(t)$ e $L(t)$:

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle_t = & \left\{ \frac{-M e^{-\gamma t} \text{sen } \nu t}{\nu} \left[\nu^2 + \gamma^2 \right] + \frac{E(t) e^{-\gamma t}}{\lambda} \left[\gamma \text{sen } \nu t - \cos \nu t \right] - \right. \\
& \left. \frac{D(t)}{\lambda} \right\} \langle q' \rangle_0 + \frac{p_0 e^{-\gamma t}}{\nu} \left[\nu \cos \nu t - \gamma \text{sen } \nu t \right]
\end{aligned}$$

4.12

Novamente, temos o termo forçante:

$$\left\{ \frac{E(t) e^{-\gamma t}}{\lambda} \left[\gamma \operatorname{sen} \nu t - \cos \nu t \right] - \frac{D(t)}{\lambda} \right\} \langle q' \rangle_0 \quad 4.13$$

que é um traço da influência do processo de preparação na dinâmica da partícula Browniana.

No caso da condição inicial fatorizável as funções $D(t)$ e $E(t)$ simplesmente não existem e conseqüentemente $\langle q \rangle_t$ e $\langle p \rangle_t$ obviamente coincidem com seus equivalentes clássicos.

B) PARTICULA LIVRE

Tomando o limite de $\omega_0 = 0$, $\lambda \rightarrow \infty$ e $\nu = i\gamma$ nas equações 4.1, 4.2, 4.9 e 4.10 obtemos que:

$$\alpha = K(t) + M \gamma - \frac{M U E(t)}{\kappa} = M \nu \operatorname{cotg} \nu t + M \gamma =$$

$$= M \gamma \left[\operatorname{cotgh} \gamma t + 1 \right] = M \gamma \frac{e^{\gamma t}}{\operatorname{senh} \gamma t} =$$

$$\alpha = M \gamma e^{\gamma t} / \operatorname{senh} \gamma t = N(t) \quad 4.14$$

Neste caso,

$$\langle q \rangle_t = \frac{\sinh \gamma t}{M \gamma e^{\gamma t}} \langle p \rangle_0 + \langle q' \rangle_0 \quad 4.15$$

Podemos verificar que este é exatamente o resultado obtido por Hakim e Ambegaokar, pois esta expressão é idêntica à 67.a da referência 7. É preciso salientar que aqui γ é definido de como: $\gamma = \eta / 2 M$, enquanto que na referência 7 temos $\gamma = \eta / M$.

Quanto ao valor de $\langle q^2 \rangle$, no limite de partícula livre temos:

$$\alpha = N(t) = M \gamma e^{\gamma t} / \sinh \gamma t \quad e \quad \Delta = C(t) \quad 4.16$$

Assim,

$$\begin{aligned} \langle q^2 \rangle_t = \langle q'^2 \rangle_0 + \frac{\sinh^2 \gamma t}{M^2 \gamma^2 e^{2\gamma t}} \langle p^2 \rangle_0 + \frac{\sinh \gamma t}{M \gamma e^{\gamma t}} \langle q'p + p q' \rangle_0 + \\ + \frac{2 \hbar C(t)}{N(t)^2} \end{aligned} \quad 4.17$$

Novamente, esta equação é idêntica à equação 67.b da referência 7, pois

$$\hbar g(t) = C(t) \quad \text{para } \xi = 0$$

onde

$$g(t) = \frac{S_2 - \xi'^2 F(t)}{\xi'^2} \quad e$$

$$F(t) = \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{\Omega} \frac{d\omega \omega \operatorname{coth}(\omega U/2)}{\omega^2 + \eta^2/M^2} \quad 4.18$$

conforme definição da referência 7.

Quanto ao valor médio do momentum, lembramos que no caso da partícula livre, além da expressão 4.14 temos ainda que:

$$L(t) = K(t) - M \gamma \quad 4.19$$

$$L(t) / N(t) = e^{-2\gamma t} \quad 4.20$$

Assim, teremos:

$$\langle p \rangle_t = e^{-2\gamma t} \langle p \rangle_o \quad 4.21$$

Esta expressão é idêntica à expressão 75 da referência

Além disso,

$$\langle p^2 \rangle_t = 2 \hbar \left[A(t) + e^{-2\gamma t} B(t) + e^{-4\gamma t} C(t) \right] + e^{-4\gamma t} \langle p^2 \rangle_o$$

4.22

Novamente, temos uma expressão idêntica à equação 76b da referência 7, pois

$$2 \hbar \left[A(t) + e^{-2\gamma t} B(t) + e^{-4\gamma t} C(t) \right] =$$

$$4 M \gamma k_B T \int_{-\Omega}^{\Omega} d\omega \frac{(\omega U/2) \operatorname{coth}(\omega U/2)}{2 \pi (\omega^2 + 4 \gamma^2)} (1 - e^{-4\gamma t})$$

4.23

Aqui, o limite clássico é perfeito, pois os termos forçantes que apareciam no caso do oscilador harmônico contém todos a grandeza λ no denominador e portanto vão se anular.

No limite clássico, $\langle p^2 \rangle$ para ambas as condições iniciais se reduz a

$$\langle p^2 \rangle_t = e^{-4\gamma t} \langle p^2 \rangle_0 + M k_B T (1 - e^{-4\gamma t}) \quad 4.24$$

ou seja, a solução dada pelo teorema de equipartição da energia:

$$\langle p^2 \rangle = M k_B T \quad 4.25$$

é a solução estacionária e também a solução para tempos longos.

Além disso, comparando os resultados para as duas condições iniciais, notamos que apenas $\langle q^2 \rangle_t$ e $\langle p^2 \rangle_t$ diferem.

É interessante compararmos também nossos resultados com o caso de uma partícula não interagindo:

$$\langle q \rangle_t = \frac{t}{M} \langle p \rangle_0 + \langle q' \rangle_0 \quad 4.26$$

$$\langle q^2 \rangle_t = \langle q'^2 \rangle_0 + \frac{t^2}{M^2} \langle p^2 \rangle_0 + \frac{t}{M} \langle q'p + p q' \rangle_0 \quad 4.27$$

Comparando 4.15 com 4.26 vemos que o meio tem dois efeitos: o tempo t em 4.26 será substituído por uma função $e^{-\gamma t} \sinh \gamma t$, ou seja, o alargamento do pacote de onda após um tempo da ordem do tempo de relaxação γ^{-1} se dará de forma mais lenta. Além disso, a difusão domina para tempos maiores que γ^{-1} . A dependência linear no tempo descreve a difusão clássica e 4.17 mostra que o coeficiente obedece a relação de Einstein entre difusividade e viscosidade.

V. CONCLUSÕES

Há dois pontos importantes que gostaríamos de enfatizar neste capítulo. O primeiro é a discussão sobre as vantagens em se utilizar a condição inicial não fatorizável e o segundo é o problema do longo tempo de decaimento da preparação inicial que surge quando a condição inicial generalizada é usada.

Usando a condição inicial não fatorizável nós mostramos explicitamente que o termo espúrio negligenciado por Caldeira e Leggett desaparece naturalmente (veja argumento abaixo de 3.66). Em [1] este termo foi negligenciado e a razão pela qual isto foi feito não é correta. Na realidade, pode-se argumentar que termos como \bar{f}_0 (equação 3.19) devem ser negligenciados, mas raciocinando de uma outra maneira. Uma vez que ele envolve integrais de uma função delta e nós estamos interessados em escalas de tempo muito maiores do que Ω^{-1} , nós deveríamos interpretar estas integrais de $t' = 0^+$ até $t' = t$. Desta maneira tais termos poderiam ser abandonados mesmo no caso da condição inicial fatorizável. Se mantivermos este termo, a condição de contorno

$$\lim_{t \rightarrow 0} J(x, y, t; x', y', 0) = \delta(x - x') \delta(y - y') \quad 6.1$$

irá divergir.

Outra vantagem de trabalhar com o estado inicial generalizado é que, na dinâmica da partícula Browniana, os termos decaindo lentamente não mais dependerão da frequência de corte Ω . Um exemplo disto é a dependência no tempo da largura do pacote de

onda de uma partícula livre dissipativa.

Quando nós usamos a condição inicial fatorizável, o comportamento para tempos longos de $\langle q^2 \rangle_t$ é dado por: (em $T = 0$)

$$\langle q^2 \rangle_t \sim \ln \sqrt{\frac{\gamma \Omega}{2}} t \quad 6.2$$

enquanto que pode ser mostrado que para o caso não fatorizável $\langle q^2 \rangle_t$ se comporta como:

$$\langle q^2 \rangle_t \sim \ln \gamma t \quad 6.3$$

Entretanto, há uma coisa que preocupa o leitor quando a generalização de FV é aplicada, ou seja, a presença dos termos que fazem $\langle q \rangle_t$ e $\langle p \rangle_t$ se desviarem de seus equivalentes clássicos. Nossa intenção é mostrar que estes termos são esperados mesmo no limite clássico se consideramos um modelo cuja Lagrangeana é dada por 2.3.

Da seção A do capítulo 2 temos que a equação de movimento clássica de uma partícula Browniana é dada pela equação de Langevin, com $F(t)$ descrito pela equação 2.23, ou seja,

$$M \ddot{q} + \eta \dot{q} + V_0'(q) = - \sum_k C_k q_k^0 \cos(\omega_k t) - \sum_k \frac{C_k}{\omega_k} \dot{q}_k^0 \sin(\omega_k t) \quad 6.4$$

Se nós considerarmos que $\langle \dot{q}_k^0 \rangle = \langle q_k^0 \rangle = 0$ é óbvio que $\langle F(t) \rangle = 0$. Entretanto, ao assumirmos que o reservatório está em equilíbrio térmico com a partícula na posição q_0 , o fato que $\langle F(t) \rangle = 0$ deixa de ser verdadeiro. Isto é devido à forma da

equação 2.3, que pode ser reescrita como:

$$L = \frac{1}{2} M \dot{q}^2 - V_0(q) - \sum_k \frac{1}{2} \tilde{m}_k \omega_k^2 (\tilde{q}_k - q)^2 + \sum_k \frac{1}{2} \tilde{m}_k \dot{\tilde{q}}_k^2$$

6.5

onde

$$\tilde{q}_k = \frac{m_k \omega_k^2}{C_k} q_k \quad \text{e} \quad \tilde{m}_k = \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^4}$$

Então esta é a Lagrangeana de um conjunto de osciladores com suas posições de equilíbrio centradas na posição q da partícula sujeita a um potencial $V_0(q)$. Consequentemente, $\langle F(t) \rangle \propto \langle \dot{q}_k^0 \rangle = \dot{q}_0$ agora é finito. Este é um termo forçante para 6.4 e ele vai gerar outra contribuição para a evolução temporal de $q(t)$. Como podemos facilmente ver, ambos $\langle q \rangle_t$ e $\langle p \rangle_t$ dados por 4.1 e 4.9, respectivamente, tem contribuições extras dependendo de $\langle \dot{q} \rangle_0$.

É importante salientar que estes termos não aparecem no caso de uma partícula livre dissipativa ($V_0 = 0$). Neste caso o sistema é invariante translacional e não há origem preferencial para a posição $q(t)$. A condição inicial é sempre expressa em termos de $\langle \dot{q}_k^0 \rangle$, o que implica que $\langle F(t) \rangle = 0$.

Visando contornar este problema é necessário modificar nosso modelo 2.3 de tal maneira que a partícula sinta seu reservatório apenas localmente. No nosso modelo a partícula interage com o mesmo conjunto de osciladores, independentemente da posição em que ela esteja. Entretanto, há modelos mais realistas

para o reservatório onde este caráter local é considerado.

Desta forma, é mais vantajoso trabalhar com a condição inicial fatorizável, uma vez que ela consiste em considerar o banho em equilíbrio térmico sem olhar a posição da partícula em $t = 0$. Consequentemente, $\langle F(t) \rangle = 0$.

Note que esta análise qualitativa apenas se aplica no limite clássico. Para um estudo rigoroso deste efeito, devemos analisar cuidadosamente as equações 4.1 e 4.9 no limite de altas e de baixas temperaturas.

Finalmente, nós gostaríamos de enfatizar que o fato de estarmos trabalhando com a condição inicial generalizada implica que para cada problema há um propagador $J(x, y, t; x', y', 0)$ completamente novo a ser resolvido. No caso da condição inicial fatorizável a única modificação que ocorre de um problema para outro é o potencial externo $V_0(q)$.

Concluindo, verificamos que ao admitirmos que inicialmente a partícula e o reservatório estão em equilíbrio e não desacoplados, obtemos algumas correções às expressões encontradas por Caldeira e Leggett com a condição inicial fatorizável. No limite em que consideramos o potencial $V_0 = 0$ (partícula livre) os nossos resultados são compatíveis com aqueles obtidos por Hakim e Ambegaokar e além disso o limite clássico dos nossos resultados é coerente. Apesar de algumas deficiências do modelo, notamos que fomos capazes de generalizar o modelo proposto por Caldeira e Leggett e também o modelo proposto por Hakim e Ambegaokar e embora nós tenhamos tratado um modelo exatamente solúvel, nós acreditamos que as técnicas aqui usadas possam ser aplicadas para modelos mais complexos dentro das aproximações convenientes.

Neste apêndice vamos mostrar que a equação

$$\rho_0(x',\vec{R}',y',\vec{Q}') = \tilde{\rho}_0(x',y') \rho_{0,q}(x',y';\vec{R}',\vec{Q}') \quad A1.1$$

pode ser interpretada como o resultado de uma medida da posição da partícula de interesse quando inicialmente esta mesma partícula e o reservatório a ela acoplado estão em equilíbrio térmico.

Vamos inicialmente considerar um estado puro $|\psi\rangle$ do sistema total, i.e., partícula de interesse mais reservatório. Então,

$$|\psi\rangle = \int dx d\vec{R} \psi(x,\vec{R}) |x\rangle \otimes |\vec{R}\rangle \quad A1.2$$

onde $|\vec{R}\rangle = |q_1\rangle \otimes |q_2\rangle \otimes \dots \otimes |q_N\rangle$. Uma medida da posição da partícula pode ser efetuada aplicando-se o operador \mathbb{P} definido como:

$$\mathbb{P} = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) |x\rangle \langle x| \otimes \mathbb{I}(\vec{R}) \quad A1.3$$

onde $f(x)$ é uma função arbitrária e $\mathbb{I}(\vec{R})$ é o operador identidade no subespaço do reservatório. Vamos chamar \mathbb{P} um operador de medida. Quando estamos nos referindo a uma medida ideal, \mathbb{P} é um

operador de projeção ($P^2 = P$). Neste caso, para uma medida da posição em x_0 com incerteza Δx , $f(x)$ é

$$f(x) = \theta(x - x_0 + \Delta x/2) - \theta(x_0 + \Delta x/2 - x) \quad A1.4$$

onde θ é a função Heavyside. O estado depois da medida será então:

$$|\psi_0\rangle = \frac{P|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P|\psi\rangle}} \quad A1.5$$

No caso de medida não ideal, $f(x)$ pode assumir qualquer forma geral que seja centrada em x_0 com largura Δx , por exemplo, uma gaussiana. A diferença agora é que P não é mais um operador de projeção. Então, A1.5 deve ser modificada para

$$|\psi_0\rangle = \frac{P|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P^2|\psi\rangle}} \quad A1.6$$

Uma vez que esta forma é mais geral do que A1.5, a partir de agora nós trabalharemos com ela.

Tudo o que temos dito pode ser generalizado para o caso em que o sistema total não é mais um estado puro, mas uma mistura estatística. Vamos considerar o sistema total inicialmente em equilíbrio térmico. Então,

$$\rho = \sum_{n \langle n_i \rangle} e^{-\beta E_{n \langle n_i \rangle}} |\psi_{n \langle n_i \rangle} \rangle \langle \psi_{n \langle n_i \rangle} | \quad A1.7$$

onde $\langle n_i \rangle$ representa o conjunto de N números quânticos $\langle n_1, n_2, \dots, n_N \rangle$ dos osciladores do reservatório e $|\psi_{n \langle n_i \rangle} \rangle$ é um autoestado do sistema composto. Podemos portanto reescrever A1.7:

$$\rho = \sum_{n \langle n_i \rangle} e^{-\beta E_{n \langle n_i \rangle}} \int \int \int \int dx \, dx' d\vec{R} \, d\vec{R}' \psi_{n \langle n_i \rangle}(x, \vec{R}) \psi_{n \langle n_i \rangle}^*(x', \vec{R}') |x\rangle \langle x'| \otimes |\vec{R}\rangle \langle \vec{R}'| \quad A1.8$$

Agora, imediatamente depois da medida o operador densidade do sistema total pode ser escrito como:

$$\rho_0 = \frac{P \rho P}{\text{tr } P^2 \rho} \quad A1.9$$

que é uma generalização de A1.6 para o caso de misturas. Usando então A1.3 para P temos

$$\rho_0 = \left\{ \sum_{n \langle n_i \rangle} e^{-\beta E_{n \langle n_i \rangle}} \int \int \int \int dx \, dx' d\vec{R} \, d\vec{R}' f(x) f(x') \psi_{n \langle n_i \rangle}(x, \vec{R}) \psi_{n \langle n_i \rangle}^*(x', \vec{R}') \right\}$$

$$\left. \left\{ \psi_{n(n)_i}^*(x', \vec{R}') |x\rangle \langle x'| \otimes |\vec{R}'\rangle \langle \vec{R}'| \right\} / \left\{ \sum_{n(n)_i} e^{-\beta E_{n(n)_i}} \right\} \right\} \\
 \left. \left\{ \int \int dx d\vec{R} f(x)^2 | \psi_{n(n)_i}(x, \vec{R}) |^2 \right\} \right\} \quad \text{A1.10}$$

o que finalmente implica que

$$\rho_0(x', \vec{R}'; y', \vec{Q}') = \frac{f(x') f(y') \rho_{\bullet q}(x', \vec{R}'; y', \vec{Q}')}{\int dx d\vec{R} f(x)^2 \rho_{\bullet q}(x, \vec{R}; x, \vec{R})} \quad \text{A1.11}$$

Finalmente, a comparação de A1.11 com A1.1 permite-nos identificar

$$\tilde{\rho}(x', y') = \frac{f(x') f(y')}{\int dx d\vec{R} f(x)^2 \rho_{\bullet q}(x, \vec{R}; x, \vec{R})} \quad \text{A1.12}$$

com o operador densidade reduzido do sistema de interesse $\tilde{\rho}(x', y')$ que depende do procedimento de medida (ou preparação).

Resta ainda mencionar que $f(x)$ poderia ser o resultado de uma sucessão de medidas. Esta função poderia representar, por exemplo, o resultado de uma medida de posição com incerteza Δx e uma medida posterior de momentum com incerteza Δp . Neste caso, $f(x)$ é uma função complexa (por exemplo, uma gaussiana de largura Δx centrada em x_0 multiplicada por uma onda plana com vetor de onda p_0 / \hbar).

Cálculo do funcional de influência F [x,y,z]

Conforme referência 6, temos que a integral funcional para tempo real é dada por:

$$\int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D\vec{R}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ S_I[x, \vec{R}] + S_R[\vec{R}] \right\} = \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D\vec{R}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \int_0^t dt' * \right.$$

$$* \left[\frac{m_k \dot{R}_k^2}{2} - \frac{m_k \omega_k^2 R_k^2}{2} - C_k x R_k \right] \left. \right\} =$$

$$= \prod_k \sqrt{\frac{m_k \omega_k}{2\pi i \hbar \text{sen } \omega_k t}} \exp \frac{i m_k \omega_k}{2 \hbar \text{sen } \omega_k t} \left\{ \cos \omega_k t (\vec{R}^2 + \vec{R}'^2) - \right.$$

$$- 2 \vec{R} \cdot \vec{R}' - \frac{2 \vec{R}}{m_k \omega_k} \int_0^t dt' C_k x(t') \text{sen } \omega_k t' - \frac{2 \vec{R}'}{m_k \omega_k} \int_0^t dt' C_k x(t') *$$

$$* \text{sen } \omega_k (t-t') - \frac{2}{m_k \omega_k^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' C_k^2 x(t') x(t'') \text{sen } \omega_k t'' *$$

$$* \text{sen } \omega_k (t-t') \left. \right\} \tag{A2.1}$$

Além disso, temos também que a integral funcional Euclideana se escreve:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\tilde{Q}'}^{\tilde{R}'} D\tilde{R}'(u) \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \int_0^{\hbar\beta} du \sum \left[\frac{m_k \dot{R}'_k{}^2}{2} + \frac{m_k \omega_k^2 R'_k{}^2}{2} + C_k z R'_k \right] \right\} = \\
 & = \sqrt{\frac{m_k \omega_k}{2\pi\hbar \sinh \beta\hbar\omega_k}} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{-1}{4 m_k \omega_k} \int_0^{\hbar\beta} du \int_0^{\hbar\beta} du' C_k^2 z(u) * \right. \\
 & \quad * z(u') \exp \left[-\omega_k |u - u'| \right] + \frac{m_k \omega_k}{2 \sinh \beta\hbar\omega_k} \left[-2 \tilde{R}' \tilde{Q}' + \right. \\
 & \quad + (\tilde{Q}'^2 + \tilde{R}'^2) \cosh \beta\hbar\omega_k + 2A (\tilde{Q}' e^{\beta\hbar\omega_k} - \tilde{R}') + 2B (\tilde{R}' e^{\beta\hbar\omega_k} - \tilde{Q}') + \\
 & \quad \left. \left. + (A^2 + B^2) e^{\beta\hbar\omega_k} - 2AB \right] \right\} \tag{A2.2}
 \end{aligned}$$

onde
$$A = \frac{C_k}{2 m_k \omega_k} \int_0^{\hbar\beta} e^{-\omega_k u} z(u) du \tag{A2.3}$$

$$B = \frac{C_k}{2 m_k \omega_k} \int_0^{\hbar\beta} e^{-\omega_k (\hbar\beta - u)} z(u) du \tag{A2.4}$$

Substituindo estes resultados na equação 2.52, definindo

$U = \hbar\beta$, $D = \frac{m_k \omega_k}{2 \hbar}$ e efetuando as mudanças de variáveis:

$$\dot{R}' - \dot{Q}' = \zeta \quad \dot{R}' + \dot{Q}' = 2 \chi \quad \text{obtemos:}$$

$$F(x,y,z) = \int \int \int d\vec{R} \, d\chi \, d\zeta \prod_k \left(\frac{D}{\pi \operatorname{sen} \omega_k t} \right) \left(\frac{D}{\pi \operatorname{senh} \omega_k U} \right)^{1/2} *$$

$$* \exp \left\{ \frac{i D}{\operatorname{sen} \omega_k t} \left[2 \chi \zeta \cos \omega_k t - 2 \vec{R} \zeta - \frac{2 \vec{R} C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t \operatorname{sen} \omega_k t' dt' \right] \right.$$

$$* \left[x(t') - y(t') \right] dt' - \frac{(2\chi + \zeta) C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t x(t') \operatorname{sen} \omega_k (t-t') dt' +$$

$$+ \frac{(2\chi - \zeta) C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t y(t') \operatorname{sen} \omega_k (t-t') dt' - \frac{2 C_k^2}{m_k^2 \omega_k^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' *$$

$$* \left[x(t') x(t'') - y(t') y(t'') \right] \operatorname{sen} \omega_k t'' \operatorname{sen} \omega_k (t-t') \Bigg] +$$

$$+ \frac{C_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} \int_0^U du \int_0^U du' e^{-\omega_k |u-u'|} z(u) z(u') - \frac{D}{\operatorname{senh} \omega_k U} \left[\frac{\zeta^2}{2} -$$

$$- 2 \chi^2 + 2\chi^2 \cosh \omega_k U + \frac{\zeta^2}{2} \cosh \omega_k U + 2A \left[\chi e^{\omega_k U} - \frac{\zeta}{2} e^{\omega_k U} - \chi \dots \right]$$

$$-\frac{\zeta}{2} \Big) + 2B \left[\chi e^{\omega_k U} + \frac{\zeta}{2} e^{\omega_k U} - \chi + \frac{\zeta}{2} \right] + (A^2 + B^2) e^{\omega_k U} - 2AB \Big] \Bigg)$$

A2.5

Olhando para a equação A2.5, vemos que a integração em \vec{R} pode ser trivialmente efetuada:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{R} \exp -i\vec{R} \cdot \left[\frac{2 D \zeta}{\text{sen } \omega_k t} + \frac{2 D C_k}{m_k \omega_k \text{sen } \omega_k t} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \text{sen } \omega_k t' \right] \\ &= 2 \pi \delta \left(\frac{2 D \zeta}{\text{sen } \omega_k t} + \frac{2 D C_k}{m_k \omega_k \text{sen } \omega_k t} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \text{sen } \omega_k t' \right) = \\ &= \frac{2 \pi \text{sen } \omega_k t}{2 D} \delta \left(\zeta + \frac{C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \text{sen } \omega_k t' \right) \end{aligned}$$

A2.6

Este resultado torna elementar a integração em t . A última integração em χ também é simples, uma vez que a função a ser integrada é uma gaussiana. Então, após reagruparmos alguns termos, obtemos a seguinte expressão para $F(x,y,z)$:

$$F(x,y,z) = F(x,y) \prod_k \frac{1}{2} \text{cosech} \left(\frac{\omega_k U}{2} \right) \exp \left\{ \frac{C_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} \int_0^U du \dots \right\}$$

$$* \int_0^U du' \frac{\cosh \omega_k (|u - u'| - U/2)}{\sinh \omega_k U/2} z(u) z(u') + \frac{C_k^2}{2 \hbar m_k \omega_k}$$

$$* \int_0^t dt' \int_0^U du z(u) [x(t') - y(t')] \left\{ \left[\cotgh \omega_k U/2 \sinh \omega_k u \sin \omega_k t' - \cosh \omega_k u \sin \omega_k t' \right] + i \left[\cotgh \omega_k U/2 \cosh \omega_k u \cos \omega_k t' - \cos \omega_k t' \right] \right. \\ \left. \sinh \omega_k u \right\} \quad A2.7$$

onde

$$F[x,y] = \prod_k \exp \left\{ \frac{-C_k^2 \cotgh \omega_k U/2}{2 \hbar m_k \omega_k} \int_0^t dt' \int_0^U dt'' [x(t') - y(t'')] \right.$$

$$* [x(t') - y(t'')] \cos \omega_k (t' - t'') + \frac{i C_k^2}{2 \hbar m_k \omega_k} \int_0^t dt' \int_0^U dt'' *$$

$$\left. * [x(t') - y(t'')] [x(t'') + y(t'')] \sin \omega_k (t' - t'') \right\}$$

A2.8

Vamos provar que:

$$\begin{aligned} & \frac{c_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} \int_0^U du' \int_0^U du \left[\frac{z(u)^2 + z(u')^2}{2} \right] \frac{\cosh \omega_k (|u - u'| - U/2)}{\sinh \omega_k U/2} = \\ & = \frac{c_k^2}{2 \hbar m_k \omega_k^2} \int_0^U du z(u)^2 \end{aligned} \quad A3.1$$

Para isto, usamos a referência 8 para escrever:

$$\begin{aligned} & \frac{c_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} \int_0^U du' \int_0^U du \left[\frac{z(u)^2 + z(u')^2}{2} \right] \frac{\cosh \omega_k (|u - u'| - U/2)}{\sinh \omega_k U/2} = \\ & = \frac{c_k^2}{8 \hbar m_k \omega_k} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} du' \int_0^U e^{-\omega_k |u - u'|} z(u)^2 du + \right. \\ & \quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} du \int_0^U e^{-\omega_k |u - u'|} z(u')^2 du' \right\} \end{aligned} \quad A3.2$$

Definindo $x = u' - u$ no primeiro termo e $x = u - u'$ no segundo termo obtemos:

$$\frac{C_k^2}{8 \hbar m_k \omega_k} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^U e^{-\omega_k |x|} z(u)^2 du + \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^U e^{-\omega_k |x|} z(u')^2 du' \right\}$$

A3.3

ou seja, os dois termos são iguais. Novamente fazendo $x = u' - u$ temos:

$$\frac{C_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} du' \int_0^U e^{-\omega_k |u - u'|} z(u)^2 du \right\} =$$

$$= \frac{C_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} \left\{ \int_0^U du \int_{-\infty}^u du' e^{-\omega_k (u - u')} z(u)^2 + \right.$$

$$\left. + \int_0^U du \int_u^{\infty} du' e^{-\omega_k (u' - u)} z(u)^2 \right\} =$$

$$= \frac{C_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} \left\{ \int_0^U du e^{-\omega_k u} z(u)^2 \frac{e^{\omega_k u'}}{\omega_k} \Big|_{-\infty}^u + \right.$$

$$\left. + \int_0^U du e^{+\omega_k u} z(u)^2 \frac{e^{-\omega_k u'}}{-\omega_k} \Big|_u^{\infty} \right\}$$

$$= \frac{C_k^2}{4 \hbar m_k \omega_k} 2 \left\{ \int_0^U du \frac{z(u)^2}{\omega_k} \right\} = \frac{C_k^2}{2 \hbar m_k \omega_k^2} \int_0^U du z(u)^2$$

A3.4

APÊNDICE 4

Da expansão em séries de Fourier temos que:

$$\bar{z}(u) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{z}_n e^{-i\omega_n u} \qquad \bar{f}(u) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{f}_n e^{-i\omega_n u}$$

A4.1

Deste modo, o coeficiente \bar{f}_n da expansão se escreve:

$$\bar{f}_n = \frac{1}{U} \int_{-U/2}^{U/2} du \bar{f}(u) e^{i\omega_n u} = \frac{-\eta}{U \pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] e^{i\omega u}$$

$$\text{* cossech } (\omega U/2) \int_{-U/2}^{U/2} du e^{i\omega_n u} \left\{ 1 \cos \omega t' \cosh \omega u + \text{sen } \omega t' \text{senh } \omega u \right\}$$

A4.2

Mas

$$\int_{-U/2}^{U/2} du e^{i\omega_n u} \cosh \omega u = \frac{2 \omega (-1)^n \text{senh } (\omega U/2)}{(\omega^2 + \omega_n^2)}$$

$$\int_{-U/2}^{U/2} du e^{i\omega_n u} \text{senh } \omega u = \frac{-2i \omega_n (-1)^n \text{senh } (\omega U/2)}{(\omega^2 + \omega_n^2)}$$

Assim,

$$\bar{f}_n = \frac{-\eta}{U \pi} \int_0^{\Omega} d\omega \omega \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \frac{2 (-1)^n}{(\omega^2 + \omega_n^2)} *$$

$$* \left\{ i \omega \cos \omega t' - i \omega_n \text{sen } \omega t' \right\} \quad A4.3$$

Podemos agora efetuar a integral em ω . Integrando por partes temos:

$$\int_0^{\Omega} d\omega \frac{\omega^2 \cos \omega t'}{(\omega^2 + \omega_n^2)} = \frac{\omega^2}{(\omega^2 + \omega_n^2)} \frac{\text{sen } \omega t'}{t'} \Bigg|_0^{\Omega} - \int_0^{\Omega} d\omega \frac{\text{sen } \omega t'}{t'} *$$

$$* \frac{d}{d\omega} \left[\frac{\omega^2}{(\omega^2 + \omega_n^2)} \right]$$

Entretanto, sempre estamos considerando o comportamento do sistema em tempos longos, i.e. no limite em que $\Omega \rightarrow \infty$. Neste caso temos que o primeiro termo se escreve:

$$\lim_{\Omega \rightarrow \infty} \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + \omega_n^2} \frac{\text{sen } \Omega t'}{t'} = \Pi \delta(t')$$

Deste modo, temos que

$$\int_0^{\infty} d\omega \frac{\omega^2 \cos \omega t'}{(\omega^2 + \omega_n^2)} = \frac{-\pi |\omega_n| e^{-|\omega_n| t'}}{2} + \pi \delta(t') \quad A4.4$$

Além disso, temos que

$$\int_0^{\infty} d\omega \frac{\omega \operatorname{sen} \omega t'}{(\omega^2 + \omega_n^2)} = \frac{-d}{dt'} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\cos \omega t'}{(\omega^2 + \omega_n^2)} = \frac{-d}{dt'} \left[\frac{\pi e^{-|\omega_n| t'}}{2 |\omega_n|} \right]$$

ou seja,

$$\int_0^{\infty} d\omega \frac{\omega \operatorname{sen} \omega t'}{(\omega^2 + \omega_n^2)} = \frac{\pi e^{-|\omega_n| t'}}{2} \quad A4.5$$

Finalmente, substituindo A4.4 e A4.5 em A4.3 temos:

$$\bar{f}_n = \frac{-2 \cdot 1 \cdot \eta \cdot (-1)^n}{U \pi} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] *$$

$$* \left\{ \frac{-\pi |\omega_n| e^{-|\omega_n| t'}}{2} - \frac{\pi \omega_n e^{-|\omega_n| t'}}{2} + \pi \delta(t') \right\} \quad A4.6$$

Calculando agora o valor de \bar{f}_n para $n = 0$ temos:

$$\begin{aligned}
\bar{f}_0 &= \frac{-2 i \eta}{U \pi} \int_0^{\Omega} d\omega \cos \omega t' \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] = \\
&= \frac{-2 i \eta}{U} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \frac{1}{\pi} \frac{\text{sen } \Omega t'}{t'} = \\
&= \frac{-2 i \eta}{U} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \delta(t')
\end{aligned}$$

A4.7

no limite em que $\Omega \rightarrow \infty$

Portanto, se $n > 0$, temos que \bar{f}_n se escreve:

$$\bar{f}_n = \frac{2 i \eta (-1)^n}{U} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \omega_n e^{-\omega_n t'} + \bar{f}_0 (-1)^n$$

A4.8

Além disso, se n é negativo $|\omega_n| = -\omega_n$ e

$$\bar{f}_n = \bar{f}_0 (-1)^n.$$

A4.9

Temos que o primeiro termo da Ação Efetiva S_{eff}^1 se escreve:

$$S_{\text{eff}}^1 = \int_{-U/2}^{U/2} du \frac{\eta}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du' \frac{[\bar{z}(u) - \bar{z}(u')]^2}{(u - u')^2} \quad \text{A5.1}$$

Além disso, temos que

$$\bar{z}(u) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_n e^{-i\omega_n u} \quad \text{A5.2}$$

Note que uma vez que $\bar{z}(u) = \bar{z}^R(u) + i\bar{z}^I(u)$ os coeficientes \bar{z}_n podem ser decompostos como:

$$\bar{z}_n = \bar{z}_n^R + i\bar{z}_n^I \quad \text{A5.3}$$

Então, substituindo A5.2 e A5.3 em A5.1 podemos escrever S_{eff}^1 em termos dos coeficientes da expansão:

$$S_{\text{eff}}^1 = \int_{-U/2}^{U/2} du \frac{\eta}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du' \frac{1}{(u - u')^2} \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[(z_n^R + iz_n^I) e^{-i\omega_n u} - \right. \right.$$

$$- \left. \left[z_n^I z_m^R e^{i\omega_n(u-u')} + z_n^I z_m^R e^{i(\omega_n + \omega_m)(u-u')} \right] \right\} \quad \text{A5.5}$$

$$\text{Mas } \int_{-U/2}^{U/2} e^{-i(\omega_n + \omega_m)u} du = \delta(\omega_n + \omega_m)U \quad \text{A5.6}$$

Logo, temos que

$$S_{\text{eff}} = \sum_n \frac{\eta U}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[z_n^R z_{-n}^R - z_n^I z_{-n}^I + i z_n^R z_{-n}^I + i z_n^I z_{-n}^R \right] * \\ * \left[\frac{1 - e^{i\omega_n x} - e^{-i\omega_n x} + 1}{x^2} \right] \quad \text{A5.7}$$

onde fizemos $x = u-u'$. No entanto,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{1 - e^{i\omega_n x} - e^{-i\omega_n x} + 1}{x^2} \right] = \int_{-\infty}^{\infty} dx 2 \frac{(1 - \cos \omega_n x)}{x^2} = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} 2 dy |\omega_n| \frac{\text{sen}^2 y}{y^2} = 2\pi |\omega_n| \quad \text{A5.8}$$

onde

$$\gamma = \omega_n \kappa / 2$$

Além disso,

$$z_n^R z_{-n}^R - z_n^I z_{-n}^I + i z_n^R z_{-n}^I + i z_n^I z_{-n}^R = z_n z_{-n} \quad A5.9$$

Então, finalmente temos que

$$S_{\text{eff}}^i = \sum_n \frac{\eta U}{4\pi} z_n z_{-n} 2\pi |\omega_n| = \frac{M U}{2} \sum_n 2\gamma |\omega_n| z_n z_{-n} \quad A5.10$$

onde $\gamma = \eta / 2M$

Lembrando ainda que uma vez que $\bar{f}(u) = \bar{f}^R(u) + i \bar{f}^I(u)$

os coeficientes \bar{f}_n também podem ser decompostos como

$$\bar{f}_n = \bar{f}_n^R + i \bar{f}_n^I \quad A5.11$$

e procedendo de maneira análoga podemos obter os outros termos da ação efetiva.

Temos que a parte real da ação se escreve

$$\begin{aligned}
 S_{\text{eff}}^R &= \frac{M U}{g} A_0 \left(a_0^R{}^2 - a_0^I{}^2 \right) - U \tilde{f}_0 a_0^I / 2 + \frac{M U}{4} \sum_{n=1}^{\infty} A_n * \\
 * &\left(a_n^R{}^2 + b_n^R{}^2 - a_n^I{}^2 - b_n^I{}^2 \right) + \frac{U}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{f}_n (b_n^R - a_n^I) - \\
 &- \frac{U \tilde{f}_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n (b_n^R + a_n^I)
 \end{aligned} \tag{A6.1}$$

Por outro lado, a parte imaginária se escreve:

$$\begin{aligned}
 S_{\text{eff}}^I &= \frac{M U}{4} A_0 a_0^R a_0^I + U \tilde{f}_0 a_0^R / 2 + \frac{M U}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_n (a_n^R a_n^I + b_n^R b_n^I) + \\
 &+ \frac{U}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{f}_n (a_n^R + b_n^I) + \frac{U \tilde{f}_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n (a_n^R - b_n^I)
 \end{aligned} \tag{A6.2}$$

Além disso, temos os vínculos:

$$q' = a_0^R / 2 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^R (-1)^n \quad A6.3$$

$$0 = a_0^I / 2 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^I (-1)^n \quad A6.4$$

$$\xi' = -2 \sum_{n=1}^{\infty} b_n^R (-1)^n \text{sen}(\omega_n \varepsilon / 2) \quad A6.5$$

$$0 = -2 \sum_{n=1}^{\infty} b_n^I (-1)^n \text{sen}(\omega_n \varepsilon / 2) \quad A6.6$$

Minimizando a parte real da ação sujeita às condições de contorno A6.3, A6.4, A6.5, A6.6 temos:

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}^R}{\delta a_n^R} + \frac{\delta V_1}{\delta a_n^R} \lambda_1 = 0 \quad A6.7$$

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}^R}{\delta a_0^R} + \frac{\delta V_1}{\delta a_0^R} \lambda_1 = 0 \quad A6.8$$

Aqui, λ_1 é um multiplicador de Lagrange e V_1 é o primeiro vínculo dado pela equação A6.3. Não é preciso usar os outros vínculos, visto que eles não dependem de a_n^R e a_0^R .

Temos então que

$$M U A_n a_n^R / 2 + \lambda_1 (-1)^n = 0$$

$$M U A_0 a_0^R / 4 + \lambda_1 / 2 = 0$$

ou seja,

$$a_n^R = \frac{-2 \lambda_1 (-1)^n}{M U A_n} \quad a_0^R = \frac{-2 \lambda_1}{M U A_0} \quad A6.9$$

Substituindo A6.9 em A6.3 temos:

$$q' = \frac{-\lambda_1 B}{M U A_0} \quad \text{onde } B = 2 A_0 \sum_{n=1}^{\infty} 1/A_n + 1 \quad A6.10$$

$$\text{Então, } \lambda_1 = -M U q' A_0 / B \quad A6.11$$

Substituindo A6.11 em A6.9 temos:

$$a_n^R = \frac{2 q' A_0 (-1)^n}{B A_n} \quad a_0^R = \frac{2 q'}{B} \quad A6.12$$

Agora, para obtermos a_n^I e a_0^I procederemos da mesma maneira. A diferença é que agora utilizaremos o segundo vínculo (equação A6.4) e introduziremos um novo multiplicador de Lagrange λ_2 , a seguir:

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}^R}{\delta a_n^I} + \frac{\delta V_2}{\delta a_n^I} \lambda_2 = 0 \quad A6.13$$

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}^R}{\delta a_0^I} + \frac{\delta V_2}{\delta a_0^I} \lambda_2 = 0 \quad \text{A6.14}$$

Obtemos então:

$$a_n^I = \frac{2 \lambda_2 (-1)^n}{M U A_n} - \frac{\tilde{f}_n}{M A_n} - \frac{\tilde{f}_0 (-1)^n}{M A_n} \quad \text{A6.15a}$$

$$a_0^I = \frac{2 \lambda_2}{M U A_0} - \frac{2 \tilde{f}_0}{M A_0} \quad \text{A6.15b}$$

Substituindo A6.15 em A6.4 obtemos:

$$\lambda_2 = U \tilde{f}_0 / B + U P A_0 / B + U \tilde{f}_0 A_0 V / B \quad \text{A6.16}$$

onde

$$P = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{f}_n (-1)^n / A_n$$

$$V = \sum_{n=1}^{\infty} 1 / A_n$$

Finalmente, substituindo A6.16 em A6.15 temos:

$$a_n^I = \frac{2 (-1)^n}{M B A_n} \left[\tilde{f}_0 / 2 + A_0 P \right] - \frac{\tilde{f}_n}{M A_n} \quad \text{A6.17}$$

$$a_o^I = \frac{2}{MB} \left[P - \tilde{f}_o V \right] \quad A6.18$$

Novamente repetimos o procedimento para b_n^R

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}^R}{\delta b_n^R} + \frac{\delta V_o}{\delta b_n^R} \lambda_g = 0 \quad A6.19$$

Obtemos então:

$$b_n^R = \frac{4 \lambda_g (-1)^n \text{sen}(\omega_n \varepsilon / 2)}{M U A_n} - \frac{\tilde{f}_n}{M A_n} + \frac{\tilde{f}_o (-1)^n}{M A_n} \quad A6.20$$

Substituindo A6.20 em A6.5 temos:

$$\lambda_g = \frac{-M U \xi'}{2 Q(\varepsilon)} + \frac{U R(\varepsilon)}{Q(\varepsilon)} - \frac{U \tilde{f}_o T(\varepsilon)}{Q(\varepsilon)} \quad A6.21$$

onde

$$T(\varepsilon) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{sen}(\omega_n \varepsilon / 2)}{A_n}$$

$$R(\varepsilon) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tilde{f}_n (-1)^n \text{sen}(\omega_n \varepsilon / 2)}{A_n}$$

$$Q(\varepsilon) = 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{sen}^2(\omega_n \varepsilon / 2)}{A_n}$$

Finalmente, substituindo A6.21 em A6.20 obtemos:

$$b_n^R = \frac{(-1)^n \text{sen}(\omega_n \varepsilon / 2)}{M Q(\varepsilon) A_n} \left[4 R(\varepsilon) - 4 f_0 T(\varepsilon) - 2 M \xi' \right] -$$

$$- \frac{\tilde{f}_n}{M A_n} + \frac{\tilde{f}_0 (-1)^n}{M A_n} \quad \text{A6.22}$$

Calculamos então b_n^I :

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta b_n^I} + \frac{\delta V_4}{\delta b_n^I} \lambda_4 = 0 \quad \text{A6.23}$$

Obtemos assim:

$$b_n^I = \frac{\lambda_4 (-1)^n \text{sen}(\omega_n \varepsilon / 2)}{M U A_n} \quad \text{A6.24}$$

Substituindo A6.24 em A6.6 temos:

$$\frac{\lambda_4 Q(\varepsilon)}{2 M U} = 0$$

Verificamos então que:

$$\lambda_4 = 0 \quad b_n^I = 0 \quad \text{A6.25}$$

Substituindo os valores encontrados para a_n^R , a_n^I , b_n^R , b_n^I , a_o^R , a_c^I (apêndice 6) nas equações 3.28 e 3.29 temos:

$$\begin{aligned}
 S_{\text{eff}}^R &= \frac{M U A_o}{8} \left\{ \frac{4 q'^2}{B^2} - \frac{4 P^2}{M^2 B^2} + \frac{8 \tilde{f}_o P V}{M^2 B^2} - \frac{4 \tilde{f}_o^2 V^2}{M^2 B^2} \right\} - \\
 &- \frac{U \tilde{f}_o}{2} \left\{ \frac{2}{M B} \left[P - \tilde{f}_o V \right] \right\} + \frac{M U}{4} \left\{ \frac{4 q'^2 A_o^2 V}{B^2} + \frac{1}{M^2} * \right. \\
 &* \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{f}_n^2 / A_n + \frac{\tilde{f}_o^2 V}{M^2} + \frac{\left[4 R(\epsilon) - 4 \tilde{f}_o T(\epsilon) - 2 M \xi' \right]^2}{4 M^2 Q(\epsilon)} \dots \\
 &- \frac{2 \tilde{f}_o P}{M^2} - \frac{2 R(\epsilon)}{M^2 Q(\epsilon)} \left[4 R(\epsilon) - 4 \tilde{f}_o T(\epsilon) - 2 M \xi' \right] + \frac{2 \tilde{f}_o T(\epsilon)}{M^2 Q(\epsilon)} + \\
 &* \left[4 R(\epsilon) - 4 \tilde{f}_o T(\epsilon) - 2 M \xi' \right] - \frac{4 V}{M^2 B^2} \left[\frac{\tilde{f}_o^2}{4} + \tilde{f}_o A_o P + A_o^2 P^2 \right] , \\
 &+ \frac{4 P}{M^2 B} \left[\frac{\tilde{f}_o}{2} + A_o P \right] - \frac{1}{M^2} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{f}_n^2 / A_n \left. \right\} + \frac{U}{2} \left\{ \frac{\tilde{f}_o P}{M} + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left. \left. \frac{\left[4 R(\varepsilon) - 4 \tilde{f}_0 T(\varepsilon) - 2 M \xi' \right] R(\varepsilon)}{M Q(\varepsilon)} - \frac{2 P}{M B} \left[\frac{\tilde{f}_0}{2} + A_0 P \right] \right\} - \right. \\
& - \frac{U \tilde{f}_0}{2} \left\{ \frac{-2 P}{M} + \frac{2 V}{M B} \left[\frac{\tilde{f}_0}{2} + A_0 P \right] + \frac{\tilde{f}_0 V}{M} + \right. \\
& \left. \left. \frac{\left[4 R(\varepsilon) - 4 \tilde{f}_0 T(\varepsilon) - 2 M \xi' \right] T(\varepsilon)}{M Q(\varepsilon)} \right\} \right. \tag{A7.1}
\end{aligned}$$

Após um tedioso cálculo obtemos que

$$\begin{aligned}
S_{\text{eff}}^R = & - \frac{U \tilde{f}_0^2 A_0 V^2}{2 M B} + \frac{U A_0 \tilde{f}_0 P V}{M B} - \frac{U A_0 P^2}{2 M B} + \frac{M U q'^2 A_0}{2 B} + \\
& + \frac{M U \xi'^2}{4 Q(\varepsilon)} - \frac{U \xi' R(\varepsilon)}{Q(\varepsilon)} + \frac{U \tilde{f}_0 \xi' T(\varepsilon)}{Q(\varepsilon)} - \frac{2 U \tilde{f}_0 R(\varepsilon) T(\varepsilon)}{M Q(\varepsilon)} + \\
& + \frac{U R(\varepsilon)^2}{M Q(\varepsilon)} + \frac{U \tilde{f}_0^2 T(\varepsilon)^2}{M Q(\varepsilon)} \tag{A7.2}
\end{aligned}$$

Entretanto, os tres primeiros termos da equação A7.2 podem ser reagrupados e escritos como

$$- \frac{U \tilde{f}_0^2 A_0 V^2}{2 M B} + \frac{U A_0 \tilde{f}_0 P V}{M B} - \frac{U A_0 P^2}{2 M B} = \frac{-U A_0 \bar{P}^2}{2 M B}$$

A7.3

onde

$$\bar{P} = P - \tilde{f}_0 V = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \tilde{f}_n / A_n \quad A7.4$$

$$\tilde{f}_n = \tilde{f}_n - \tilde{f}_0 (-1)^n = \frac{2 \eta (-1)^n}{U} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \omega_n e^{-\omega_n t'}$$

A7.5

Além disso, temos que

$$- \frac{U \xi' R(\varepsilon)}{Q(\varepsilon)} + \frac{U \tilde{f}_0 \xi' T(\varepsilon)}{Q(\varepsilon)} = \frac{-U \xi' \bar{R}(\varepsilon)}{Q(\varepsilon)} \quad A7.6$$

onde

$$\bar{R}(\varepsilon) = R(\varepsilon) - \tilde{f}_0 T(\varepsilon) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \tilde{f}_n \operatorname{sen}(\omega_n \varepsilon / 2) / A_n \quad A7.7$$

e \tilde{f}_n é dado pela equação A7.5.

Por outro lado, os tres últimos termos da equação (7.1) podem ser escritos como:

$$-\frac{2 U \tilde{f}_0 R(\epsilon) T(\epsilon)}{M Q(\epsilon)} + \frac{U R(\epsilon)^2}{M Q(\epsilon)} + \frac{U \tilde{f}_0^2 T(\epsilon)^2}{M Q(\epsilon)} = \frac{U \bar{R}(\epsilon)^2}{M Q(\epsilon)}$$

A7.8

Finalmente, temos que a ação se reduz a

$$\bar{S}_{\text{eff}}^R = \frac{M U \xi'^2}{4 Q(\epsilon)} + \frac{M U q'^2}{2 \kappa} - \frac{U \xi' \bar{R}(\epsilon)}{Q(\epsilon)} - \frac{U \bar{P}^2}{2 M \kappa} + \frac{U \bar{R}(\epsilon)^2}{M Q(\epsilon)}$$

A7.9

onde \bar{P} e $\bar{R}(\epsilon)$ são dados respectivamente pelas equações A7.4 e

A7.7 e κ é definido como:

$$\kappa = \bar{B} / A_0 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} 1/A_n \quad \text{A7.10}$$

Quanto à parte imaginária, temos que \bar{S}_{eff}^I se escreve

$$\bar{S}_{\text{eff}}^I = \frac{U q' A_0 P}{B^2} + \frac{2 U q' A_0^2 P V}{B^2} + \frac{U q' \tilde{f}_0}{B} + \frac{U \tilde{f}_0 A_0 q' V}{B}$$

A7.11

Entretanto, os dois primeiros termos podem ser reagrupados:

$$\frac{U q' A_o P}{B^2} + \frac{2 U q' A_o^2 P V}{B^2} = \frac{U q' A_o P}{B} \quad \text{A7.12}$$

Assim, temos que

$$\bar{S}_{eff} = \frac{U q' A_o P}{B} + \frac{U q' \tilde{f}_o}{B} + \frac{U \tilde{f}_o A_o q' V}{B} \quad \text{A7.13}$$

No entanto, temos ainda que

$$P = \bar{P} + \tilde{f}_o V \quad \text{e} \quad B = 2 A_o V + 1$$

Deste modo, podemos escrever:

$$\bar{S}_{eff} = \frac{U q' A_o \bar{P}}{B} + U \tilde{f}_o q' \quad \text{A7.14}$$

- Conversão de Integrais em Séries:

$$\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2 - 2\gamma i\omega)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} =$$

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\gamma\omega \, d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad \text{A8.1}$$

Definindo:

$$g(\omega) = \frac{2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \quad \text{temos que } g(-\omega) = -g(\omega)$$

Assim, temos :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2 - 2\gamma i\omega)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} &= \frac{1}{\pi} \left\{ \int_{-\infty}^0 \frac{g(\omega) \, d\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \right. \\ &+ \left. \int_0^{\infty} \frac{g(\omega) \, d\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right\} = \frac{1}{\pi} \left\{ \int_{\infty}^0 \frac{-g(-\omega') \, d\omega'}{e^{-\beta\hbar\omega'} - 1} + \int_0^{\infty} \frac{g(\omega) \, d\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right\} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\pi} \left\{ \int_{-\infty}^0 \frac{g(\omega) d\omega}{e^{-\beta\hbar\omega} - 1} + \int_0^{\infty} \frac{g(\omega) d\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right\} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega g(\omega) * \\
&* \left[\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} - \frac{1}{e^{-\beta\hbar\omega} - 1} \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega g(\omega) \left[\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{e^{\beta\hbar\omega/2} - e^{-\beta\hbar\omega/2}} - \right. \\
&- \left. \frac{e^{\beta\hbar\omega/2}}{e^{-\beta\hbar\omega/2} - e^{\beta\hbar\omega/2}} \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega g(\omega) \operatorname{coth} \left(\beta\hbar\omega/2 \right) = \\
&= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \operatorname{coth} \left(\beta\hbar\omega/2 \right) d\omega \quad \text{A8.2}
\end{aligned}$$

Mas, por outro lado,

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega) e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-d\omega}{(\omega - \omega_+) (\omega - \omega_-)} \\
&* \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad \text{A8.3}
\end{aligned}$$

onde ω_+ e ω_- são as raízes da equação:

$$\omega^2 + 2i\gamma\omega - \omega_0^2 = 0 \quad \text{A8.4}$$

e são dados por:

$$\omega_+ = -i\gamma + \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} \quad \omega_- = -i\gamma - \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} \quad A8.5$$

Analisando esta integral, verificamos que ela tem tres polos: ω_+ , ω_- e ω_n onde :

$$\omega_n = i k_n = \frac{2 n \pi i}{h \beta}, n \in \mathbb{Z} \quad \text{é polo de } \frac{1}{e^{\beta h \omega} - 1} \quad A8.6$$

Definindo:

$f(\omega) = e^{\beta h \omega} - 1$ temos que o resíduo da função $1/f(\omega)$ no polo ω_n é dado por:

$$\text{Res}_{\omega = \omega_n} \frac{1}{f(\omega)} = \text{Res}_{\omega = \omega_n} \frac{1}{f(\omega_n) + f'(\omega_n)(\omega - \omega_n) + 1/2 f''(\omega_n)(\omega - \omega_n)^2}$$

onde estamos desprezando os termos da ordem de $(\omega - \omega_n)^3$

$$\text{Mas } f(\omega_n) = 0, f'(\omega_n) = h\beta \text{ e } f''(\omega_n) = (h\beta)^2$$

Assim,

$$\text{Res}_{\omega = \omega_n} \frac{1}{f(\omega)} = \text{Res}_{\omega = \omega_n} \frac{1}{h\beta(\omega - \omega_n) + (h\beta)^2/2 (\omega - \omega_n)^2} =$$

$$= \operatorname{Res}_{\omega = \omega_n} \frac{1}{\hbar\beta(\omega - \omega_n) \left[1 + (\hbar\beta)/2 (\omega - \omega_n) \right]} =$$

$$= \operatorname{Res}_{\omega = \omega_n} \frac{1}{\hbar\beta(\omega - \omega_n) \left[1 - \hbar\beta/2 (\omega - \omega_n) \right]} = \frac{1}{\hbar\beta} \quad \text{A8.7}$$

Além disso, definindo $f_1(\omega) = (\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-)(e^{\beta\hbar\omega} - 1)$

temos que:

$$\operatorname{Res}_{\omega = \omega_n} \frac{-1}{f_1(\omega)} = \frac{1}{\hbar\beta} \left[\frac{-1}{(\omega_n - \omega_+)(\omega_n - \omega_-)} \right]$$

$$\text{Mas: } \omega_+ \omega_- = -\omega_0^2$$

$$\omega_n \omega_- + \omega_n \omega_+ = -2i\gamma \omega_n$$

Então,

$$\operatorname{Res}_{\omega = \omega_n} \frac{-1}{f_1(\omega)} = \frac{1}{\hbar\beta} \left[\frac{-1}{(\omega_n^2 + 2i\gamma \omega_n - \omega_0^2)} \right] \quad \text{A8.8}$$

Portanto, efetuando a integral A8.3 através do caminho especificado na figura 4 temos:

$$\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \pi i \operatorname{Res}_{\omega = \omega_0} \frac{1}{f_1(\omega)} + \right.$$

$$+ 2 \pi i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\hbar\beta} \left[\frac{-1}{\omega_n^2 + 2i\gamma \omega_n - \omega_0^2} \right] \quad \text{A8.9}$$

onde $\omega_0 = \omega_n$ para $n = 0$, ou seja, $\omega_0 = 0$

Assim,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} &= \operatorname{Im} \left\{ i \frac{1}{\hbar\beta} \frac{1}{\omega_0^2} + \right. \\ &\quad \left. + 2i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\hbar\beta} \left[\frac{-1}{\omega_n^2 + 2i\gamma \omega_n - \omega_0^2} \right] \right\} = \\ &= \frac{1}{\hbar\beta \omega_0^2} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\hbar\beta} \left[\frac{-1}{(ik_n)^2 + 2i\gamma (ik_n) - \omega_0^2} \right] \quad \text{A8.10} \end{aligned}$$

onde k_n foi definido em A8.6

Então,

$$\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k_n^2 + 2\gamma|k_n| + \omega_0^2} \quad \text{A8.11}$$

Concluindo, temos que:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \operatorname{cothg} \left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) d\omega = \\
 & = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \\
 & = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k_n^2 + 2\gamma|k_n| + \omega_0^2} \tag{A8.12}
 \end{aligned}$$

Analogamente, temos que:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_n e^{-k_n t'}}{k_n^2 + 2\gamma|k_n| + \omega_0^2} = \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} 2\pi i \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{i\omega_n} \right. \\
 & * \left. \left[\frac{i\omega_n e^{i\omega_n t'}}{\omega_n^2 + 2i\gamma\omega_n - \omega_0^2} \right] \right\} = \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} 2\pi i \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Res}_{\omega = \omega_n} \left\{ \frac{1}{\omega} \frac{1}{\omega^2 + 2i\gamma\omega - \omega_0^2} \right\} \\
 & * \left. \frac{i\omega e^{i\omega t'}}{(\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-)} \right\} = \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega i\omega e^{i\omega t'}}{(\omega - \omega_+)(\omega - \omega_-)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \\
 & = \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega (-i\omega) e^{i\omega t'}}{(\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} =
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega i\omega (\cos \omega t' + i \operatorname{sen} \omega t') (\omega_0^2 - \omega^2 + 2i\gamma\omega)}{[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2] (e^{\beta h\omega} - 1)} \\
&= \frac{-1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega \left[-2\gamma \omega^2 \cos \omega t' - \omega (\omega_0^2 - \omega^2) \operatorname{sen} \omega t' \right]}{[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2] (e^{\beta h\omega} - 1)} + \\
&+ \frac{-1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega i \left[-2\gamma \omega^2 \operatorname{sen} \omega t' + \omega (\omega_0^2 - \omega^2) \cos \omega t' \right]}{[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2] (e^{\beta h\omega} - 1)} \\
&= \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega \omega \left[-2\gamma \omega \operatorname{sen} \omega t' + (\omega_0^2 - \omega^2) \cos \omega t' \right]}{[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2] (e^{\beta h\omega} - 1)} \quad \text{A8.13}
\end{aligned}$$

onde agora

$$g(\omega) = \frac{\omega \left[-2\gamma \omega \operatorname{sen} \omega t' + (\omega_0^2 - \omega^2) \cos \omega t' \right]}{[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2]} \quad \text{A8.14}$$

Como podemos notar $g(\omega)$ continua a ser uma função ímpar.

Então,

$$\frac{-1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{d\omega \omega \left[-2\gamma \omega \operatorname{sen} \omega t' + (\omega_0^2 - \omega^2) \cos \omega t' \right] \operatorname{cotgh} \beta h\omega/2}{[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2]} =$$

$$= \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_n^2 e^{-k_n t'}}{k_n^2 + 2\gamma|k_n| + \omega_0^2} \quad \text{A8.15}$$

Novamente, da mesma forma temos que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_n^2 e^{-k_n t'}}{k_n^2 + 2\gamma|k_n| + \omega_0^2} &= \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} 2\pi i \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\hbar\beta} + \right. \\ & * \left. \left[\frac{-(-i\omega_n)^2 e^{i\omega_n t'}}{\omega_n^2 + 2i\gamma\omega_n - \omega_0^2} \right] \right\} = \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} 2\pi i \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Res}_{\omega = \omega_n} \left\{ \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \right. \\ & * \left. \frac{\omega^2 e^{i\omega t'}}{(\omega - \omega_+) (\omega - \omega_-)} \right\} = \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega \omega^2 e^{i\omega t'}}{(\omega - \omega_+) (\omega - \omega_-)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \\ & = \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega (-\omega^2) e^{i\omega t'}}{(\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega)} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \\ & = \frac{-1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega \omega^2 (\cos \omega t' + i \operatorname{sen} \omega t') (\omega_0^2 - \omega^2 + 2i\gamma\omega)}{[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2] (e^{\beta\hbar\omega} - 1)} = \\ & = \frac{-1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega \left[-2\gamma \omega^3 \operatorname{sen} \omega t' + \omega^2 (\omega_0^2 - \omega^2) \cos \omega t' \right]}{[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2] (e^{\beta\hbar\omega} - 1)} + \end{aligned}$$

$$+ \frac{-1}{2\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \frac{1}{\left[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2 \right]} \frac{\left[+2\gamma \omega^3 \cos \omega t' + \omega^2 (\omega_0^2 - \omega^2) \operatorname{sen} \omega t' \right]}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)} \quad \square$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega \omega^2}{\left[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2 \right]} \frac{\left[-2\gamma \omega \cos \omega t' - (\omega_0^2 - \omega^2) \operatorname{sen} \omega t' \right]}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)} \quad \text{A8.16}$$

onde agora

$$g(\omega) = \frac{\omega^2 \left[-2\gamma \omega \cos \omega t' - (\omega_0^2 - \omega^2) \operatorname{sen} \omega t' \right]}{\left[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2 \right]} \quad \text{A8.17}$$

Então,

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{d\omega \omega^2 \left[-2\gamma \omega \cos \omega t' - (\omega_0^2 - \omega^2) \operatorname{sen} \omega t' \right] \operatorname{coth} \beta \hbar \omega / 2}{\left[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2 \right]} \quad \square$$

$$= \frac{1}{\hbar \beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_n^2 e^{-k_n t'}}{k_n^2 + 2\gamma |k_n| + \omega_0^2} \quad \text{A8.18}$$

Cálculo de $\langle q \rangle$ e de $\langle q^2 \rangle$

Nesta seção nós calcularemos o valor médio e o quadrático médio da posição de uma partícula browniana sujeita a um potencial harmônico no caso da condição inicial não fatorizável.

Para uma função genérica da posição temos que:

$$\langle F(q) \rangle_t = \int dq F(q) \tilde{\rho}_N(q, \xi = 0, t) \quad A9.1$$

No entanto, sabemos que ρ_N é dado pela expressão 4.73. Substituindo $\xi = 0$ nesta equação temos:

$$\tilde{\rho}_N(q, 0, t) = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} \int \int dq' d\xi' J(q, 0, t; q', \xi', 0) \rho_0^S(q', \xi') \quad A9.2$$

onde

$$J(q, 0, t; q', \xi', 0) = \exp \frac{1}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' - N(t) q \xi' \right\} * \\ * \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \quad A9.3$$

e onde

$$\alpha = K(t) + M\gamma - M U E(t)/\kappa \quad A9.4$$

$$\lambda = \hbar / M U$$

A9.5

$$\Delta = G(t) - E(t)^2 / 2 \lambda$$

A9.6

Substituindo A9.2 e A9.3 em A9.1 temos:

$$\langle F(q) \rangle_t = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} \int \int \int dq \, dq' \, d\xi' F(q) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' - N(t) q \xi' \right\} *$$

$$* \exp \frac{-i}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \rho_0^S(q', \xi') \quad \text{A9.7}$$

Mas

$$\begin{aligned} & \int dq \int d\xi' F(q) \exp \left[\frac{-i N(t) q \xi'}{\hbar} \right] = \\ & = \int d\xi' \int dq F \left[\frac{i \hbar}{N(t)} \frac{\partial}{\partial \xi'} \right] \exp \left[\frac{-i N(t) \xi' q}{\hbar} \right] \\ & = \int d\xi' F \left[\frac{i \hbar}{N(t)} \frac{\partial}{\partial \xi'} \right] 2 \pi \delta \left[\frac{N(t) \xi'}{\hbar} \right] \\ & = \int d\xi' F \left[\frac{i \hbar}{N(t)} \frac{\partial}{\partial \xi'} \right] \frac{2 \pi \hbar}{N(t)} \delta(\xi') \quad \text{A9.8} \end{aligned}$$

Assim,

$$\langle F(q) \rangle_t = \int dq' \int d\xi' \left[F \left(\frac{i \hbar}{N(t)} \frac{\partial}{\partial \xi'} \right) \delta(\xi') \right] *$$

$$* \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \rho_0^S(q', \xi') \quad A9.9$$

Temos portanto que:

$$\langle q \rangle_t = \int dq' \int d\xi' \left[\frac{i \hbar}{N(t)} \frac{\partial}{\partial \xi'} \delta(\xi') \right] \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} *$$

$$* \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \rho_0^S(q', \xi') \quad A9.10$$

Integrando por partes a equação A9.10 temos:

$$\langle q \rangle_t = - \int dq' \int d\xi' \frac{i \hbar}{N(t)} \delta(\xi') \left\{ \frac{i \alpha q'}{\hbar} \rho_0(q', \xi') - \frac{2 \Delta \xi'}{\hbar} \rho_0(q', \xi') + \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \right\} \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} *$$

$$* \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \quad A9.11$$

pois $\delta(\xi')$ em $\pm\infty$ tende a zero. A exponencial imaginária oscila muito rápido, mas continua sendo limitada e a outra exponencial também tende a zero e $\pm\infty$, devido ao termo $-\xi'^2$.

Efetuada então a integral em ξ' temos:

$$\langle q \rangle_t = - \int dq' \frac{i \hbar}{N(t)} \left\{ \frac{i \alpha q'}{\hbar} \rho_0(q', \xi') + \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \right\}_{\xi'=0} * \exp \left(\frac{-q'^2}{2 \hbar \lambda} \right) \quad \text{A9.12}$$

Mas $-i \hbar \frac{\partial}{\partial \xi'} = \hat{p}$

Então,

$$\langle q \rangle_t = \frac{\alpha}{N(t)} \int dq' q' \rho_0(q', 0) \exp \left(\frac{-q'^2}{2 \hbar \lambda} \right) + \frac{1}{N(t)} \int dq' p \rho_0(q', 0) \exp \left(\frac{-q'^2}{2 \hbar \lambda} \right) \quad \text{A9.13}$$

$$\langle q \rangle_t = \frac{\alpha}{N(t)} \langle q' \rangle_0 + \frac{1}{N(t)} \langle p \rangle_0 \quad \text{A9.14}$$

$$\langle q \rangle_t = \frac{1}{N(t)} \left\{ \left[K(t) + M\gamma - E(t)/\lambda \right] \langle q' \rangle_0 + \langle p \rangle_0 \right\} \quad A9.15$$

Quanto ao valor quadrático médio da posição, temos que:

$$\begin{aligned} \langle q^2 \rangle_t = \int dq' \int d\xi' & \left[\left[\frac{1}{N(t)} \right]^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi'^2} \delta(\xi') \right] \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} + \\ & * \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2\lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \rho_0^S(q', \xi') \end{aligned} \quad A9.16$$

Integrando por partes duas vezes temos:

$$\begin{aligned} \langle q^2 \rangle_t = \frac{-\hbar^2}{N(t)^2} \int dq' \int d\xi' \delta(\xi') \frac{\partial^2}{\partial \xi'^2} & \left\{ \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} * \right. \\ & * \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2\lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \rho_0^S(q', \xi') \end{aligned} \quad A9.17$$

$$\begin{aligned} \langle q^2 \rangle_t = \frac{-\hbar^2}{N(t)^2} \int dq' \int d\xi' \delta(\xi') & \left\{ \left[\frac{1}{\hbar} \frac{\alpha q'}{\partial \xi'} \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{2\Delta \rho_0(q', \xi')}{\hbar} - \frac{2\Delta \xi'}{\hbar} \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} + \frac{\partial^2 \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'^2} \right] + \right. \end{aligned}$$

$$\left[\frac{i \alpha q'}{\hbar} - \frac{2 \Delta \xi'}{\hbar} \right] \left[\frac{i \alpha q' \rho_0(q', \xi')}{\hbar} - \frac{2 \Delta \xi' \rho_0(q', \xi')}{\hbar} + \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \right] \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} *$$

* $\rho_0^S(q', \xi')$ A9.18

Efetutando a integral em ξ' temos:

$$\langle q^2 \rangle_t = \frac{-\hbar^2}{N(t)^2} \int dq' \left\{ \frac{i \alpha q'}{\hbar} \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \right|_{\xi'=0} - \frac{2 \Delta \rho_0(q', 0)}{\hbar} + \frac{\partial^2 \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'^2} \Big|_{\xi'=0} - \frac{\alpha^2 q'^2 \rho_0(q', 0)}{\hbar^2} + \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \Big|_{\xi'=0} \frac{i \alpha q'}{\hbar} \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} \right\}$$

A9.19

Mas

$$\langle q'p \rangle = -i \hbar \int dq' q' \left. \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \right|_{\xi'=0} + i \hbar / 2 \quad \text{A9.20}$$

$$\langle p q' \rangle = -i \hbar \int dq' q' \left. \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \right|_{\xi'=0} - i \hbar / 2 \quad \text{A9.21}$$

Logo, temos que

$$\begin{aligned} \langle q'^2 \rangle_t &= \frac{\alpha}{N(t)^2} \langle q' p + p q' \rangle_0 + \frac{2 \hbar \Delta}{N(t)^2} + \\ &+ \frac{1}{N(t)^2} \langle p^2 \rangle_0 + \frac{\alpha^2}{N(t)^2} \langle q'^2 \rangle_0 \end{aligned} \quad \text{A9.22}$$

Cálculo de $\langle p \rangle$ e de $\langle p^2 \rangle$

Nesta seção nós calcularemos o valor médio e o valor quadrático médio do momento de uma partícula Browniana sujeita a um potencial harmônico com a condição inicial não fatorizável.

Para uma função genérica do momento temos que:

$$\langle F(p) \rangle_t = \int dq F \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \tilde{\rho}_N(q, \xi, t) \Big|_{\xi=0} \quad A10.1$$

Então,

$$\langle F(p) \rangle = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} \int dq \int dq' \int d\xi' F \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \xi} \right] J(q, \xi, t; q', \xi', 0) \Big|_{\xi=0} *$$

$$* \rho_0^S(q', \xi') \quad A10.2$$

Assim,

$$\langle p \rangle_t = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} \int dq \int dq' \int d\xi' \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \xi} J(q, \xi, t; q', \xi', 0) \Big|_{\xi=0} \rho_0^S(q', \xi')$$

$$\langle p \rangle_t = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} \int dq \int dq' \int d\xi' \frac{\hbar}{i} \left\{ \frac{1}{\hbar} \left[K(t) - M \gamma \right] q - \frac{1}{\hbar} \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] q' - \frac{1}{\hbar} \left[B(t) - \frac{D(t) E(t)}{\lambda} \right] \xi' \right\} *$$

$$* \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' - N(t) q \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \rho_0(q', \xi')$$

A10.3

Mas:

$$\int dq q \exp \left(\frac{-i N(t) \xi' q}{\hbar} \right) = \frac{-\hbar}{i N(t)} \frac{\partial}{\partial \xi'} \int dq \exp \left(\frac{-i N(t) \xi' q}{\hbar} \right) =$$

$$= \frac{-\hbar}{i N(t)} \frac{\partial}{\partial \xi'} \left(\frac{2 \pi \hbar}{N(t)} \delta(\xi') \right) = \frac{-2 \pi \hbar^2}{i N(t)^2} \frac{\partial \delta(\xi')}{\partial \xi'}$$

A10.4

e

$$\int dq \exp \left(\frac{-i N(t) \xi' q}{\hbar} \right) = \frac{\hbar}{N(t)} 2 \pi \delta(\xi')$$

A10.5

Portanto, temos que:

$$\langle p \rangle_t = \int dq' \int d\xi' \left[K(t) - M \gamma \right] \rho_0(q', \xi') \frac{i \hbar}{N(t)} \left[\frac{\partial \delta(\xi')}{\partial \xi'} \right] *$$

$$* \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} - \int dq' \int d\xi' *$$

$$* \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] q' \rho_0(q', \xi') \delta(\xi') \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} *$$

$$* \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} + i \int dq' \int d\xi' \left[B(t) - \frac{D(t) E(t)}{\lambda} \right] \xi' *$$

$$* \rho_0(q', \xi') \delta(\xi') \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\}$$

A10.6

Integrando o primeiro termo por partes temos:

$$\int dq' \int d\xi' \left[K(t) - M \gamma \right] \rho_0(q', \xi') \frac{i \hbar}{N(t)} \left[\frac{\partial \delta(\xi')}{\partial \xi'} \right] *$$

$$* \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} =$$

$$\begin{aligned}
 &= - \int dq' \int d\xi' \left[K(t) - M \gamma \right] \frac{i \hbar}{N(t)} \delta(\xi') \left\{ \frac{i \alpha \rho_0(q', \xi') q'}{\hbar} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{2 \Delta \rho_0(q', \xi') \xi'}{\hbar} + \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \right\} \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} + \\
 &\quad * \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \tag{A10.7}
 \end{aligned}$$

Efetuada então a integral em ξ' temos:

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle_t &= \int dq' \left\{ \frac{[K(t) - M \gamma]}{N(t)} \left[\alpha q' \rho_0(q', 0) - i \hbar \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \Big|_{\xi'=0} \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] q' \rho_0(q', 0) \right\} \exp \frac{-q'^2}{2 \hbar \lambda} \tag{A10.8}
 \end{aligned}$$

Mas:

$$\int dq' q' \rho_0(q', \xi') \exp \frac{-q'^2}{2 \hbar \lambda} = \langle q' \rangle_0$$

$$e \quad - \int dq' i \hbar \frac{\partial \rho_0(q', \xi')}{\partial \xi'} \Big|_{\xi'=0} \exp \frac{-q'^2}{2 \hbar \lambda} = \langle p \rangle_0$$

Logo, temos que:

$$\langle p \rangle_t = \left[\frac{\alpha [K(t) - M \gamma]}{N(t)} - \left(\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right) \right] \langle q' \rangle_0 +$$

$$+ \frac{[K(t) - M \gamma]}{N(t)} \langle p \rangle_0 \quad \text{A10.9}$$

Quanto ao valor quadrático médio do momento temos:

$$\langle p^2 \rangle_t = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} \int dq \int dq' \int d\xi' \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial \xi} J(q, \xi, t; q', \xi', 0) \right] \Bigg|_{\xi=0}^* \quad *$$

$$* \rho_0(q', \xi') \quad \text{A10.10}$$

$$\langle p^2 \rangle_t = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} (-\hbar^2) \int dq \int dq' \int d\xi' \rho_0(q', \xi') *$$

$$* \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ \left\{ [K(t) - M \gamma] \frac{1}{\hbar} q - \left(\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right) \frac{1}{\hbar} q' - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \left[A(t) - \frac{D(t)^2}{2 \lambda} \right] \frac{2 \xi}{\hbar} - \left[B(t) - \frac{D(t) E(t)}{\lambda} \right] \frac{\xi'}{\hbar} \right\} \right\} *$$

$$\exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \left[K(t) - M \gamma \right] q \xi + \alpha q' \xi' - N(t) q \xi' - \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] q' \xi \right\} *$$

$$* \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \left[A(t) - \frac{D(t)^2}{2 \lambda} \right] \xi^2 + \left[B(t) - \frac{D(t) E(t)}{\lambda} \right] \xi \xi' + \Delta \xi'^2 \right\} \Big|_{\xi=0}$$

A10.11

$$\langle p^2 \rangle_t = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} (-\hbar^2) \int dq \int dq' \int d\xi' \rho_0(q', \xi') *$$

$$* \left\{ \frac{-2}{\hbar} \left[A(t) - \frac{D(t)^2}{2 \lambda} \right] + \left[\left[K(t) - M \gamma \right] \frac{1}{\hbar} q - \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] \frac{1}{\hbar} q' - \left[B(t) - \frac{D(t) E(t)}{\lambda} \right] \frac{\xi'}{\hbar} \right]^2 \right\} *$$

$$* \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' - N(t) q \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2 \lambda} + \Delta \xi'^2 \right\}$$

A10.12

$$\langle p^2 \rangle_t = \frac{N(t)}{2 \pi \hbar} (-\hbar^2) \int dq \int dq' \int d\xi' \rho_0(q', \xi') *$$

$$\begin{aligned}
& * \left\{ \frac{-2}{\hbar} \left[A(t) - \frac{D(t)^2}{2\lambda} \right] - \frac{q^2}{\hbar^2} \left[K(t) - M\gamma \right]^2 - \frac{q'^2}{\hbar^2} \left[\frac{D(t)}{\lambda} + \right. \right. \\
& \left. \left. + L(t) \right]^2 + \frac{\xi'^2}{\hbar^2} \left[B(t) - \frac{D(t)E(t)}{\lambda} \right]^2 + \frac{2qq'}{\hbar^2} \left[K(t) - M\gamma \right] * \right. \\
& * \left. \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] - \frac{2iq\xi'}{\hbar^2} \left[K(t) - M\gamma \right] \left[B(t) - \frac{D(t)E(t)}{\lambda} \right] + \right. \\
& \left. + \frac{2iq'\xi'}{\hbar^2} \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] \left[B(t) - \frac{D(t)E(t)}{\lambda} \right] \right\} * \\
& * \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q'\xi' - N(t) q \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2\lambda} + \Delta \xi'^2 \right\}
\end{aligned}$$

A10.13

Mas:

$$\begin{aligned}
& \int dq q^2 \exp \frac{-i N(t) \xi' q}{\hbar} = \\
& = \left[\frac{-\hbar}{i N(t)} \right]^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi'^2} \int dq \exp \frac{-i N(t) \xi' q}{\hbar} =
\end{aligned}$$

$$= \frac{-\hbar^2}{N(t)^2} \frac{2\pi\hbar}{N(t)} \frac{\partial^2}{\partial \xi'^2} \delta(\xi')$$

Assim,

$$\langle p^2 \rangle_t = 2\hbar \left[A(t) - \frac{D(t)^2}{2\lambda} \right] - \frac{\hbar^2}{N(t)^2} \left[K(t) - M\gamma \right]^2 \int dq' \int d\xi' *$$

$$* \rho_0(q', \xi') \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2\lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \frac{\partial^2 \delta(\xi')}{\partial \xi'^2} +$$

$$+ \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right]^2 \langle q'^2 \rangle_0 + \frac{2\hbar}{i N(t)} \left[K(t) - M\gamma \right] \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] *$$

$$* \int dq' \int d\xi' q' \rho_0(q', \xi') \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2\lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} *$$

$$* \frac{\partial \delta(\xi')}{\partial \xi'} - \frac{2\hbar}{N(t)} \left[K(t) - M\gamma \right] \left[B(t) - \frac{D(t) E(t)}{\lambda} \right] \int dq' \int d\xi' *$$

$$* \xi' \rho_0(q', \xi') \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \alpha q' \xi' \right\} \exp \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{q'^2}{2\lambda} + \Delta \xi'^2 \right\} \frac{\partial \delta(\xi')}{\partial \xi'}$$

A10.14

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle_t &= 2 \hbar \left[A(t) - \frac{D(t)^2}{2\lambda} \right] - \frac{\hbar^2}{N(t)^2} \left[K(t) - M\gamma \right]^2 \left\{ \frac{1}{\hbar} \langle q'^2 \rangle_0 - \frac{1}{\hbar} \langle p^2 \rangle_0 \right\} \\
&\quad - \left\{ \frac{\alpha^2}{\hbar^2} \langle q'^2 \rangle_0 - \frac{\alpha}{\hbar^2} \langle q'p + p q' \rangle_0 - \frac{1}{\hbar^2} \langle p^2 \rangle_0 \right\} + \\
&+ \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right]^2 \langle q'^2 \rangle_0 - \frac{2i\hbar}{N(t)} \left[K(t) - M\gamma \right] \left[\frac{D(t)}{\lambda} + L(t) \right] * \\
&\quad * \left\{ \frac{-i\alpha}{\hbar} \langle q'^2 \rangle_0 - \frac{1}{2\hbar} \langle q'p + p q' \rangle_0 \right\} + \frac{2\hbar}{N(t)} \left[K(t) - M\gamma \right] * \\
&\quad * \left[B(t) - \frac{D(t)E(t)}{\lambda} \right]
\end{aligned} \tag{A10.15}$$

Então, temos que

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle_t &= 2 \hbar \left\{ \left[A(t) - \frac{D(t)^2}{2\lambda} \right] + \left[B(t) - \frac{D(t)E(t)}{\lambda} \right] \frac{[K(t) - M\gamma]^2}{N(t)} \right. \\
&+ \frac{\Delta}{N(t)^2} \left. [K(t) - M\gamma]^2 \right\} + \left\{ \frac{\alpha^2}{N(t)^2} [K(t) - M\gamma]^2 + \left[L(t) + \frac{D(t)}{\lambda} \right]^2 - \right. \\
&\left. - \frac{2\alpha}{N(t)} \left[K(t) - M\gamma \right] \left[L(t) + \frac{D(t)}{\lambda} \right] \right\} \langle q'^2 \rangle_0 + \frac{[K(t) - M\gamma]^2}{N(t)^2} \langle p^2 \rangle_0 +
\end{aligned}$$

$$+ \left\{ \frac{\alpha}{N(t)^2} \left[K(t) - M \gamma \right]^2 - \frac{1}{N(t)} \left[K(t) - M \gamma \right] \left[L(t) + \frac{D(t)}{\lambda} \right] \right\} *$$

* $\langle q'p + p q' \rangle_0$.

A10.16

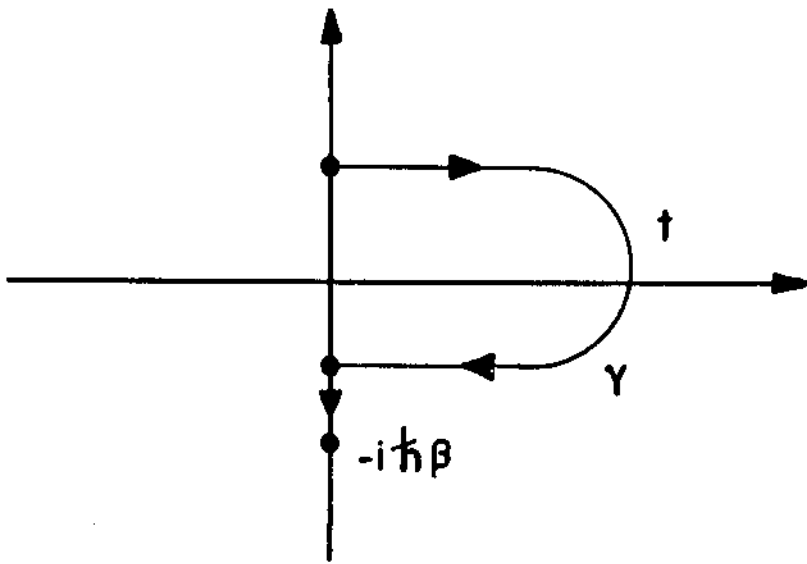


FIGURA 1

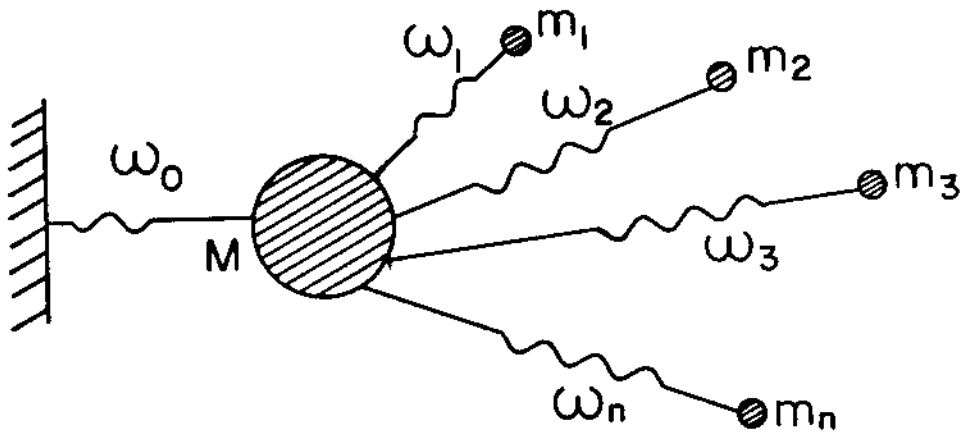


FIGURA 2

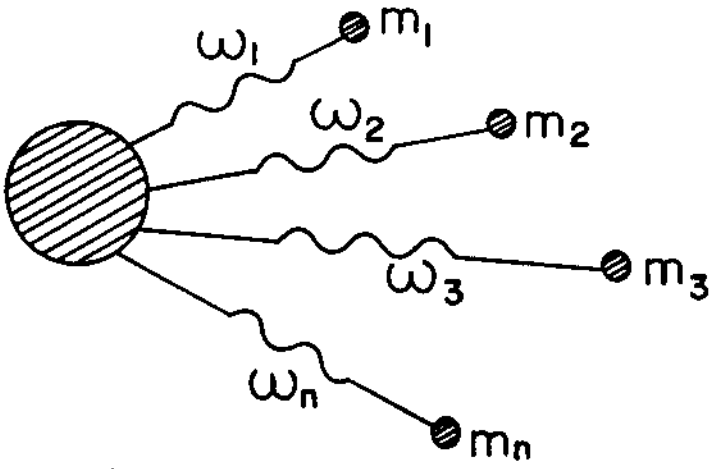


FIGURA 3

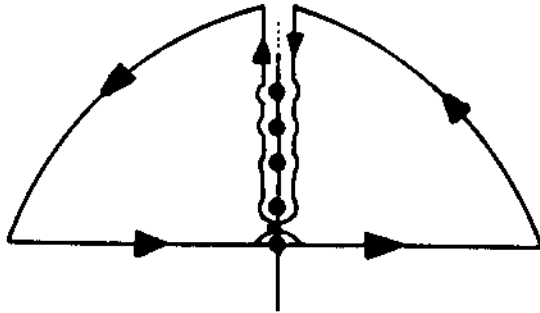


FIGURA 4

Referências

1. A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Physica A* 121, 587 (1983); 130, 374 (1985).
2. A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Ann. Phys. (N.Y.)* 149,374 (1983); 153, 445 (1984)
3. Para tunelamento dissipativo a baixa temperatura veja,por exemplo, D.Wawman and A. J. Leggett, *Phys. Rev. B* 32, 4450 (1985); H. Grabert and U. Weiss, *Z. Phys. B* 56, 171 (1984); A. I. Larkin and Yu. N. Ovchinnikov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*86.719 ((1984) [*Sov. Phys. JETP* 59, 420 (1984)]).
4. A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* 59, 1 (1987).
5. R. P. Feynman and F. L. Vernon, Jr.,*Ann. Phys. (N.Y.)* 24, 118 (1963).
6. R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New york, 1965).
7. V. Hakim and V. Ambegaokar, *Phys. Rev. A* 32, 423 (1985).
8. R. P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Benjamin, New York, 1982).
9. Paulo Barone (Tese de Mestrado)
10. C. Morais Smith and A. O. Caldeira, *Phys. Rev A* 36, 3509 (1987).