

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física “Gleb Wataghin”

Tese de Doutorado

**Dissipação, Termalização e
Descoerência via
Acoplamento Caótico**

Marcus Vinicius Segantini Bonança

Orientador:

Prof. Dr. Marcus Aloízio Martinez de Aguiar

Banca examinadora:

Prof. Dr. Marcus Aloízio Martinez de Aguiar - DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Caio Henrique Lewenkopf - UERJ/RJ

Prof. Dr. Sílvio Antonio Sanchetto Vitiello - DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira - DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. José Antonio Roversi - DEQ/IFGW/UNICAMP

Junho de 2006

Agradecimentos

Gostaria de agradecer o Marcus pelos anos de orientação e convivência que me ensinaram muito e pela oportunidade de estudar esse problema tão interessante. Obrigado também à FAPESP pelo apoio financeiro dado a mim e ao projeto sem o qual o trabalho não seria possível. Obrigado ao IFGW e seus funcionários pela infra-estrutura e apoio fornecidos.

Obrigado ao pessoal do Grupo de Sistemas Dinâmicos: Profa. Kyoko Furuya, Renato Angelo, Fernando Parísio, Marcel Novaes, Luís Coelho, Sabrina Salino e David Chinellato pelas discussões, seminários e ajudas. Um obrigado especial aos meus dois companheiros de sala: Alexandre D. Ribeiro e Julio G. Carvalho. Foi especial conviver com vocês dois! Obrigado também a Thiago R. de Oliveira pelas discussões sobre dissipação quântica que enriqueceram muito meu conhecimento sobre o assunto. Gostaria de agradecer meus colegas de pós-graduação nesse período pela convivência durante esses anos e por tudo o que ela proporcionou.

Quero agradecer também a Profa. Iris Torriani e o Prof. Carlos Giles que foram as pessoas que me iniciaram no trabalho científico. Meu obrigado também aos professores Roberto Luzzi, Carlos Escobar, Amir Caldeira, Guillermo Cabrera, Eduardo Miranda, Mário Foglio e George Kleiman pelas aulas, conversas e seminários que me ensinaram muito. Obrigado ao Prof. Klaus Richter e a Oleg Zaitsev pelo convite e pela colaboração durante os meses em Regensburg.

Muito obrigado também a Eduardo Bovo, Francisco Rouxinol, Eduardo Mattoso, Fabiano Nohama, Daniel Vogt e Elso Rigon pelos anos de convivência que para mim foram imprescindíveis em muitos sentidos.

Muito obrigado aos meus pais: Wilson e Rita, e aos meus irmãos: Fê, Tata e Du por tudo o que vocês fazem por mim. Muito obrigado mesmo! Obrigado à Raquel e aos meus amigos SMP de sempre: vocês são especiais!

Resumo

Neste trabalho, estudamos de que maneira e sob que condições um sistema caótico com apenas dois graus de liberdade produz efeitos irreversíveis como dissipação, termalização e, do ponto de vista quântico, perda de coerência em um sistema simples a ele acoplado. Na formulação clássica do problema, descrevemos analiticamente o comportamento do fluxo de energia em Resposta Linear e apontamos o ingrediente talvez principal que um sistema caótico possui para causar irreversibilidade: correlações que decaem exponencialmente. Mostramos que é possível descrever o equilíbrio assintótico inclusive com uma temperatura, o que é não-intuitivo em se tratando de sistemas pequenos. Esse último resultado completa o paralelo entre o movimento Browniano usual e o modelo proposto.

Formulamos o problema do ponto de vista quântico via o formalismo de Funcionais de Influência. Mostramos que este formalismo é mesmo adequado pois a influência do sistema caótico é descrita pelas contrapartidas quânticas das mesmas funções que encontramos na Resposta Linear clássica. Calculamos semiclassicamente essas funções e mostramos que os termos em mais baixa ordem da aproximação semiclassical evoluem conforme a dinâmica clássica caótica. As escalas de tempo da análise clássica se mostram fundamentais para a resolução dos cálculos assim como a análise semiclassical das funções de correlação. Mostramos que efeitos de dissipação e perda de coerência, no contexto quântico, são possíveis devido ao caráter caótico do sistema.

Abstract

We study here how and under which conditions a chaotic system with only two degrees of freedom can produce irreversible phenomena such as dissipation, thermalization and, from the quantum point of view, decoherence in a simple system coupled to it. In the classical formulation of the problem, we describe analytically the behavior of the energy flux in Linear Response regime and we point the main ingredient for a chaotic system to produce irreversible effects: correlations with exponential decay. We show that it is possible to describe the asymptotic equilibrium even with a temperature, which seems to be a counter intuitive result for systems with few degrees of freedom.

We formulate the problem from the quantum point of view using Influence Functionals approach. We show the formalism is very adequate since the chaotic system influence is described by quantum analogues of the same functions we obtain in the Linear Response approach to the classical problem. We calculate those functions semiclassically and we show the lowest order terms of the semiclassical approximation evolve as given by classical chaotic dynamics. The time scales of the classical analysis are shown to be very important for the resolution of the quantum problem as well as the semiclassical analysis of the correlation functions. We show that dissipative and decoherence effects, in the quantum regime, are possible due to the chaotic dynamics of the system.

Conteúdo

1	Introdução	3
1.1	Mecânica Estatística	3
1.2	Irreversibilidade e o Limite Termodinâmico	5
1.3	Caos na Mecânica Quântica	6
1.4	Mecânica Estatística na Mesoescala	7
1.5	Objetivos da Tese	7
1.6	Estrutura da Tese	8
2	Conceitos Preliminares	11
2.1	Teoria da Resposta Linear	11
2.1.1	Teorema Flutuação-Dissipação	16
2.2	Caos e Mecânica Estatística	17
3	O Movimento Browniano Clássico	21
3.1	Movimento Browniano como um Processo Estocástico	21
3.2	Banho Térmico de Osciladores	27
4	Abordagem Clássica	33
4.1	O Modelo	33
4.1.1	Potencial Nelson	34
4.1.2	Potencial Quártico	34
4.2	Resultados Numéricos	37
4.3	Resposta Linear	38
4.3.1	Potencial Nelson	41
4.3.2	Potencial Quártico	45
4.4	Tempos Longos e Equilíbrio Térmico	48

5	Abordagem Quântica	55
5.1	Formulação em Funcionais de Influência	55
5.2	Cálculo do Superpropagador	58
5.3	Funções de Correlação Semiclássicas	66
5.3.1	Abordagem via Matrizes Aleatórias	67
5.3.2	Abordagem via Integrais de Trajetória	68
6	Funções de Correlação Semiclássicas	71
7	A Dinâmica Quântica	79
7.1	Equações de Movimento	80
7.2	O Superpropagador	83
7.3	Escalas de Tempo e Descrição Física do Modelo	85
7.4	Propagação de Estados	86
7.4.1	Dissipação Quântica	86
7.4.2	Perda de Coerência	92
	Conclusões e Perspectivas	97
A	Teorema Flutuação-Dissipação	101
B	Cálculo de $J_k(\omega)$	105
C	Mudança de Coordenadas para SN e SQ	107
D	Teoria de Perturbação	109
E	Elemento de Matriz Semiclássico	113
F	Bilhares de Andreev	115
F.1	Introdução	115
F.2	Matriz S Semiclássica com Spin	116
F.3	Densidade de Estados Semiclássica	117
F.4	Cálculo Numérico de $d(E)$	119
F.5	Discussão.	120
	Bibliografia	123

Capítulo 1

Introdução

Nesta introdução, apresentamos as problemáticas que julgamos relacionadas ao assunto da tese. Na seção 1.1, iniciamos com uma discussão geral da Mecânica Estatística procurando situar o assunto da tese no contexto desta teoria. Na seção 1.2, a relação entre os processos irreversíveis e o limite termodinâmico é brevemente discutida. Na seção 1.3, a questão da instabilidade na Mecânica Quântica é apresentada e, na seção 1.4, abordamos a questão da necessidade de uma Mecânica Estatística para poucos graus de liberdade. Na seção 1.5, apresentamos então os objetivos deste trabalho e, na seção 1.6, a estrutura da tese.

1.1 Mecânica Estatística

Podemos afirmar que a Mecânica Estatística nasceu com os trabalhos de J.C. Maxwell, L. Boltzmann e J.W. Gibbs com o objetivo de estabelecer uma ponte entre o comportamento dinâmico microscópico e o termodinâmico. Em outras palavras, nos primórdios, a principal motivação era explicar o comportamento termodinâmico, tão bem conhecido dos experimentos e da fenomenologia, a partir do comportamento microscópico subjacente. Também na época de seu nascimento, a Mecânica Estatística se preocupava com sistemas de muitas partículas, cuja descrição microscópica, ou seja, do estado dinâmico, é (ou era) impossível de ser feita ao contrário da descrição em termos de grandezas macroscópicas como pressão, volume e temperatura feita pela Termodinâmica.

Um dos conceitos mais importantes da Mecânica Estatística é de equilíbrio termodinâmico. O equilíbrio termodinâmico é um estado em que um sistema se en-

contra tal que suas variáveis de estado termodinâmicas não mudam no tempo, ou seja, apesar de cada molécula de um gás, por exemplo, ter sua velocidade e posição mudando no tempo, no equilíbrio termodinâmico, isso acontece de tal forma que as grandezas macroscópicas praticamente não mudam. Nesse regime, a Mecânica Estatística conseguiu grande sucesso na proposta de fundamentar a Termodinâmica. A formulação da Mecânica Estatística do equilíbrio termodinâmico diz que as grandezas termodinâmicas são quantidades associadas ao comportamento médio do sistema como um todo, obtido através do método dos ensembles de Gibbs. No espírito deste método, construímos uma coleção de cópias do sistema físico em questão de tal forma que cada cópia possui um estado microscópico diferente, porém, respeitando alguns vínculos termodinâmicos como, por exemplo, o de terem todos a mesma energia. Nessa perspectiva, os valores das grandezas termodinâmicas no equilíbrio passam a ser interpretados como os mais prováveis e, por isso, constantes ao longo do tempo.

Podemos concluir dos comentários acima que a abordagem estatística introduzida para tratar a Termodinâmica se deve ao fato de não conhecermos a solução das equações de movimento microscópicas de um sistema de muitas partículas e, mais do que isso, de não termos acesso ao estado inicial de cada partícula do sistema para podermos resolver essas equações. Além disso, num certo sentido é irrelevante ter toda essa informação microscópica. No entanto, podemos afirmar que esse tipo de estratégia da Mecânica Estatística não está limitado a tratar sistemas de muitas partículas. De um modo mais geral, sempre que nos falta informação sobre um sistema, como no caso de um sistema de muitos corpos, em que não sabemos o estado inicial de cada partícula ou no caso de um sistema caótico, cuja grande sensibilidade às condições iniciais implica numa imprevisibilidade da evolução do estado, podemos aplicar o enfoque da Mecânica Estatística.

Apesar do sucesso no regime de equilíbrio, a situação na qual os sistemas estão fora do equilíbrio ainda requer muita compreensão e esforço na elaboração de abordagens teóricas (para introduções estimulantes sobre os problemas da Mecânica Estatística ver [1, 2]). A preocupação com fenômenos fora do equilíbrio vem desde Boltzmann com a elaboração de sua célebre equação de transporte. No caso destes fenômenos, procura-se descrever a evolução temporal dos valores médios, calcular coeficientes de transporte e encontrar regimes em que ocorrem fluxos constantes, também chamados de regimes estacionários. Portanto, a Mecânica Estatística se divide em duas grandes partes: a de equilíbrio e a de não-equilíbrio. A situação

de não-equilíbrio pode ter diferentes origens: desde acoplamentos do sistema a influências externas à preparação inicial do sistema numa condição fora do equilíbrio. O assunto que abordaremos nessa tese se encaixa no contexto de não-equilíbrio.

1.2 Irreversibilidade e o Limite Termodinâmico

A irreversibilidade dos fenômenos de não-equilíbrio, presente mesmo em um sistema isolado, sempre causou um certo desconforto por representar uma quebra de simetria que não decorre das equações de movimento microscópicas. A assim chamada "seta do tempo", representada pela segunda lei da Termodinâmica, tornou-se um impedimento para aqueles que tentavam, desde os primórdios da Mecânica Estatística, dar uma fundamentação essencialmente dinâmica para a Termodinâmica e seus princípios ou leis. Dentre estes, o próprio Boltzmann. Na sua tentativa de explicar a segunda lei da Termodinâmica, Boltzmann formulou o chamado Teorema H [3]. Para um sistema isolado constituído de um gás diluído de volume V , contendo N moléculas que interagem entre si via forças centrais repulsivas, Boltzmann mostrou que existe uma quantidade dependente do tempo, $H(t)$, que nunca aumenta no decorrer do tempo e que seu valor mínimo está ligado ao estado de equilíbrio termodinâmico do gás. Essa quantidade $H(t)$ é proporcional à densidade de partículas por unidade de volume espacial e de velocidade. Boltzmann derivou esse resultado usando, aparentemente, apenas resultados da Mecânica Clássica. Ele assumiu em sua derivação que as colisões no gás não teriam correlações entre si. Essa hipótese ficou conhecida como *hipótese do caos molecular* e foi apontada como o ingrediente não-mecânico colocado por Boltzmann.

Muitas críticas foram feitas a esse trabalho de Boltzmann. Em particular, a mais contundente foi feita por Zermelo [4] usando um resultado de Poincaré. Poincaré havia mostrado que um sistema limitado no espaço e em energia deve ter uma propriedade de recorrência. Em outras palavras, praticamente todo estado de um sistema mecânico isolado e limitado irá, depois de um certo tempo, voltar arbitrariamente próximo à sua condição inicial. Logo, se em parte desse movimento $H(t)$ diminui, na outra parte $H(t)$ aumenta. Boltzmann contra-argumentou que, para sistemas com muitas partículas, esse tempo de recorrência é muito maior que a idade do Universo e, portanto, não seria observado.

A derrota do enfoque dinâmico de Boltzmann levou a uma interpretação es-

tatística da irreversibilidade. O limite termodinâmico (grande número de partículas) passou a ser o responsável pela maior ocorrência de processos em que a entropia aumenta do que processos em que ela diminui. Nesse contexto, o papel da dinâmica ficou praticamente de lado até que surgissem a Teoria de Sistemas Caóticos e a Teoria Ergódica. Essa última, formalizou conceitos como *ergodicidade* e *mixing*, propostos inicialmente por Boltzmann e Gibbs, a partir da dinâmica e mostrou que, ao contrário dos estados, as distribuições ou densidades de certos sistemas mecânicos isolados e limitados não evoluem de forma recorrente no espaço de fase [5]. Estes resultados deram um novo impulso à abordagem dinâmica iniciada por Boltzmann e questionaram o papel do limite termodinâmico como único responsável pela irreversibilidade. Discussões recentes sobre o papel da dinâmica em processos de termalização podem ser encontradas em [6].

1.3 Caos na Mecânica Quântica

Se, por um lado, a Mecânica Estatística Clássica sofre influência de uma abordagem dinâmica através da Teoria Ergódica, do ponto de vista quântico, a situação ainda é bem diferente [7]. Uma Teoria Ergódica no contexto quântico ainda está no seu começo e a instabilidade dos estados clássicos ainda não tem (se tiver) um análogo quântico formulado. No contexto clássico, esta instabilidade presente nos sistemas caóticos é a fonte de propriedades como *mixing* e correlações que decaem no tempo. Estas propriedades são cruciais nos trabalhos que procuram encontrar uma origem dinâmica para processos dissipativos e irreversíveis [8, 9, 10, 11, 13, 12]. Portanto, se considerarmos esse ingrediente dinâmico crucial na descrição de processos irreversíveis, ao mesmo tempo deve ser crucial poder formulá-lo no contexto quântico.

A área de estudo de caos em Mecânica Quântica geralmente se concentra no regime semiclássico onde distribuições de níveis de energia, cicatrizes de autoestados e aproximações em termos de órbitas periódicas mostram uma influência da caoticidade do análogo clássico. As questões das evoluções temporais e da instabilidade foram deixadas um pouco a margem. Porém, há alguns anos, uma proposta feita por Peres [14] para a formulação da instabilidade no contexto quântico deu novo impulso a esse assunto.

1.4 Mecânica Estatística na Mesoescala

Como já foi apontado anteriormente, a Mecânica Estatística não está limitada a tratar sistemas de muitos graus de liberdade apenas. Além disso, atualmente, existe um enorme interesse em sistemas em meso e nanoescala cujo número de graus de liberdade envolvidos pode ser da ordem de centenas. Logo, existe uma demanda por um tratamento estatístico desses sistemas. A relaxação e descoerência de spin [15] e a relaxação intramolecular de energia em moléculas poliatômicas [16] são alguns exemplos de situações que requerem uma Mecânica Estatística aplicada a poucos graus de liberdade. Nessas situações, o reservatório ou ambiente externo ao qual um certo grau de liberdade de interesse está acoplado possui poucos graus de liberdade e portanto é influenciado pelo acoplamento. No caso macroscópico, assumimos em geral que o reservatório é grande o suficiente para não ser perturbado pela interação com o sistema. O ensemble canônico, escolha natural no contexto macroscópico, deve ser substituído por outro ensemble como, por exemplo, o microcanônico. Alguns trabalhos já começaram a abordar essas questões [17, 18, 19, 20] mostrando que efeitos geralmente associados a sistemas de muitas partículas também estão presentes no contexto de poucos graus de liberdade.

1.5 Objetivos da Tese

Motivados pelas problemáticas apresentadas nas seções anteriores, procuramos aqui dar uma contribuição para o entendimento das seguintes questões:

1. É possível que um sistema de poucos graus de liberdade, atuando como uma espécie de reservatório, provoque efeitos dissipativos tanto no contexto clássico como quântico? Se sim, quais são as condições para que isso ocorra?
2. Como formular esse problema, tanto classicamente quanto quanticamente, de forma a explicitar o efeito da dinâmica e do número de graus de liberdade?
3. Existe algum tipo de termalização para sistemas de poucos graus de liberdade? Se sim, quais seriam suas propriedades em comparação com o caso usual de muitas partículas?
4. Do ponto de vista puramente quântico, quais são os efeitos que esse sistema de poucos graus de liberdade produz? É possível que ele induza processos de

perda de coerência como no caso de reservatórios de muitos graus de liberdade? Se sim, quais seriam as grandezas que determinariam a escala de tempo desses processos?

Para estudar essas questões, escolhemos o seguinte modelo

$$H = H_o(z) + H_c(x, y) + V_I(x, z),$$

na qual, $H_o(z)$ é um oscilador harmônico e $V_I(x, z)$ é um potencial de interação entre H_o e H_c que, por fim, como será apresentado no próximo Capítulo, será um sistema caótico de dois graus de liberdade que fará o papel de reservatório.

1.6 Estrutura da Tese

Nos próximos capítulos, apresentaremos de que maneira as questões acima foram abordadas, quais os resultados obtidos e a discussão dos mesmos. Antes, porém, julgamos necessário apresentar alguns resultados já bem conhecidos na literatura como motivação mas, sobretudo, com o objetivo de introduzir o enfoque adotado para as questões específicas da tese.

No Capítulo 2, discutimos alguns conceitos preliminares como a Teoria da Resposta Linear e as relações que se pode estabelecer entre Caos e Mecânica Estatística. No Capítulo 3, abordamos o protótipo de um processo irreversível: o movimento Browniano clássico. Fazemos isso de duas maneiras: uma abordagem fenomenológica via processos estocásticos e outra a partir das equações de Hamilton de um modelo microscópico. Na primeira, procuramos derivar aqueles resultados com os quais queremos comparar nossos resultados. Na segunda, apresentamos como o modelo clássico formulado por Caldeira e Leggett [21, 22] descreve o movimento Browniano a partir de uma esquema "sistema de interesse+reservatório" que também adotaremos na seqüência. Do Capítulo 4 em diante, abordamos as questões, métodos e resultados da tese propriamente dita. No Capítulo 4, apresentamos nosso modelo de um oscilador harmônico acoplado a um sistema caótico de dois graus de liberdade que faz o papel de reservatório. Apresentamos a abordagem clássica e seus resultados, comparando-os com os do movimento Browniano usual. No Capítulo 5, apresentamos a abordagem quântica do mesmo modelo. Mostramos nesse capítulo que a formulação de Feynman e Vernon [23] explicita a influência da dinâmica do

reservatório de poucos graus de liberdade na evolução temporal do oscilador. No Capítulo 6, na linha do foi discutido na seção 1.3, procuramos mostrar em que medida funções de correlação quânticas apresentam efeitos da dinâmica caótica subjacente. No Capítulo 7, abordamos a evolução temporal do oscilador quântico sob a influência do sistema caótico. Efeitos de dissipação e perda de coerência são discutidos. Em seguida, apresentamos nossas conclusões. No apêndice F, apresentamos um resumo do trabalho fruto do estágio no exterior realizado durante o doutorado sobre transporte semiclássico em sistemas mesoscópicos. Apesar de ser um assunto correlato, não está diretamente relacionado com o tema da tese e por isso foi colocado como apêndice.

Capítulo 2

Conceitos Preliminares

Neste capítulo, conceitos preliminares necessários para o entendimento da proposta da tese serão apresentados. Na seção 2.1, apresentaremos a Teoria da Resposta Linear do ponto de vista clássico e a relação entre flutuações e dissipação provocada por essa teoria: o Teorema Flutuação-Dissipação. Na seção 2.2, apresentaremos alguns conceitos relacionados a sistemas caóticos e a relação entre estes sistemas e alguns problemas fundamentais na Mecânica Estatística de equilíbrio e não-equilíbrio.

2.1 Teoria da Resposta Linear

Uma das situações mais simples que poderíamos pensar de não-equilíbrio é a de um sistema que, inicialmente em equilíbrio, é ligeiramente perturbado por uma influência externa. Essa situação típica descrita pela Teoria da Resposta Linear, dentre tantas motivações, é a situação usual da medida feita no laboratório. Apresentaremos aqui uma versão simplificada da teoria e remetemos o leitor a [24, 2] para mais detalhes. Consideramos uma Hamiltoniana H_T tal que:

$$H_T = H + H_1, \tag{2.1}$$

na qual H_1 é uma perturbação em H geralmente tomada como

$$H_1 = -A(q, p)X(t), \tag{2.2}$$

na qual A é alguma função das coordenadas e momentos (q, p) de H e $X(t)$ é uma função do tempo. A equação dinâmica para qualquer distribuição ρ é a equação de

Liouville

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = i[L + L_1(t)]\rho(t), \quad (2.3)$$

na qual, considerando a mecânica clássica, os operadores de Liouville são dados por

$$\begin{aligned} iL\rho &= \sum \left(\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial \rho}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial \rho}{\partial q} \right) = \{H, \rho\} \\ iL_1\rho &= \sum \left(\frac{\partial H_1(t)}{\partial q} \frac{\partial \rho}{\partial p} - \frac{\partial H_1(t)}{\partial p} \frac{\partial \rho}{\partial q} \right) = \{H_1(t), \rho\}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

sendo que a soma é feita sobre todas as variáveis canônicas.

A equação (2.3) pode ser escrita na forma

$$\rho(t) = e^{i(t-t_0)L}\rho(t_0) + \int_{t_0}^t ds e^{i(t-s)L}iL_1(s)\rho(s). \quad (2.5)$$

Considerando que $\rho(t_0)$ é uma distribuição de equilíbrio (canônica ou microcanônica, por exemplo), ela permanece invariante com respeito a evolução sob H somente. Portanto, tomando os termos de ordem zero e primeira ordem em L_1 , (2.5) leva a

$$\rho(q, p; t) = \rho_e(q, p) + \int_{t_0}^t ds e^{i(t-s)L}\{H_1(s), \rho_e(q, p)\}, \quad (2.6)$$

onde ρ_e é a distribuição inicial de equilíbrio e $\rho(q, p; t)$ é a distribuição fora do equilíbrio até primeira ordem em $H_1(t)$.

O valor médio de alguma função $B(q, p)$ pode ser dado por

$$\langle B \rangle(t) = \int dqdp \rho_e(q, p)B(q, p) + \int_{t_0}^t ds \phi_{BA}(t-s)X(s), \quad (2.7)$$

na qual, a função $\phi_{BA}(t-s)$ é dada por

$$\phi_{BA}(t-s) = \int dqdp B(q, p)e^{i(t-s)L}\{-A(q, p), \rho_e(q, p)\}. \quad (2.8)$$

Reescrevendo a equação acima,

$$\begin{aligned} \phi_{BA}(t) &= \int dqdp B(q, p)e^{itL}\{-A(q, p), \rho_e(q, p)\} \\ &= \int dqdp \{\rho_e(q, p), A(q, p)\}B(q(t), p(t)), \end{aligned} \quad (2.9)$$

na qual $q(t) = e^{itL}q$ e $p(t) = e^{itL}p$. Finalmente,

$$\begin{aligned}\phi_{BA}(t) &= \int dqdp \rho_e(q, p) \{A(q, p), B(q(t), p(t))\} \\ &= \langle \{A(q, p), B(q(t), p(t))\} \rangle_e.\end{aligned}\quad (2.10)$$

$\phi_{BA}(t)$ é chamada de função resposta.

O nome "função resposta" é um nome sugestivo já que (2.7) tem a forma das soluções via função de Green que estamos acostumados em Mecânica ou Eletromagnetismo, sendo $\phi_{BA}(t)$ análoga a resposta do sistema a uma força impulsiva, no caso da Mecânica. A função $\phi_{BA}(t)$ é o principal objeto dessa teoria pois, de (2.7), percebe-se que, conhecendo $\phi_{BA}(t)$, conhecemos a evolução temporal do valor médio de B . Além disso, de (2.7) e (2.10), vemos que nosso problema de não-equilíbrio é inteiramente formulado em termos do estado de equilíbrio inicial e essa é a grande vantagem dessa teoria. Apesar da elegância do formalismo apresentado acima, a tarefa de calcular $\phi_{BA}(t)$ pode ser muito difícil. Na seção 2.1.1, entre outras coisas, apresentaremos uma maneira de solucionar esse problema.

A Teoria da Resposta Linear, assim como a Mecânica Estatística, usualmente é apresentada no contexto da descrição de sistemas de muitas partículas. No entanto, não há nada que impeça sua aplicação em sistemas de poucos graus de liberdade. A seguir, pretendemos discutir a relação dessa teoria com sistemas mecânicos lineares e não-lineares de poucos graus de liberdade. Isso será útil em capítulos posteriores. Como protótipo de um sistema mecânico linear, tomemos um oscilador harmônico perturbado

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \gamma xz(t).\quad (2.11)$$

Usando as equações de Hamilton, encontramos que $x(t)$ é dado por

$$\begin{aligned}x(t) &= x(0) \cos(\omega t) + \frac{p(0)}{m\omega} \sin(\omega t) - \gamma \int_0^t ds \frac{\sin[\omega(t-s)]}{m\omega} z(s), \\ x(t) &= x_d(t) - \gamma \int_0^t ds \chi(t-s) z(s),\end{aligned}\quad (2.12)$$

em que $x_d(t)$ é a solução sem a força externa e o segundo termo diz respeito a influência da força externa. $\chi(t)$ é a função de Green do oscilador harmônico definida como sendo a solução de

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = -\frac{\gamma}{m} \delta(t),\quad (2.13)$$

quando $x(0) = 0$ e $p(0) = 0$. A Hamiltoniana (2.11) tem a forma de (2.1) sendo $H_1 = \gamma xz(t)$. Então, podemos aplicar o formalismo da Teoria de Resposta Linear para calcular a evolução do valor médio de $x(t)$ quando o oscilador é perturbado por $\gamma xz(t)$. Portanto, de (2.7) e (2.10) temos

$$\langle x(t) \rangle = \int dx(0)dp(0)\rho_e(x(0), p(0))x(0) - \int_0^t ds \phi_{xx}(t-s)\gamma z(s), \quad (2.14)$$

$$\phi_{xx}(t-s) = \langle \{x_d(s), x_d(t)\} \rangle_e. \quad (2.15)$$

Definindo ρ_e como a distribuição microcanônica

$$\rho_e = \frac{\delta(E - H_o(x(0), p(0)))}{\Sigma(H_o(x(0), p(0)))} = \frac{\delta(E - H_o(x(0), p(0)))}{\int dx(0)dp(0) \delta(E - H_o(x(0), p(0)))}, \quad (2.16)$$

onde $H_o = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$, tem-se

$$\int dx(0)dp(0) \rho_e x(0) = 0, \quad (2.17)$$

pois $H_o(-x) = H_o(x)$. Para $\phi_{xx}(t)$, tem-se

$$\{x_d(s), x_d(t)\} = \frac{\partial x_d(s)}{\partial x(0)} \frac{\partial x_d(t)}{\partial p(0)} - \frac{\partial x_d(s)}{\partial p(0)} \frac{\partial x_d(t)}{\partial x(0)} = \frac{\sin[\omega(t-s)]}{m\omega}. \quad (2.18)$$

Logo,

$$\phi_{xx}(t-s) = \frac{\sin[\omega(t-s)]}{m\omega}. \quad (2.19)$$

Portanto, tem-se

$$\langle x(t) \rangle = -\gamma \int_0^t ds \frac{\sin[\omega(t-s)]}{m\omega} z(s). \quad (2.20)$$

A eq.(2.20) mostra que $\phi_{xx}(t)$ é igual a $\chi(t)$. Como $\chi(t)$ foi obtida para qualquer valor de γ , concluímos que, apesar do caráter perturbativo da Teoria da Resposta Linear, nesse caso, ela nos dá a resposta exata e completa do sistema mesmo na situação em que $\gamma xz(t)$ não é perturbativo. Pretendemos com isso exemplificar o fato de que, para sistemas cuja dinâmica microscópica é linear (e com um número arbitrário de graus de liberdade), a Teoria da Resposta Linear fornece o resultado exato da resposta do sistema mesmo fora do regime perturbativo. Além disso, o cálculo da função de Green é equivalente nesses casos.

A situação é diferente para sistemas não-lineares como, por exemplo, o pêndulo forçado cuja equação de movimento é

$$\ddot{\theta}(t) + \omega^2 \sin[\theta(t)] = -\gamma z(t). \quad (2.21)$$

Não é difícil ver que a resposta do pêndulo depende qualitativamente da intensidade da perturbação. Sabemos que, para amplitudes de oscilação suficientemente pequenas, o pêndulo se comporta como um oscilador harmônico. Logo, se a força externa induzir apenas oscilações dessa forma, o pêndulo responderá como um oscilador harmônico. Porém, à medida que aumentarmos a intensidade da força externa, efeitos não-lineares terão influência na resposta do pêndulo. Além disso, técnicas como a da função de Green, apesar de conceitualmente serem ainda válidas, não permitem o cálculo da resposta completa de um sistema não-linear. O cálculo analítico da função de resposta via (2.10) requer o conhecimento da solução das equações de movimento, o que também não é possível para todo sistema não-linear, o que mostra que a questão da resposta de sistemas não-lineares é bem mais complicada que o caso linear.

Abordamos até agora um aspecto da Teoria da Resposta Linear que é a descrição teórica de um processo de não-equilíbrio (evolução temporal de valores médios) dado uma dinâmica microscópica. Através dessa teoria, portanto, podemos prever o comportamento de valores médios e comparar com experimentos. O outro aspecto que gostaríamos de mencionar está relacionado com o processo inverso do mencionado acima. Imaginemos que temos um sistema cuja dinâmica não conhecemos. Aplicamos então a esse sistema um estímulo externo e medimos o valor médio de algum observável. Pela teoria apresentada até aqui, sabemos que, se a intensidade do estímulo for pequena o suficiente, o sistema responderá de forma linear e, uma vez que conhecemos o estímulo e medimos a evolução temporal do valor médio de um observável, podemos obter a função resposta do sistema e, portanto, ter acesso a sua dinâmica.

Nas situações experimentais, podemos controlar apenas algumas condições de estado macroscópico como temperatura, pressão e volume e não o estado microscópico particular. Logo, somente uma média sobre várias realizações experimentais, todas com os mesmos vínculos macroscópicos, terá sentido, já que uma única realização depende de um estado microscópico particular. Nesse espírito, a função resposta obtida será sempre uma grandeza média mesmo para sistemas com dinâmica linear já que, de (2.12), o efeito de um estado microscópico particular está sempre presente.

2.1.1 Teorema Flutuação-Dissipação

Sejam as funções resposta clássica, $\phi(t)$, e quântica, $\Phi(t)$, dadas por

$$\phi(t) = \langle \{A(0), A(t)\} \rangle_e, \quad (2.22)$$

$$\Phi(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}(0), \hat{A}(t)] \rangle_e, \quad (2.23)$$

na qual $\hat{A}(t)$ são operadores na representação de Heisenberg, e as funções de correlação clássica, $c(t)$, e quântica, $C(t)$,

$$c(t) = \langle A(0)A(t) \rangle_e, \quad (2.24)$$

$$C(t) = \frac{1}{2} \langle \hat{A}(0)\hat{A}(t) + \hat{A}(t)\hat{A}(0) \rangle_e, \quad (2.25)$$

O Teorema Flutuação-Dissipação [24, 2] diz que (ver apêndice A para uma derivação simplificada)

$$c(\omega) = \frac{k_B T}{\omega} \phi''(\omega) \quad (2.26)$$

$$C(\omega) = \frac{\hbar}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \Phi''(\omega) \quad (2.27)$$

nas quais $f(\omega)$ é definido por

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} f(t). \quad (2.28)$$

e $f''(\omega)$ é a parte imaginária de $f(\omega)$.

Como as funções (2.24) e (2.25) estão relacionadas com as flutuações do sistema no equilíbrio e as funções resposta com a dissipação [24, 2], o nome Teorema Flutuação-Dissipação resume bem o sentido das relações (2.26) e (2.27). Esse teorema é uma consequência direta da Teoria da Resposta Linear. Apesar de toda a importância desse teorema [25, 26, 27], vamos nos ater apenas ao fato de que ele representa uma maneira mais simplificada de se obter a função resposta. Do ponto de vista quântico, pode não representar um avanço pois conhecer a função resposta ou a função de correlação implica no conhecimento dos mesmos observáveis. Do ponto de vista clássico, porém, a função resposta envolve o cálculo do valor médio de um parêntese de Poisson, o que é muito mais complicado do que o valor médio de um produto. Esse último pode ser obtido por cálculos numéricos em certas situações.

2.2 Caos e Mecânica Estatística

No contexto de sistemas Hamiltonianos, podemos afirmar que caos é o comportamento extremamente irregular e instável que ocorre em sistemas não-integráveis tais que trajetórias inicialmente vizinhas no espaço de fase se afastam exponencialmente. Um resultado muito importante dessa área é o Teorema KAM [28] que afirma que à medida que perturbamos um sistema Hamiltoniano integrável de maneira a deixá-lo não-integrável, as regiões de estabilidade vão sendo destruídas gradativamente a medida que a intensidade da perturbação cresce. Para exemplificar este tipo de comportamento, apresentamos as seções de Poincaré dos sistemas abaixo

$$H = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 + 0.1 \frac{x^2}{2}, \quad (2.29)$$

$$H = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{x^2 y^2}{2} + \frac{a}{4} (x^4 + y^4). \quad (2.30)$$

A Hamiltoniana (2.29) é conhecida como Sistema Nelson (SN) [29] e vamos nos referir a (2.30) como Sistema Quártico (SQ)[30]. As seções de Poincaré são planos que seccionam o espaço de fase de maneira a "tirar um retrato" sem ambigüidades do espaço de fase [28]. Na figura 2.1, mostramos algumas seções de Poincaré de SN. Vemos na figura 2.1a, que SN exhibe um espaço de fase muito regular com uma estrutura de tóros ainda presente. Este caso, como mencionamos acima, seria aquele em que os termos de (2.29) responsáveis pela não-integrabilidade ainda não conseguem, aparentemente, destruir as constantes de movimento da parte integrável. Na figura 2.1b, temos um situação intermediária em que regiões de instabilidade (regiões pontilhadas) e regiões de estabilidade coexistem. Chamamos essa situação de dinâmica mista. Já na figura 2.1c, o espaço de fase todo parece ter sido tomado por trajetórias instáveis. O SN exhibe comportamento praticamente regular para energias tais que $E \lesssim 0.05$, fortemente caótico para $E \gtrsim 0.3$ e misto para valores intermediários. Na Figura 2.2, o mesmo é apresentado para SQ. O SQ é invariante sob uma transformação de escala das coordenadas e do tempo, o que implica que a dinâmica é equivalente para qualquer valor de energia. O SQ é integrável para $a = 1.0$, fortemente caótico para $a \lesssim 0.1$ e misto para valores intermediários de a .

A importância desses sistemas para a Mecânica Estatística remonta a Boltzmann e Gibbs. Tanto o primeiro, com as hipóteses ergódica e de caos molecular, quanto o último, com o conceito de mixing, nos primórdios da Mecânica Estatística, inauguraram uma área hoje chamada de Teoria Ergódica que procura, basicamente, justificar

e fundamentar as bases daquela em termos de propriedades, digamos, estatísticas de sistemas dinâmicos (ver [7] para uma introdução sobre o assunto). Essecialmente, a Teoria Ergódica estuda a evolução temporal de distribuições ou densidades submetidas a uma certa dinâmica. Ou seja, dado um sistema dinâmico, ao invés de estudar a evolução temporal de um estado particular, o que é muito difícil no caso de sistemas caóticos, estuda-se a evolução temporal de distribuições ou densidades de estados. Freqüentemente, para sistemas instáveis do ponto de vista da evolução dos estados, as distribuições evoluem de maneira muito regular. Os sistemas dinâmicos que satisfazem rigorosamente, por exemplo, o critério de levar um tempo t_A proporcional a área μ_A para percorrer uma região A do espaço de fase são chamados de ergódicos. A eles podemos, rigorosamente, aplicar a hipótese da Mecânica Estatística de que todos os estados microscópicos têm o mesmo peso estatístico. Outra categoria de sistemas é a daqueles que apresentam mixing (todos esses sistemas também são ergódicos). Nesse tipo de sistema, qualquer distribuição inicial no espaço de fase evolui para uma distribuição uniforme [5]. Este tipo de evolução parece imitar o processo de tendência ao equilíbrio amplamente observado na natureza, justificado pela segunda lei da Termodinâmica mas pouco fundamentado e entendido do ponto de vista teórico. Existem ainda outras categorias mais elaboradas tentando justificar a origem dinâmica do aumento da entropia [5].

É importante mencionar alguns desdobramentos decorrentes dessa interação entre Mecânica Estatística e sistemas dinâmicos. Prigogine, diante do fato de que a maioria dos sistemas Hamiltonianos são caóticos e, portanto, instáveis, argumenta que devemos desistir da descrição tradicional em termos da evolução de estados individuais e adotar uma descrição em termos de distribuições apenas [13]. Para Prigogine, a instabilidade dinâmica dos estados associada a um tratamento estatístico é o que dá origem à irreversibilidade. Outra área recente de estudo tem se dedicado a conectar propriedades dinâmicas de um sistema, como expoentes de Lyapunov e entropias de Kolmogorov-Sinai, com quantidades macroscópicas de transporte, realizando uma abordagem dinâmica para tratar situações fora do equilíbrio [31]. E por último, gostaríamos de mencionar a abordagem de Tsallis a problemas de não-extensividade em Mecânica Estatística via sistemas dinâmicos [32].

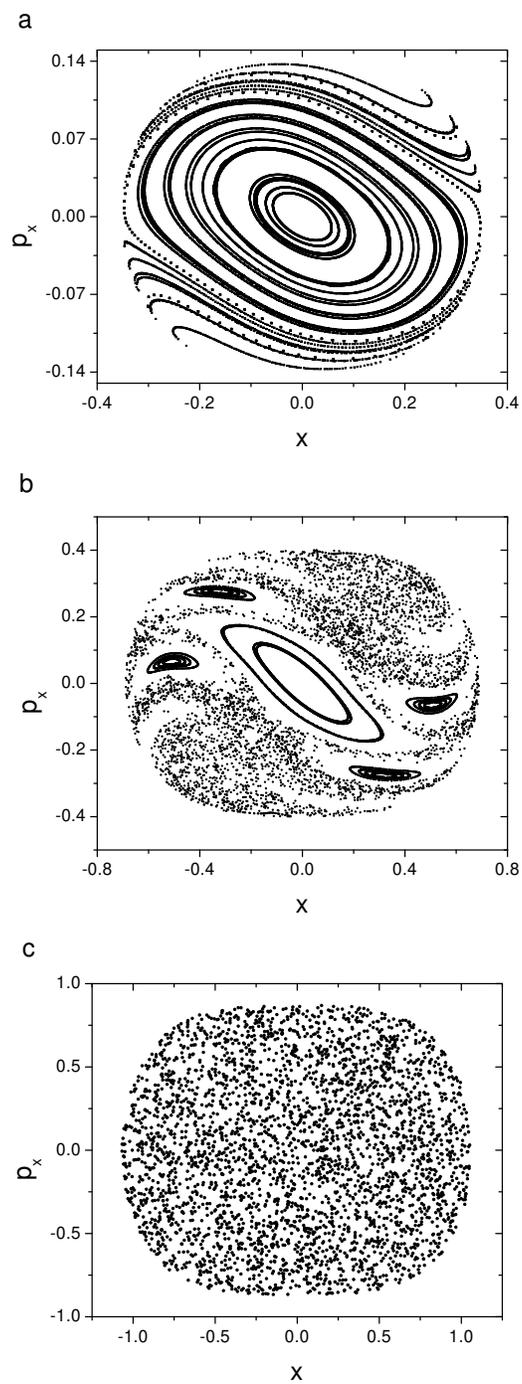


Figura 2.1: Seções de Poincaré para SN. (a) $E = 0.01$, (b) $E = 0.08$ e (c) $E = 0.38$.

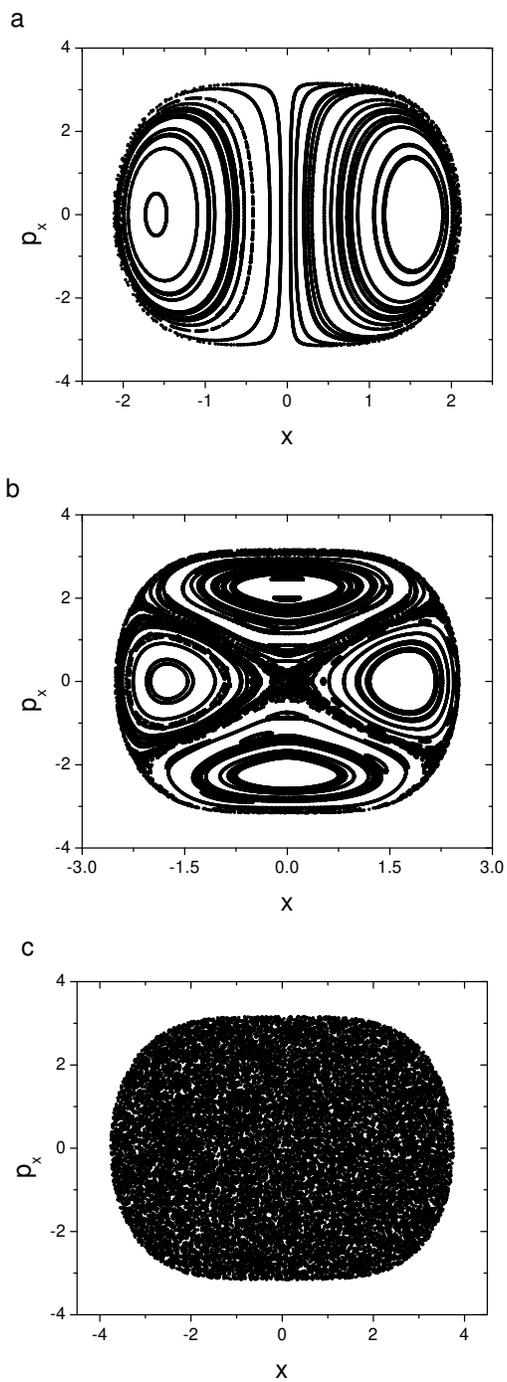


Figura 2.2: Seções de Poincaré para SQ. (a) $a = 1.0$, (b) $a = 0.5$ e (c) $a = 0.01$.

Capítulo 3

O Movimento Browniano Clássico

Neste capítulo, o movimento Browniano clássico será abordado sob dois pontos de vista. O primeiro, na seção 3.1, tem o intuito de apresentar as idéias mais básicas e alguns dos resultados fundamentais relacionados ao movimento Browniano e que serão necessários posteriormente. Na seção 3.2, o modelo clássico de Caldeira-Leggett é apresentado como uma tentativa de descrição do movimento Browniano a partir de uma dinâmica subjacente. Uma revisão recente sobre a importância do movimento Browniano e seus aspectos atuais pode ser encontrada em [33].

3.1 Movimento Browniano como um Processo Estocástico

O movimento Browniano, observado primeiramente pelo botânico R. Brown [34] em grãos de pólen suspensos em um fluido e posteriormente estudado inclusive por A. Einstein [35], tem uma história de grande importância na Física. Em particular, tornou-se o protótipo de um processo irreversível, ajudando a compreender fenômenos mais complicados de não-equilíbrio.

Vamos nos ater ao caso mais simples que é o unidimensional. A equação que descreve a dinâmica da coordenada da partícula Browniana é a equação de Langevin [36]

$$m\ddot{x} + 2m\gamma\dot{x} + V'(x) = F(t), \quad (3.1)$$

na qual m é a massa da partícula Browniana, x a coordenada desta e $V(x)$ o potencial

externo. Essa equação nos diz que a interação com o fluido produz dois efeitos: (1) uma força dissipativa $2m\gamma\dot{x}$ e (2) uma força chamada flutuante $F(t)$. Fica claro que tanto γ quanto $F(t)$ estão associadas ao fluido. Essas duas quantidades são modeladas de maneira a descreverem o que se observa, e por isso, chamamos esse modelo de fenomenológico. Em geral, $F(t)$ é modelada como um processo estocástico Gaussiano estacionário [37, 38, 39] tal que

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad (3.2)$$

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 4m\gamma k_B T \delta(t - t'). \quad (3.3)$$

na qual k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura e $\langle \cdot \rangle$ a média estatística. Como veremos na seqüência, o coeficiente de (3.3), $4m\gamma k_B T$, assume que a partícula interage com um sistema em equilíbrio térmico. Considerando um potencial externo harmônico, $V(x) = m\omega_0^2 x^2/2$, e uma situação de sub-amortecimento, a solução de (3.1) é dada por

$$\begin{aligned} x(t) = & x(0) \left[e^{-\gamma t} \cos(\omega t) + \frac{\gamma}{\omega} e^{-\gamma t} \sin(\omega t) \right] \\ & + \frac{p_x(0)}{m\omega} e^{-\gamma t} \sin(\omega t) + \int_0^t ds e^{-\gamma(t-s)} \frac{\sin[\omega(t-s)]}{m\omega} F(s), \end{aligned} \quad (3.4)$$

na qual $\omega^2 = \omega_0^2 - \gamma^2$.

Como $F(t)$ é uma força aleatória, só tem sentido observar o comportamento de grandezas médias em $F(t)$ como, por exemplo, $\langle x(t) \rangle$

$$\langle x(t) \rangle = x(0) \left[e^{-\gamma t} \cos(\omega t) + \frac{\gamma}{\omega} e^{-\gamma t} \sin(\omega t) \right] + \frac{p_x(0)}{m\omega} e^{-\gamma t} \sin(\omega t), \quad (3.5)$$

que vai a zero quando $t \rightarrow \infty$. A variância de $x(t)$ é outra grandeza importante pois define o grau de incerteza na posição da partícula

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = & \\ & \frac{k_B T}{m} \frac{e^{-2\gamma t}}{\gamma^2 + \omega^2} \left\{ e^{2\gamma t} - \left[1 + \frac{\gamma^2}{\omega^2} \right] + \frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos(2\omega t) - \frac{\gamma}{\omega} \sin(2\omega t) \right\}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

que assintoticamente fica

$$\lim_{t \rightarrow \infty} [\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2] = \frac{k_B T}{m\omega_0^2}, \quad (3.7)$$

e que para tempos curtos, ou $\gamma/\omega \ll 1$, é dada por

$$\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \approx 2 \frac{\gamma k_B T}{m\omega^2} t, \quad (3.8)$$

na qual $\frac{\gamma k_B T}{m\omega^2}$ faz o papel de constante difusiva.

É interessante analisar também o comportamento da energia da partícula Browniana. De maneira a simplificar os cálculos, seja $x(0) = 0$. Então, tem-se

$$x(t) = x_d(t) + \int_0^t ds \chi(t-s)F(s), \quad (3.9)$$

$$p_x(t) = p_{x_d}(t) + \int_0^t ds \Gamma(t-s)F(s), \quad (3.10)$$

nas quais

$$x_d(t) = \frac{p_x(0)}{m\omega} e^{-\gamma t} \sin(\omega t), \quad (3.11)$$

$$p_{x_d}(t) = p_x(0) e^{-\gamma t} \left[\cos(\omega t) - \frac{\gamma}{\omega} \sin(\omega t) \right], \quad (3.12)$$

e

$$\chi(t-s) = e^{-\gamma(t-s)} \frac{\sin(\omega t)}{m\omega}, \quad (3.13)$$

$$\Gamma(t-s) = e^{-\gamma(t-s)} \left\{ \cos[\omega(t-s)] - \frac{\gamma}{\omega} \sin[\omega(t-s)] \right\}. \quad (3.14)$$

A energia é dada por

$$E(t) = \frac{p_x^2(t)}{2m} + \frac{m\omega_0^2 x^2(t)}{2}. \quad (3.15)$$

Logo,

$$\begin{aligned} E(t) &= E_d(t) + \frac{p_{x_d}(t)}{m} \int_0^t ds \Gamma(t-s)F(s) + m\omega_0^2 \int_0^t ds \chi(t-s)F(s) \\ &+ \int_0^t ds \int_0^t d\tau \left[\frac{1}{2m} \Gamma(t-s)\Gamma(t-\tau) + \frac{m\omega_0^2}{2} \chi(t-s)\chi(t-\tau) \right] F(s)F(\tau), \end{aligned} \quad (3.16)$$

na qual,

$$\begin{aligned} E_d(t) &= \frac{p_{x_d}^2(t)}{2m} + \frac{m\omega_0^2 x_d^2(t)}{2} \\ &= E(0) e^{-2\gamma t} \left\{ 1 + 2\frac{\gamma}{\omega} \sin(\omega t) \left[\frac{\gamma}{\omega} \sin(\omega t) - \cos(\omega t) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

pois $p_x(0) = (2mE(0))^{1/2}$.

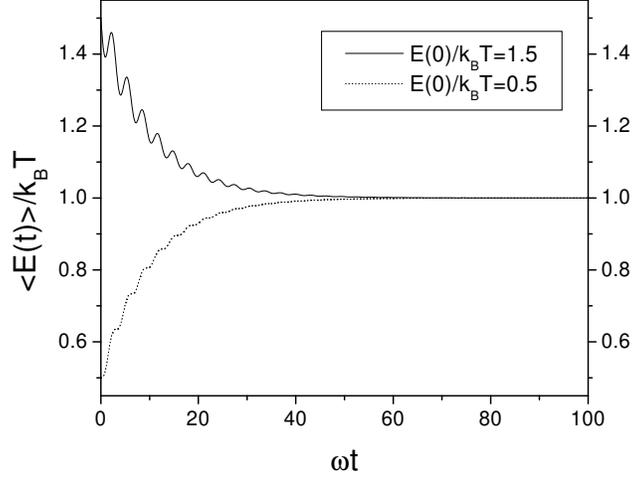


Figura 3.1: Evolução temporal de $\langle E(t) \rangle$ dada por (3.18) para $\gamma/\omega = 0.005$.

Nota-se que $E(t)$ é constituída por um termo que decai a zero, $E_d(t)$, e por outros dois que dependem da força flutuante. Logo, só o comportamento dos seus valores médios têm sentido. Tomando a média na força flutuante em (3.16) e usando (3.2) e (3.3), a energia média é dada por

$$\langle E(t) \rangle = E_d(t) + k_B T e^{-2\gamma t} \left[\frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos(2\omega t) - \left(1 + \frac{\gamma^2}{\omega^2} - e^{2\gamma t} \right) \right]. \quad (3.18)$$

Como $E_d(t)$ tende a zero, $\langle E(t) \rangle$ tende assintoticamente a $k_B T$. Na figura 3.1, pode-se observar o comportamento de (3.18) para diferentes valores de $E(0)$. Dizemos que para qualquer valor de $E(0)$, a partícula Browniana sempre termaliza numa energia $k_B T$. Em outras palavras, a partícula inicialmente com $E(0) \neq k_B T$ está em uma situação de não-equilíbrio e o efeito da dissipação e das flutuações é levá-la, irreversivelmente, a um estado de equilíbrio.

Cabe aqui um comentário sobre o papel da média. Como já foi dito, o comportamento aleatório de $F(t)$ não permite compararmos (3.16) a uma única realização experimental de $E(t)$. As quantidades que podemos e devemos comparar são $\langle E(t) \rangle$ e a média sobre várias realizações experimentais de $E(t)$ todas com o mesmo valor de $E(0)$. Para que fique mais claro, tomemos o exemplo de um pêndulo macroscópico de massa $50g$ preso a uma corda de $30cm$ e oscilando com pequenas amplitudes de forma que o movimento seja harmônico. Coloquemos este pêndulo num ambiente

com ar a uma temperatura de $300K$. Podemos descrever o movimento desse pêndulo usando (3.1), admitindo que o contato com as moléculas de ar provocarão uma força dissipativa e uma flutuante. Porém, sabemos da experiência diária que não precisamos de muitas realizações para observar que, depois de algumas oscilações, o pêndulo "pára" na posição vertical. Como reconciliar este fato com os resultados obtidos de (3.1) descritos acima? Ora, calculemos a velocidade que este pêndulo teria quando termaliza em $k_B T$

$$\frac{mv^2}{2} = k_B T \Rightarrow v = \left(\frac{2k_B T}{m} \right)^{1/2}. \quad (3.19)$$

Usando os valores $50g$, $300K$ e o valor de k_B , tem-se

$$v \approx 4\text{Å}/s, \quad (3.20)$$

que é muito menor que a velocidade típica de oscilação do pêndulo. Ou seja, para o pêndulo descrito acima, as flutuações devido a $F(t)$ são tão pequenas comparadas às grandezas típicas do pêndulo que os respectivos termos em (3.4) e (3.16), por exemplo, são desprezíveis e observamos apenas $E_a(t)$ e $x_a(t)$. Contudo, se reduzirmos a massa de tal forma que ela seja comparável à massa típica das moléculas do ar ou aumentarmos a temperatura de tal forma que $k_B T$ seja comparável a $E(0)$, as flutuações devido a $F(t)$ serão muito mais relevantes e não observaremos, em uma única realização experimental, um movimento regular e monotônico do pêndulo. Será necessário uma média em várias realizações para podermos observar o processo de termalização.

Como foi comentado anteriormente, a dissipação e as flutuações sobre a partícula Browniana são fundamentais para produzir termalização. Na verdade, como já foi mostrado, em um certo regime, esses dois efeitos estão ligados. Essa relação é chamada de Teorema Flutuação-Dissipação. Discutiremos agora uma outra abordagem do Teorema Flutuação-Dissipação que envolve a generalização da equação de Langevin. Como apontado por Kubo em [39], a formulação do movimento Browniano em termos de (3.1) envolve três hipóteses

1. $F(t)$ é um processo estocástico estacionário e Gaussiano.
2. Ele possui um tempo de correlação infinitamente pequeno, isto é

$$\langle F(t_1)F(t_2) \rangle \propto \delta(t_1 - t_2). \quad (3.21)$$

3. O movimento Browniano se dá num meio em equilíbrio térmico.

Esta última hipótese leva à definição de (3.3). Kubo aponta que podemos flexibilizar essas hipóteses da seguinte maneira:

- (a) A força aleatória $F(t)$ pode não ser necessariamente Gaussiana.
- (b) O tempo de correlação de $F(t)$ pode ser finito, ou, em outras palavras, ter um espectro que não seja constante para todas as frequências (chamado espectro branco).
- (b') A fricção pode depender do tempo.
- (c) A equação pode ser não-linear.

Kubo mostra que (b) implica em (b') e essa é uma das formas do Teorema Flutuação-Dissipação. Isto é feito a partir da equação de Langevin generalizada com $V(x) = 0$

$$\ddot{x}(t) + \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{x}(s) = \frac{F(t)}{m}, \quad t > 0. \quad (3.22)$$

Assumindo que $\langle F(t) \rangle$ e $\langle \dot{x}(0)F(t) \rangle = 0$ para $t > 0$, tem-se

$$\gamma(\omega) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \gamma(t) = \frac{1}{mk_B T} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle F(0)F(t) \rangle, \quad (3.23)$$

que mostra a relação entre a dissipação e a força flutuante. Remetemos o leitor a [24, 25] para mais detalhes. Dessa forma, nota-se que uma força dissipativa dependente do tempo não pode ser introduzida sem ao mesmo tempo abandonarmos a hipótese de espectro branco para $F(t)$ e vice-versa. A eq.(3.22) aparecerá novamente nos próximos capítulos em uma situação similar.

Com isso encerramos essa breve introdução sobre o movimento Browniano e remetemos o leitor a [39, 37, 38] para mais informações e detalhes sobre esta abordagem estocástica. Na próxima seção, retomamos o movimento Browniano de um ponto de vista menos fenomenológico.

3.2 Banho Térmico de Osciladores

Nos modelos fenomenológicos como os descritos anteriormente nos quais usamos a equação de Langevin, não temos um entendimento claro da origem microscópica da dissipação. Sabemos apenas que a partícula interage com algum sistema em equilíbrio térmico. Uma possibilidade é tentar modelar de forma simples o reservatório térmico e a partícula Browniana escrevendo suas Lagrangeanas (Hamiltonianas) de forma que as equações de movimento resultantes gerem um equação similar a de Langevin para a dinâmica da partícula. Apresentaremos aqui um modelo que faz isso desenvolvido por Caldeira e Leggett [21, 22, 62] para o tratamento do movimento Browniano quântico.

A fim de que o problema seja tratável, iremos impor a restrição de que qualquer grau de liberdade do reservatório seja fracamente perturbado pela interação com a partícula. Isto nos permite descrever o reservatório na aproximação harmônica, na qual o consideramos como um conjunto de osciladores. No caso de um reservatório com um número de graus de liberdade bem maior que o da partícula, esta restrição é razoável, porém, não implica que a dissipação seja fraca. Neste sentido, como discutido no Capítulo 2, estamos considerando somente a resposta linear do reservatório. No próximo capítulo discutiremos a Teoria de Resposta Linear e esse comentário ficará mais claro. Além disso, restringeremo-nos ao caso em que o acoplamento sistema-reservatório é linear nas coordenadas do reservatório. Sob estas condições, o sistema composto será descrito pela seguinte Lagrangeana

$$L = L_s + L_I + L_R, \quad (3.24)$$

com

$$L_S = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V_0(x), \quad (3.25)$$

$$L_I = - \sum_k C_k x q_k, \quad (3.26)$$

e

$$L_R = \sum_k \left\{ \frac{1}{2}m_k \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2}m_k \omega_k^2 q_k^2 \right\}, \quad (3.27)$$

onde L_S , L_R e L_I são, respectivamente, as Lagrangeanas da partícula, do reservatório e de interação. A interação é do tipo coordenada-coordenada em que cada oscilador

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

Derivando as equações de movimento da Lagrangeana proposta, obtemos

$$m\ddot{x}(t) + V'_0(x(t)) = - \sum_{k=1}^N C_k q_k(t), \quad (3.28)$$

$$m_k \ddot{q}_k(t) + m_k \omega_k^2 q_k(t) = -C_k x(t). \quad (3.29)$$

Estamos interessados na dinâmica efetiva do sistema L_s devido ao acoplamento com o banho de osciladores. Por isso, vamos resolver as equações dos osciladores do banho. Aplicando a transformada de Laplace em (3.29), tem-se

$$q_k(t) = q_k(0) \cos(\omega_k t) + \frac{\dot{q}_k(0)}{\omega_k} \sin(\omega_k t) - \frac{C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t ds \sin[\omega_k(t-s)] x(s), \quad (3.30)$$

$$q_k(t) = q_k^d(t) - \frac{C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t ds \sin[\omega_k(t-s)] x(s) \quad (3.31)$$

na qual, $q_k^d(t)$ chamamos de solução desacoplada e reconhecemos

$$\chi_k(t) = \frac{\sin(\omega_k t)}{m_k \omega_k} \quad (3.32)$$

como a função resposta ou susceptibilidade dinâmica do oscilador k devido a força externa $C_k x(t)$. Podemos reescrever (3.31) integrando o último termo por partes

$$q_k(t) = q_k^d(t) - \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} x(t) + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t) x(0) + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} \int_0^t ds \cos[\omega_k(t-s)] \dot{x}(s). \quad (3.33)$$

Dessa maneira, a equação de movimento para o sistema L_s fica

$$m\ddot{x}(t) + \left[V'_0(x) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} x(t) \right] + \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \int_0^t ds \cos[\omega_k(t-s)] \dot{x}(s) = - \sum_{k=1}^N C_k q_k^d(t) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t) x(0). \quad (3.34)$$

Vemos, portanto, que o acoplamento com o banho de osciladores causa três efeitos: uma correção harmônica ao potencial V_0 , um termo de convolução com a velocidade $\dot{x}(t)$ e uma força dependente do tempo. Se reescrevermos a Lagrangeana do sistema todo como

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V_0(x) + \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{1}{2}m_k\dot{q}_k^2 - \frac{1}{2}m_k\omega_k^2 \left[q_k + \frac{C_k}{m_k\omega_k^2}x \right]^2 \right\}, \quad (3.35)$$

podemos cancelar o termo de correção harmônica, deixando os outros termos inalterados, e considerar $V_0(x)$ como o potencial efetivo que atua na partícula e que irá modelar o potencial real de um possível sistema físico que seja comparado com a descrição desse modelo. Existem, porém, outras formas de contornar essa correção harmônica [22].

Reescrevendo a equação (3.34), temos

$$m\ddot{x}(t) + V_0'(x) + \int_0^t ds \gamma(t-s)\dot{x}(s) = f(t), \quad (3.36)$$

na qual

$$\gamma(t-s) = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k\omega_k^2} \cos[\omega_k(t-s)] \quad (3.37)$$

e

$$f(t) = - \sum_{k=1}^N C_k q_k^d(t) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k\omega_k^2} \cos(\omega_k t) x(0) \quad (3.38)$$

Chegamos, então, a uma equação na forma da equação de Langevin generalizada com a força $f(t)$ dependendo das condições iniciais do reservatório e da posição inicial $x(0)$. Vamos mostrar agora que a função $\gamma(t)$ está relacionada com uma grandeza física importante do banho e que chamaremos $J(\omega)$ definida por

$$J(\omega) = \text{Im}[\mathcal{F}\{\chi^r(t-s)\}], \quad (3.39)$$

na qual $\text{Im}[\cdot]$ denota a parte imaginária de, $\mathcal{F}\{\cdot\}$ a transformada de Fourier e $\chi^r(t-s)$ é, como comentado na seção 2.1, a susceptibilidade dinâmica retardada ou função resposta do banho dada por

$$\chi^r(t-s) = -\Theta(t-s) \left\langle \left\{ \sum_k C_k q_k^d(t), \sum_{k'} C_{k'} q_{k'}^d(s) \right\} \right\rangle, \quad (3.40)$$

em que $\langle \cdot \rangle$ denota o valor médio no ensemble canônico, $\{, \}$ o parêntese de Poisson e $q_k^d(t)$ a solução do oscilador harmônico livre, dada por (3.30) e (3.31). Por estar relacionada com a resposta do banho a uma perturbação externa, $J(\omega)$ pode ser obtida experimentalmente e através dela podemos fazer a conexão com o sistema físico que estamos modelando. Podemos reescrever $J(\omega)$ em função da resposta (3.32) de cada oscilador do banho, pois, como os osciladores são independentes, de (3.40) temos

$$\chi^r(t-s) = -\Theta(t-s) \sum_{k=1}^N C_k^2 \langle \{q_k^d(t), q_k^d(s)\} \rangle \quad (3.41)$$

$$= \Theta(t-s) \sum_{k=1}^N C_k^2 \chi_k(t-s). \quad (3.42)$$

Logo, $J(\omega)$ fica (ver apêndice B)

$$J(\omega) = \sum_{k=1}^N C_k^2 J_k(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k), \quad (3.43)$$

na qual,

$$J_k(\omega) = \text{Im}[\mathcal{F}\{\Theta(t-s)\chi_k(t-s)\}] \quad (3.44)$$

Portanto, podemos escrever $\gamma(t-s)$ como

$$\gamma(t-s) = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos[\omega_k(t-s)] = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega(t-s)]. \quad (3.45)$$

Vamos agora assumir que o reservatório tem um contínuo de osciladores. Dessa maneira podemos assumir uma forma funcional contínua para $J(\omega)$. Essa forma será

$$J(\omega) = \eta \omega \Theta(\omega_c - \omega). \quad (3.46)$$

A frequência ω_c , chamada de frequência de corte, estabelece a escala de tempo do problema. Estaremos interessados em tempos muito maiores que ω_c^{-1} . Esse corte é necessário para evitar algumas divergências, já que, fisicamente, $J(\omega)$ deve ir a zero no limite $\omega \rightarrow \infty$ [41]. Substituindo (3.46) em (3.45), e admitindo que $\omega_c \gg \omega$, temos

$$\gamma(t-s) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \eta \cos[\omega(t-s)] \approx 2\eta \delta(t-s). \quad (3.47)$$

Logo,

$$\int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{x}(s) \approx 2\eta \int_0^t ds \delta(t-s) \dot{x}(s) = 2\eta \dot{x}(t). \quad (3.48)$$

Vemos, portanto, que a forma (3.46) gera um termo de dissipação simples independente do tempo. Além disso, vamos mostrar que esta forma para $J(\omega)$ também reproduz os resultados fenomenológicos para a força $f(t)$. Lembrando que

$$\langle q_k(0) \rangle = \langle \dot{q}_k(0) \rangle = \langle q_{k'}(0) \dot{q}_k(0) \rangle = 0, \quad (3.49)$$

$$\langle q_k(0) q_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k \omega_k^2} \delta_{kk'} \quad \text{e} \quad \langle \dot{q}_k(0) \dot{q}_{k'}(0) \rangle = m_k k_B T \delta_{kk'}, \quad (3.50)$$

o primeiro termo de (3.38), $F(t) = \sum_{k=1}^N C_k q_k^d(t)$, é, usando (3.45), tal que

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle F(t) F(s) \rangle = 2\eta k_B T \delta(t-s), \quad (3.51)$$

nais quais, $\langle \cdot \rangle$ denota a média no ensemble canônico. Vemos que $F(t)$ tem justamente as propriedades fenomenológicas da força flutuante definida na seção anterior. Já o segundo termo fica, usando (3.45) e (3.47),

$$x(0) \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos(\omega_k t) \approx 2\eta x(0) \delta(t) \quad (3.52)$$

Podemos mostrar que esta força impulsiva apenas muda uma fase na solução na equação de movimento e, além disso, ela pode ser anulada escolhendo $x(0) = 0$ (para maiores detalhes sobre esta questão ver [22, 40]). Portanto, o modelo proposto mais a forma funcional assumida para $J(\omega)$ nos permite mostrar que a dinâmica do sistema de interesse é dada por uma equação de movimento tipo Langevin. Apesar de termos ido além dos modelos fenomenológicos da seção anterior na questão da modelagem microscópica da dissipação, a escolha da forma funcional de $J(\omega)$ foi uma escolha fenomenológica. Em outras palavras, não derivamos da dinâmica esta forma funcional. No entanto, evidenciamos qual grandeza do reservatório térmico é responsável pela dissipação e que tipo de forma funcional deve ter para gerar este efeito. Além disso, pela equação (3.39), podemos pelo menos ter acesso de modo experimental, via medição da resposta do reservatório térmico, à forma funcional de $J(\omega)$.

Capítulo 4

Abordagem Clássica

4.1 O Modelo

Vimos no Capítulo anterior que o movimento Browniano é muito bem descrito fenomenologicamente por processos estocásticos e pelo modelo microscópico de Caldeira-Leggett. Porém, esta última abordagem, ao mesmo tempo em que trata a dinâmica do reservatório de maneira fenomenológica, evidencia, através de (3.46), (3.47) e (3.51), a importância que ela tem para a descrição do movimento Browniano. Portanto, motivados também pelo que foi apresentado nas seções 1.2 e 2.2, perguntamos que tipo de dinâmica pode gerar os efeitos apresentados no Capítulo 3. Propomos um modelo em que um sistema caótico de dois graus de liberdade faz o papel do reservatório. Nosso principal objetivo, então, é saber como a energia de um sistema de interesse evolui no tempo quando este sistema interage com o sistema caótico quando não controlamos a condição inicial deste exceto pelo valor de energia que ela deve satisfazer. Em outras palavras, estamos interessados no comportamento da energia de um sistema acoplado a um sistema caótico quando tomamos a média das variáveis dinâmicas do sistema caótico em um ensemble inicialmente microcanônico, porém, perturbado no decorrer do tempo pela interação com o outro sistema. Chamaremos esta energia de energia média. Tomamos como modelo a Hamiltoniana abaixo

$$H = H_o(z) + H_c(x, y) + V_I(x, z), \quad (4.1)$$

$$V_I(x, z) = \gamma xz, \quad (4.2)$$

$$H_o(z) = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 z^2}{2} \quad (4.3)$$

e H_c será um sistema caótico de dois graus de liberdade.

4.1.1 Potencial Nelson

O primeiro sistema que estudaremos é chamado de Sistema Nelson

$$H_c(x, y) = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 + 0.1\frac{x^2}{2}, \quad (4.4)$$

introduzido na seção 2.2. A figura 4.1 mostra as funções de correlação $\langle x(0)x(t) \rangle_e$ e $\langle p_x(0)x(t) \rangle_e$, obtidas numericamente, para $E_c = 0.38$. $\langle \cdot \rangle_e$ significa média em um ensemble de equilíbrio microcanônico, ou seja

$$\langle A \rangle_e = \int dx dy dp_x dp_y \rho_e A(x, y, p_x, p_y),$$

$$\rho_e = \frac{\delta(H_c - E_c)}{\Sigma(E_c)} = \frac{\delta(H_c - E_c)}{\int dx dy dp_x dp_y \delta(H_c - E_c)}$$

Estas funções são obtidas da evolução temporal numérica simplética de um conjunto de condições iniciais tomadas sobre a superfície de energia de $E_c = 0.38$. Estas funções de correlação podem ser bem ajustadas por $\langle x(0)x(t) \rangle_e = \sigma e^{-\alpha t} \cos \omega t$ e $\langle p_x(0)x(t) \rangle_e = \beta e^{-kt} \sin \Omega t$, onde $\sigma = 1.865$, $\alpha = 0.0418$, $\omega = 0.1963$, $\beta = 0.409$, $k = 0.0456$ e $\Omega = 0.2043$, com $\chi^2 \sim 10^{-4}$. Este comportamento é observado em sistemas caóticos em geral [42]. Essa perda de correlação é uma consequência da alta instabilidade do SN (lembremos que, para $E_c = 0.38$, SN é fortemente caótico). Sistemas regulares, ao contrário, exibem correlações quasi-periódicas. Portanto, essas funções refletem aspectos importantes da dinâmica subjacente.

4.1.2 Potencial Quártico

Obtemos resultados análogos utilizando, agora, como sistema interagente, o chamado potencial quártico, apresentado na seção 2.2,

$$H_c(x, y) = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{x^2 y^2}{2} + \frac{a}{4} (x^4 + y^4) \quad (4.5)$$

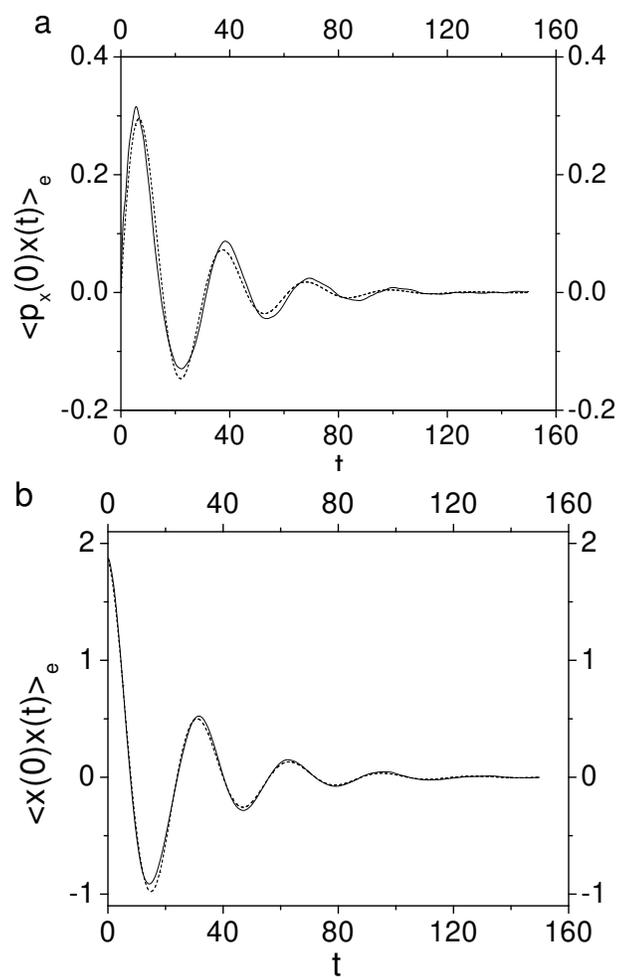


Figura 4.1: Funções de correlação $\langle p_x(0)x(t) \rangle$ (a) e $\langle x(0)x(t) \rangle$ (b) para $E_c = 0.38$. A linha cheia corresponde ao resultado numérico e a tracejada ao ajuste.

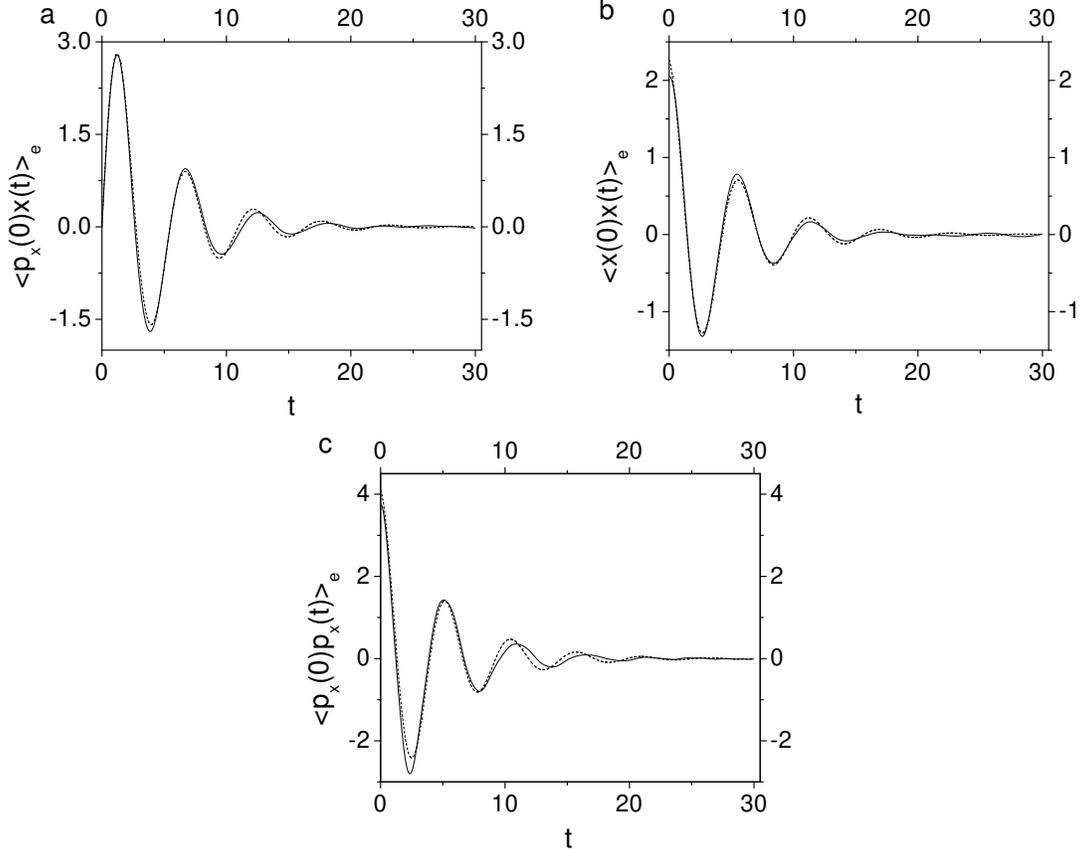


Figura 4.2: Funções de correlação $\langle p_x(0)x(t) \rangle_e$ (a), $\langle x(0)x(t) \rangle_e$ (b) e $\langle p_x(0)p_x(t) \rangle_e$ (c) para $E_c = 5.0$ e $a = 0.1$. A linha cheia corresponde ao resultado numérico e a tracejada ao ajuste.

Ao contrário do sistema Nelson, a dinâmica deste sistema só muda por uma escala quando mudamos a energia. Usaremos esse fato mais adiante. A figura 4.2 mostra as funções de correlação $\langle x(0)x(t) \rangle_e$, $\langle p_x(0)x(t) \rangle_e$ e $\langle p_x(0)p_x(t) \rangle_e$ para $a = 0.1$ e $E_c = 5.0$, regime em que SQ é fortemente caótico. Estas funções foram obtidas da mesma maneira que as do sistema Nelson e, como podemos observar, possuem o mesmo comportamento. Estas funções de correlação podem ser bem ajustadas por $\langle x(0)x(t) \rangle_e = \sigma e^{-\alpha t} \cos \omega t$, $\langle p_x(0)x(t) \rangle_e = \beta e^{-k t} \sin \Omega t$, $\langle p_x(0)p_x(t) \rangle_e = \mu e^{-\kappa t} \cos \nu t$, onde $\sigma = 2.268$, $\alpha = 0.207$, $\omega = 1.1027$, $\beta = 3.67$, $k = 0.208$, $\Omega = 1.1481$, $\mu = 4.10$, $\kappa = 0.206$ e $\nu = 1.189$, com $\chi^2 \sim 10^{-3}$.

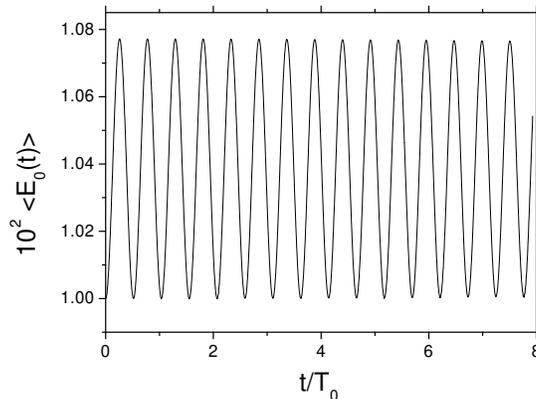


Figura 4.3: Resultado numérico para a evolução temporal de $\langle E_0(t) \rangle$ para $E_0(0)/E_c(0) = 1.0$ e $E_c(0) = 0.01$ para o sistema Nelson. Os parâmetros do modelo são $m = 200.0$, $\omega_0 = 0.005$ e $\gamma = 0.006$. $T_0 = 1/\omega_0 \sim 1260$. Usamos cerca de 3000 condições iniciais.

4.2 Resultados Numéricos

Obtemos a energia média do sistema de interesse numericamente tomando um ensemble de condições iniciais uniformemente distribuídas na superfície de energia $E_c = 0.38$, para o sistema Nelson, e $E_c = 5.0$, para o sistema Quártico. Para o sistema de interesse, tomamos só uma condição inicial: $z(0) = 0$ e $p_z(0) = \sqrt{2mE_0(0)}$ (a razão desta escolha ficará mais clara posteriormente). Então, evoluímos, usando um integrador numérico simplético [43], as condições iniciais de H_c com $(z(0), p_z(0))$ de H_0 . Calculamos H_0 para cada instante, para cada condição inicial, e tomamos a média.

Na figura 4.3, podemos observar a evolução temporal de $E_0(t)$ com o sistema Nelson como reservatório. A energia inicial foi escolhida de tal forma que o sistema Nelson fosse regular (ver figura 2.1a). Vemos que a energia média evolui de forma oscilatória e verificamos que isso acontece inclusive para tempos muito maiores que os mostrados na figura. Já na figura 4.4, foram escolhidas duas condições iniciais distintas na superfície de energia $E_c(0) = 0.38$. Vemos, portanto, que para uma única realização, a energia do oscilador flutua devido a interação com o sistema caótico. Como discutimos no Capítulo anterior sobre o movimento Browniano, quando as flutuações são consideráveis, não é possível observar efeitos dissipativos em um única

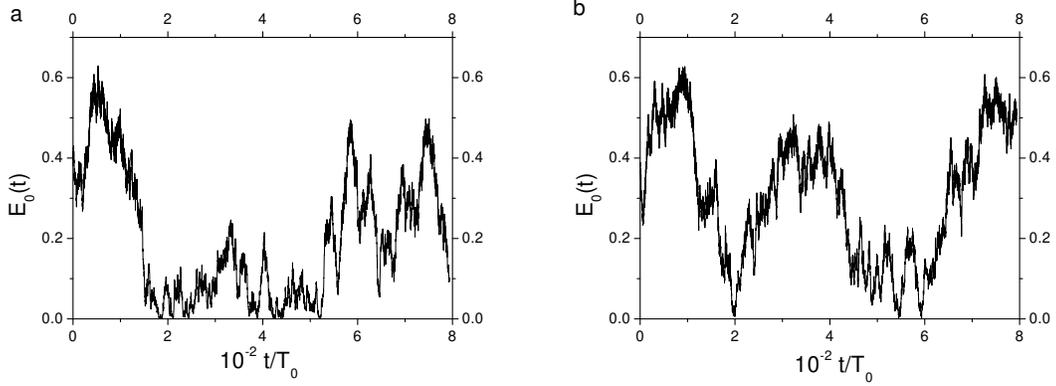


Figura 4.4: Resultados numéricos para a evolução temporal de $E_0(t)$ para $E_0(0)/E_c(0) = 1.0$ para duas condições iniciais distintas do sistema Nelson (a e b), com $E_c(0) = 0.38$. Os parâmetros do modelo são $m = 200.0$, $\omega_0 = 0.005$ e $\gamma = 0.006$. $T_0 = 1/\omega_0 \sim 1260$.

realização. A figura 4.4 mostra que esse pode ser o caso aqui.

As figuras 4.5 e 4.6 mostram os resultados da energia média para valores diferentes de $E_0(0)$. Vemos que o efeito médio da interação com o sistema caótico é uma "termalização" da energia média, o que não é um resultado óbvio para um sistema de poucos graus de liberdade. Mostraremos mais tarde que, considerando um regime de resposta linear, para o sistema caótico, $E_0(0)/E_c(0)$ definirá a taxa inicial da variação da energia com o tempo. Vemos que o comportamento da energia média é muito semelhante ao da partícula Browniana usual num potencial externo harmônico, como apresentada na figura 3.1.

4.3 Resposta Linear

Podemos tentar descrever o comportamento de $\langle E_0(t) \rangle$ em escalas pequenas de tempo e acoplamento fraco através da Teoria de Resposta Linear. Esta teoria, como mencionado anteriormente, pode ser encarada como uma teoria de perturbação para as distribuições de equilíbrio.

Vamos calcular $\langle E_0(t) \rangle$. De (4.1) temos

$$\ddot{z}(t) + \omega_0^2 z(t) = -\frac{\gamma}{m} x(t), \quad (4.6)$$

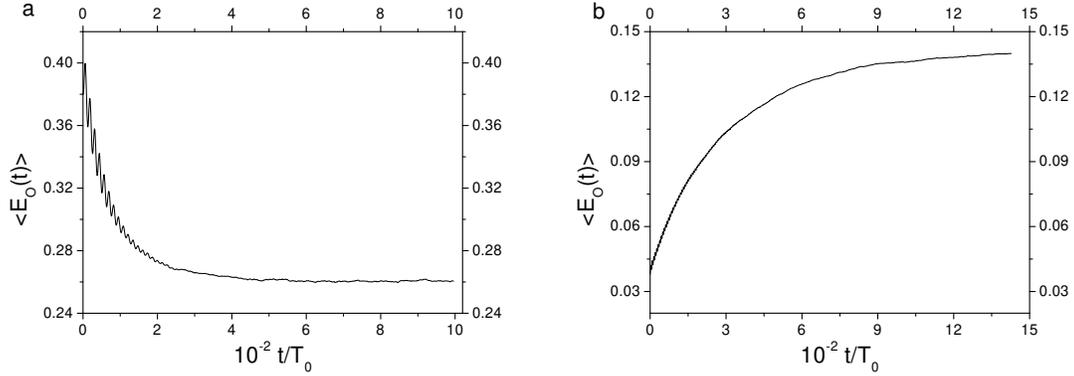


Figura 4.5: Resultados numéricos para a evolução temporal de $\langle E_0(t) \rangle$ para $E_0(0)/E_c(0) = 1.0$ e $E_0(0)/E_c(0) = 0.1$ (a e b), com $E_c(0) = 0.38$, para o sistema Nelson. Os parâmetros do modelo são $m = 200.0$, $\omega_0 = 0.005$ e $\gamma = 0.006$. $T_0 = 1/\omega_0 \sim 1260$.

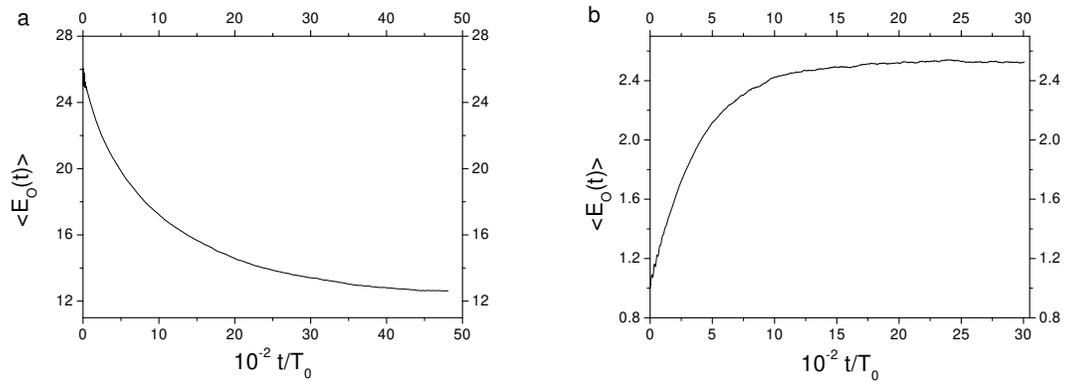


Figura 4.6: Resultados numéricos para a evolução temporal de $\langle E_0(t) \rangle$ para $E_0(0)/E_c(0) = 5.0$ e $E_0(0)/E_c(0) = 0.2$ (a e b), com $E_c(0) = 5.0$ e $a = 0.1$, para o sistema Quártico. Os parâmetros do modelo são $m = 10.0$, $\omega_0 = 0.01$ e $\gamma = 0.01$. $T_0 = 1/\omega_0 \sim 628$.

cuja solução é

$$\begin{aligned} z(t) &= z_d(t) - \frac{\gamma}{m} \int_0^t ds \chi(t-s)x(s) \\ \chi(t-s) &= \frac{\sin[\omega_0(t-s)]}{\omega_0}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Derivando a expressão acima para $z(t)$, temos

$$\begin{aligned} p_z(t) &= p_{z_d}(t) - \gamma \int_0^t ds \Gamma(t-s)x(s) \\ \Gamma(t-s) &= \cos[\omega_0(t-s)]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

$z_d(t)$ e $p_{z_d}(t)$ são as soluções desacopladas com a escolha $z(0) = 0$. Então

$$\begin{aligned} z_d(t) &= \frac{p_z(0)}{m\omega_0} \sin(\omega_0 t) & p_{z_d}(t) &= p_z(0) \cos(\omega_0 t) \\ p_z(0) &= \sqrt{2mE_0(0)}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Portanto, podemos calcular $\langle E_0(t) \rangle$

$$\langle E_0(t) \rangle = \frac{\langle p_z^2(t) \rangle}{2m} + \frac{m\omega_0^2 \langle z^2(t) \rangle}{2} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \langle p_z^2(t) \rangle &= p_{z_d}^2(t) - 2\gamma p_{z_d}(t) \int_0^t ds \Gamma(t-s) \langle x(s) \rangle + \\ &\quad \gamma^2 \int_0^t ds \int_0^t du \Gamma(t-s) \Gamma(t-u) \langle x(s)x(u) \rangle \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \langle z^2(t) \rangle &= z_d^2(t) - \frac{2\gamma}{m} z_d(t) \int_0^t ds \Gamma(t-s) \langle x(s) \rangle + \\ &\quad \frac{\gamma^2}{m^2} \int_0^t ds \int_0^t du \Gamma(t-s) \Gamma(t-u) \langle x(s)x(u) \rangle. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Da Teoria de Resposta Linear

$$\langle x(t) \rangle = \langle x(t) \rangle_e - \gamma \int_0^t ds \phi_x(t-s)z(s). \quad (4.13)$$

$\langle x(t) \rangle_e = 0$ pois $H_c(-x) = H_c(x)$. Considerando V_I perturbativamente para H_0 , usaremos (4.13) em (4.11) e (4.12), tomando somente termos menores ou iguais a

ordem γ^2 . Portanto, temos

$$\begin{aligned} \langle p_z^2(t) \rangle &= p_{z_d}^2(t) + 2\gamma^2 p_{z_d}(t) \int_0^t ds \Gamma(t-s) \int_0^s du \phi_x(s-u) z_d(u) + \\ &\quad \gamma^2 \int_0^t ds \int_0^t du \Gamma(t-s) \Gamma(t-u) \langle x(s)x(u) \rangle_e \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \langle z^2(t) \rangle &= z_d^2(t) + \frac{2\gamma^2}{m} z_d(t) \int_0^t ds \chi(t-s) \int_0^s du \phi_x(s-u) z_d(u) + \\ &\quad \frac{\gamma^2}{m^2} \int_0^t ds \int_0^t du \chi(t-s) \chi(t-u) \langle x(s)x(u) \rangle_e. \end{aligned} \quad (4.15)$$

As expressões (4.14) e (4.15) são válidas para o oscilador harmônico interagindo com qualquer outro sistema através de um potencial perturbativo V_I . Estas expressões mostram que, depois de tomar a média, toda a informação sobre o sistema interagente está contida nas funções $\langle x(0)x(t) \rangle_e$ e $\phi_x(t)$. Se o sistema interagente é integrável, com poucos graus de liberdade, as funções mencionadas acima serão funções oscilatórias. Para um sistema caótico, no entanto, essas funções caem exponencialmente com o tempo, levando a resultados qualitativamente distintos.

4.3.1 Potencial Nelson

A função resposta $\phi_x(t)$ é dada por (ver Capítulo 2)

$$\begin{aligned} \phi_x(t) &= \langle \{x(0), x(t)\} \rangle_e = \int dx dy dp_x dp_y \rho_e \{x(0), x(t)\} \\ &= \int dx dy dp_x dp_y \{ \rho_e, x(0) \} x(t) \\ &= -\frac{1}{\Sigma(E_c(0))} \int dx dy dp_x dp_y x(t) \frac{\partial}{\partial p_x(0)} \delta(H_c - E_c(0)) \\ &= -\frac{1}{\Sigma(E_c(0))} \int dx dy dp_x dp_y x(t) p_x(0) \frac{\partial}{\partial H_c} \delta(H_c - E_c(0)) \end{aligned} \quad (4.16)$$

$\{.\}$ é o parênteses de Poisson. Esta integral pode ser feita explicitamente mudando para uma variável ortogonal a superfície de energia, H_c , e outras ao longo da superfície de energia, ξ , θ e φ

$$\begin{aligned} \phi_x(t) &= \int dH_c d\Theta \frac{\delta(H_c - E_c(0))}{\Sigma(E_c(0))} \frac{\partial}{\partial H_c} (J p_x(0) x(t)) \\ &= \left\langle p_x(0) x(t) \frac{\partial J / \partial H_c}{J} \right\rangle_e + \left\langle \frac{\partial}{\partial H_c} (p_x(0) x(t)) \right\rangle_e, \end{aligned} \quad (4.17)$$

na qual, $\Theta = (\xi, \theta, \varphi)$, $J = J(H_c, \xi, \theta, \varphi)$ é o Jacobiano da transformação e a derivada é calculada em $E_c(0)$ (ver apêndice C). Para o sistema Nelson $J = H_c f_N(\Theta)$, e a função resposta simplifica em

$$\phi_x(t) = \frac{\langle p_x(0)x(t) \rangle_e}{E_c(0)} + \left\langle \frac{\partial}{\partial H_c} (p_x(0)x(t)) \right\rangle_e. \quad (4.18)$$

Faremos a aproximação

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial E} (p_x(0)x(t)) \right\rangle_e \approx \frac{\langle p_x(0)x(t) \rangle_e}{E_c(0)}, \quad (4.19)$$

o que significa uma dependência linear com E próximo a $E_c(0)$. Então

$$\phi_x(t) = \frac{2}{E_c(0)} \langle p_x(0)x(t) \rangle_e, \quad (4.20)$$

que é similar à função resposta canônica [39].

Tomando os ajustes dos resultados numéricos de $\langle x(0)x(t) \rangle_e$ e $\langle p_x(0)x(t) \rangle_e$ e considerando $\Omega \approx \omega$ e $k \approx \alpha$, obtemos de (4.10), (4.14) e (4.15) o seguinte resultado

$$\langle E_0(t) \rangle = E_0(0) + \frac{\gamma^2}{m} (B + At + f(t) + g(t)), \quad (4.21)$$

onde $f(t)$ é uma função oscilatória, $g(t)$ é proporcional a $e^{-\alpha t}$ e B é uma constante. O resultado importante é o coeficiente A

$$A = 4\beta\omega\alpha \frac{\left[\frac{\sigma}{4\beta\omega} (\omega_0^2 + \omega^2 + \alpha^2) - \frac{E_0(0)}{E_c(0)} \right]}{[(\omega_0 - \omega)^2 + \alpha^2][(\omega_0 + \omega)^2 + \alpha^2]}. \quad (4.22)$$

Se $A > 0$, o sistema de interesse absorve energia do sistema caótico. Se $A < 0$ ocorre o inverso e se $A = 0$ temos uma situação de equilíbrio.

A eq.(4.21) descreve qualitativamente a evolução temporal, para escalas curtas de tempo, como uma função oscilatória mais uma função linear. Além disso, A determina que, dada $E_c(0)$ (e, como consequência, dados σ , β , ω e α) e ω_0 , $E_0(0)/E_c(0)$ é responsável pelo aumento ou diminuição da energia média. A condição

$$\frac{E_0(0)}{E_c(0)} = \frac{\sigma}{4\beta\omega} (\omega_0^2 + \omega^2 + \alpha^2) \quad (4.23)$$

é a condição de equilíbrio.

Agora, vamos considerar a equação de movimento para $z(t)$ sob o efeito médio da interação com o sistema caótico. De (4.6) e (4.13)

$$\ddot{z}(t) + \omega_0^2 z(t) = -\frac{\gamma}{m} \langle x(t) \rangle, \quad (4.24)$$

$$\ddot{z}(t) + \omega_0^2 z(t) = \frac{\gamma^2}{m} \int_0^t ds \phi_x(t-s) z(s). \quad (4.25)$$

Integrando por partes o termo de convolução de (4.25)

$$\ddot{z}(t) + \left(\omega_0^2 - \frac{\gamma^2 F(0)}{m} \right) z(t) + \frac{\gamma^2}{m} \int_0^t ds F(t-s) \dot{z}(s) + \frac{\gamma^2}{m} z(0) F(t) = 0 \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} F(t-s) &= \int ds \phi_x(t-s) \\ &= \frac{2\beta e^{-k(t-s)}}{E_c(0)(k^2 + \Omega^2)} \{ \Omega \cos [\Omega(t-s)] + k \sin [\Omega(t-s)] \}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

De (4.26), observamos que o efeito médio da interação produz uma correção harmônica no potencial original, um termo de dissipação e uma força externa que pode ser anulada com a escolha $z(0) = 0$. Com esta escolha, (4.26) tem a forma de uma equação de Langevin média (pois não há força flutuante). Gostaríamos de salientar a analogia e as diferenças entre os passos para a dedução de (4.26) e os da seção 3.2. Aqui, a resposta linear do reservatório não é a resposta total. A função $F(t)$, assim como $\gamma(t)$ na seção 3.2, também está ligada à função resposta do reservatório. Aqui, porém, a expressão da função resposta foi tirada da dinâmica caótica.

Na figura 4.7, estão as comparações entre os resultados numéricos para $\langle E_0(t) \rangle$ (com e sem a correção harmônica $-\frac{\gamma^2}{2} F(0) z^2$) e a expressão (4.21) mas considerando somente os primeiros dois termos. Na figura 4.7a $E_0/E_c = 1.0$, em 4.7b $E_0/E_c = 0.25$, em 4.7c $E_0/E_c = 0.1$ e $E_c = 0.38$ em todos os casos. Na escala de tempo mostrada, o comportamento linear no tempo descreve muito bem os resultados numéricos. A figura 4.7b mostra a situação de equilíbrio dada por (4.23).

Devido à correção harmônica, algum cuidado deve ser tomado na escolha dos parâmetros livres do modelo para que o potencial harmônico efetivo não seja negativo. Para a comparação do resultado analítico com o numérico, os parâmetros

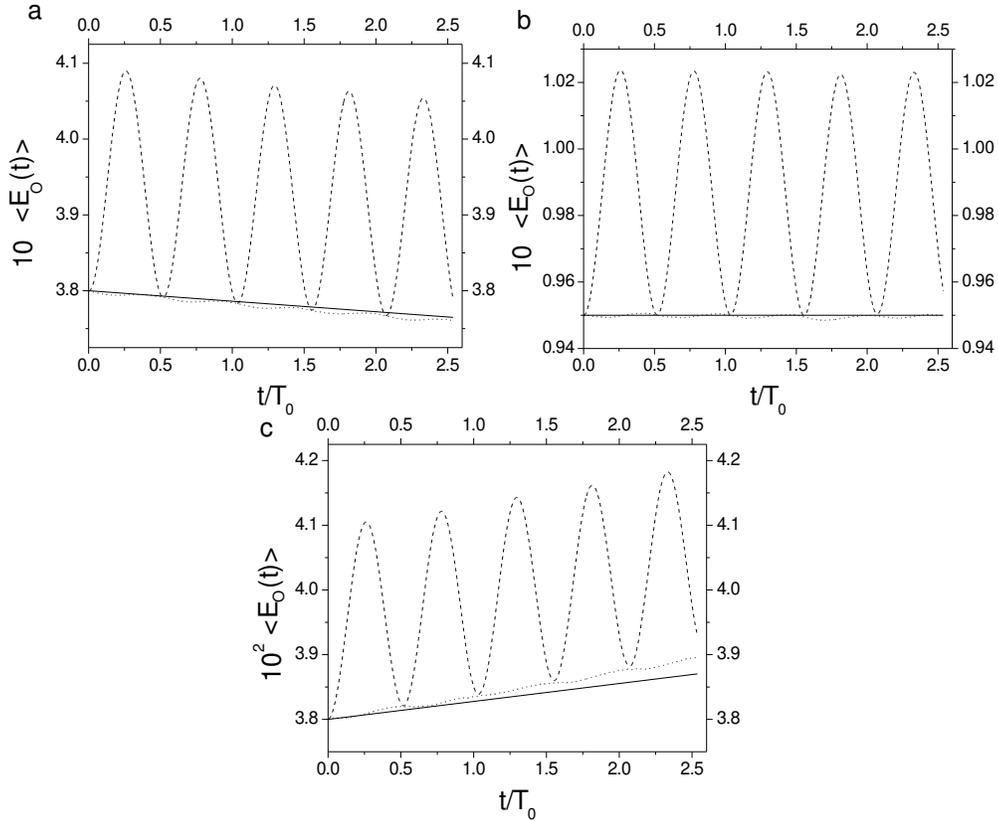


Figura 4.7: $\langle E_0(t) \rangle$ para escalas curtas de tempo. A linha tracejada corresponde ao resultado numérico sem a correção no potencial harmônico, a linha pontilhada corresponde ao resultado numérico com a correção e a linha cheia corresponde à (4.21) apenas com os termos constantes e o termo linear. Os parâmetros do modelo para estes resultados são $m = 200.0$, $\omega_0 = 0.005$ e $\gamma = 0.006$ para SN. $T_0 = 1/\omega_0$. Usamos cerca de 40000 condições iniciais.

foram escolhidos a fim de que o termo $g(t)$ de (4.21) vá a zero rapidamente, isto é, $e^{-\alpha/\omega_0} \approx 10^{-4}$, e então, os termos linear e oscilante são as mais importantes contribuições. ω_0 é escolhido então por comparação com α . Além disso, com $E_c(0)$ fixo em 0.38, os parâmetros α , β , σ e ω estão fixos e escolhemos γ e m de maneira que:

$$\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{m} F(0) > 0. \quad (4.28)$$

4.3.2 Potencial Quártico

Da mesma maneira que no caso anterior, a função resposta do sistema Quártico é dada por

$$\phi_x(t) = \left\langle p_x(0)x(t) \frac{\partial J / \partial H_c}{J} \right\rangle_e + \left\langle \frac{\partial}{\partial H_c} (p_x(0)x(t)) \right\rangle_e. \quad (4.29)$$

Porém, aqui $J = H_c^{1/2} f_Q(\Theta)$ (ver apêndice C). Portanto,

$$\frac{1}{J} \frac{\partial J}{\partial H_c} = \frac{1}{2} \frac{1}{f_Q(\Theta) H_c^{1/2}} \frac{f_Q(\Theta)}{H_c^{1/2}},$$

e $\phi_x(t)$ fica

$$\phi_x(t) = \frac{\langle p_x(0)x(t) \rangle_e}{2E_c(0)} + \left\langle \frac{\partial}{\partial H_c} (p_x(0)x(t)) \right\rangle_e. \quad (4.30)$$

No caso do potencial Quártico, podemos calcular explicitamente o segundo termo pois a dinâmica é escalável com a energia [30] de tal maneira que

$$p_x(0) = \left(\frac{H_c}{E_c(0)} \right)^{1/2} p'_x(0), \quad x(t) = \left(\frac{H_c}{E_c(0)} \right)^{1/4} x'(t'), \quad t = \left(\frac{H_c}{E_c(0)} \right)^{-1/4} t'.$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H_c} (p_x(0)x(t)) &= \frac{\partial}{\partial H_c} \left[\left(\frac{H_c}{E_c(0)} \right)^{3/4} p'_x(0)x'(t') \right] \\ &= \frac{3}{4} \frac{1}{E_c^{3/4}(0) H_c^{1/4}} p'_x(0)x'(t') + \left(\frac{H_c}{E_c(0)} \right)^{3/4} p'_x(0) \frac{\partial x'(t')}{\partial H_c} \end{aligned} \quad (4.31)$$

O último termo da equação acima é dado por

$$\begin{aligned} \left(\frac{H_c}{E_c(0)} \right)^{3/4} p'_x(0) \frac{\partial x'(t')}{\partial H_c} &= \left(\frac{H_c}{E_c(0)} \right)^{3/4} p'_x(0) \frac{dx'(t')}{dt'} \frac{dt'}{dH_c} \\ &= \left(\frac{H_c}{E_c(0)} \right)^{3/4} \frac{p'_x(0)p'_x(t')}{4} \frac{t}{E_c^{1/4}(0) H_c^{3/4}} = \frac{t p'_x(0)p'_x(t')}{4E_c(0)}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

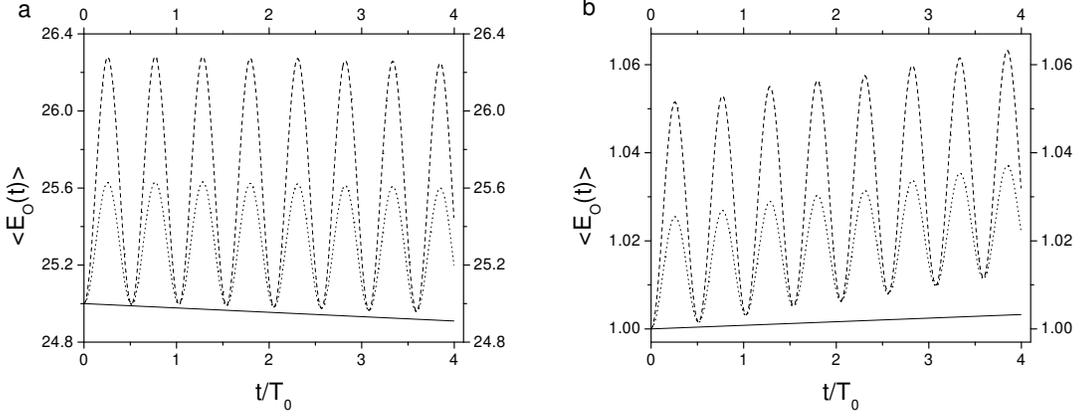


Figura 4.8: $\langle E_0(t) \rangle$ para escalas curtas de tempo. A linha tracejada corresponde ao resultado numérico sem a correção harmônica, a linha pontilhada ao resultado numérico com a correção harmônica e a linha cheia a Eq.(4.35) sem $g'(t)$ e $f'(t)$. (a) $E_0(0)/E_c(0) = 0.2$ e (b) $E_0(0)/E_c(0) = 5.0$. $E_c = 5.0$, $a = 0.1$ $m = 10.0$, $\omega_0 = 0.01$ e $\gamma = 0.01$ para SQ. $T_0 = 1/\omega$. Usamos 40000 condições iniciais.

Logo,

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial H_c} (p_x(0)x(t)) \right\rangle_e = \frac{3}{4} \frac{\langle p_x(0)x(t) \rangle_e}{E_c(0)} + \frac{t \langle p_x(0)p_x(t) \rangle_e}{4E_c(0)}. \quad (4.33)$$

E a função resposta fica

$$\phi_x(t) = \frac{5}{4} \frac{\langle p_x(0)x(t) \rangle_e}{E_c(0)} + \frac{t \langle p_x(0)p_x(t) \rangle_e}{4E_c(0)}. \quad (4.34)$$

Tomando os ajustes dos cálculos numéricos de $\langle x(0)x(t) \rangle_e$, $\langle p_x(0)x(t) \rangle_e$ e $\langle p_x(0)p_x(t) \rangle_e$ para o potencial quártico, e calculando $\langle E_0(t) \rangle$ na aproximação $\alpha = k = \kappa$ mas $\omega \neq \Omega \neq \nu$, temos

$$\langle E_0(t) \rangle = E_0(0) + \frac{\gamma^2}{m} (B' + A't + f'(t) + g'(t)), \quad (4.35)$$

na qual B' é uma constante, $f'(t)$ é uma função oscilatória e $g'(t)$ é uma soma de termos proporcionais a $e^{-\alpha t}$ e $te^{-\alpha t}$. Como no potencial Nelson, o coeficiente linear A' é uma função da razão das energias iniciais

$$A' = \frac{5\beta\Omega\alpha}{2} \frac{\left[\frac{2\Lambda\sigma}{5\beta\Omega} (\omega_0^2 + \omega^2 + \alpha^2) - \eta \frac{E_0(0)}{E_c(0)} \right]}{[(\omega_0 - \omega)^2 + \alpha^2][(\omega_0 + \omega)^2 + \alpha^2]}, \quad (4.36)$$

na qual

$$\Lambda = \frac{[(\omega_0 - \Omega)^2 + \alpha^2][(\omega_0 + \Omega)^2 + \alpha^2]}{[(\omega_0 - \omega)^2 + \alpha^2][(\omega_0 + \omega)^2 + \alpha^2]} \quad (4.37)$$

e

$$\eta = 1 + \frac{\mu [(\omega_0 - \Omega)^2 + \alpha^2][(\omega_0 + \Omega)^2 + \alpha^2][(\omega_0^2 + \kappa^2)^2 + 2\nu^2(\omega_0 + \kappa)(\omega_0 - \kappa) - 3\nu^4]}{5\beta\Omega [(\omega_0 - \nu)^2 + \kappa^2]^2 [(\omega_0 + \nu)^2 + \kappa^2]^2} \quad (4.38)$$

Vemos que quando $\mu = 0$ (que significa não ter o termo $t\langle p_x(0)p_x(t) \rangle_\epsilon/4E_c(0)$) e $\omega = \Omega$, temos a mesma forma do coeficiente do potencial Nelson. O fator η , que aparece devido ao último termo de (4.34), pode ser menor que zero, impossibilitando que $\langle E_0(t) \rangle$ decresça com o tempo. A condição de equilíbrio ocorre quando

$$A' = 0 \Rightarrow \frac{E_0(0)}{E_c(0)} = \frac{2\Lambda\sigma(\omega_0^2 + \omega^2 + \alpha^2)}{5\beta\Omega\eta}. \quad (4.39)$$

Temos também uma equação igual a (4.26) para o movimento do oscilador sob efeito médio do sistema Quártico. Porém, a função $F(t)$ é dada por

$$\begin{aligned} F(t-s) &= \int ds \phi_x(t-s) \\ &= \frac{\mu(t-s)e^{-k(t-s)}}{4E_c(0)(k^2 + \nu^2)} \{k \cos[\nu(t-s)] - \nu \sin[\nu(t-s)]\} \\ &\quad - \frac{\mu e^{-k(t-s)}}{4E_c(0)(k^2 + \nu^2)^2} \{(\nu^2 - k^2) \cos[\nu(t-s)] + 2\nu k \sin[\nu(t-s)]\} \\ &\quad + \frac{5\beta e^{-k(t-s)}}{4E_c(0)(\Omega^2 + k^2)} \{\Omega \cos[\nu(t-s)] + k \sin[\nu(t-s)]\} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Na figura 4.8, estão as comparações entre os resultados numéricos de $\langle E_0(t) \rangle$ (com e sem a correção harmônica $-\frac{\nu}{m}F(0)z^2$) e a expressão (4.35) considerando apenas os dois primeiros termos. A concordância entre os resultados analíticos e numéricos é razoável. As oscilações tem amplitude maior que no caso do potencial Nelson pois a escala de energia é diferente: $E_c(0) = 0.38$ no caso do potencial Nelson e $E_c(0) = 5.0$ no caso do potencial Quártico. A condição de equilíbrio prevista não concorda com os resultados numéricos: na aproximação $\alpha = k = \kappa$ e $\omega \neq \Omega \neq \nu$, $A' = 0 \Rightarrow \frac{E_0(0)}{E_c(0)} = 0.35$, e a figura 4.9 mostra que a razão de equilíbrio está entre 2.0 e 3.0. Se considerarmos $\omega = \Omega \neq \nu$, $A' = 0 \Rightarrow \frac{E_0(0)}{E_c(0)} = 0.45$, e no caso $\omega = \nu \neq \Omega$,

$A' = 0 \Rightarrow \frac{E_0(0)}{E_c(0)} = 0.55$, ou seja, a condição de equilíbrio é bastante sensível às variações nas frequências. Portanto, se compararmos os resultados para o potencial Nelson e Quártico, percebemos que, apesar do cálculo analítico da função resposta ser exato para o Quártico e aproximado para o Nelson, o ajuste das funções de correlação é muito mais preciso para o caso Nelson do que para o caso Quártico ($\chi_{P.N.}^2 \sim 10^{-4}$ e $\chi_{P.Q.}^2 \sim 10^{-3}$) e este pode ser o motivo da melhor concordância entre os resultados numérico e analítico para o potencial Nelson.

Assim como no potencial Nelson, os parâmetros escolhidos foram tais que $g'(t)$ vai rapidamente a zero. Para isso, ω_0 foi escolhida de forma que $e^{-\alpha/\omega_0} \sim 10^{-9}$. Com $E_c(0)$ fixo em 5.0, os parâmetros das funções de correlação ficam determinados e restam γ e m que são escolhidos de forma a satisfazer:

$$\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{m} F(0) > 0. \quad (4.41)$$

4.4 Tempos Longos e Equilíbrio Térmico

Para tempos longos, o oscilador e o sistema caótico atingem o equilíbrio, no sentido de que as energias médias correspondentes tendem a valores constantes. Isto pode ser visto nas figuras 4.5 e 4.6 para o sistema Nelson e Quártico. A razão entre as energias no equilíbrio, a tempos longos, não é necessariamente relacionada à razão de equilíbrio para tempos curtos, pois, efeitos não-lineares são certamente importantes no primeiro. De maneira a caracterizar o equilíbrio, é importante entender a distribuição de energia para cada sub-sistema. Devido ao número de graus de liberdade envolvido, o oscilador não deve seguir a distribuição de Boltzmann.

Para obter as distribuições de energia numericamente, construímos histogramas nos quais os valores de E_o e E_c são extraídos de cada trajetória do ensemble para um instante fixo longo. Os valores de energia são divididos em intervalos e o número de trajetórias do ensemble para as quais a energia do oscilador cai em cada intervalo é contado. O mesmo processo é feito com respeito à energia do sistema caótico. A figura 4.10 mostra as distribuições de energia obtidas para o oscilador e para os sistemas caóticos. O eixo vertical mostra as contagens em porcentagens do número total de trajetórias. Em ambos os casos, é claro que o oscilador não segue a distribuição de Boltzmann. Isto não é surpresa, na verdade, pois o sistema caótico é pequeno

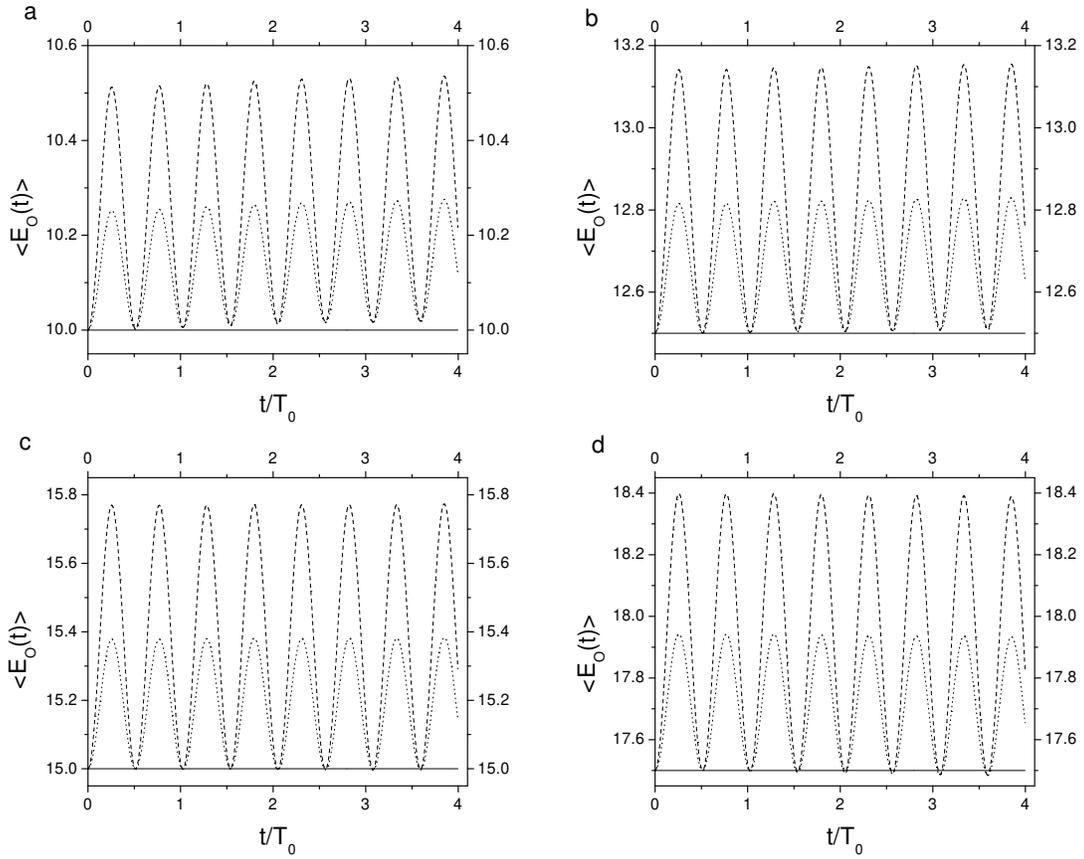


Figura 4.9: $\langle E_0(t) \rangle$ para escalas curtas de tempo. A linha tracejada corresponde ao resultado numérico sem correção harmônica, a linha pontilhada ao resultado numérico com correção harmônica e a linha cheia a $\langle E_0(t) \rangle_e = E_0(0)$. (a) $E_0(0)/E_c(0) = 2.0$, (b) $E_0(0)/E_c(0) = 2.5$, (c) $E_0(0)/E_c(0) = 3.0$ e $E_0(0)/E_c(0) = 3.5$. $E_c = 5.0$, $a = 0.1$, $m = 10.0$, $\omega_0 = 0.01$ and $\gamma = 0.01$ para SQ. Usamos 40000 condições iniciais.

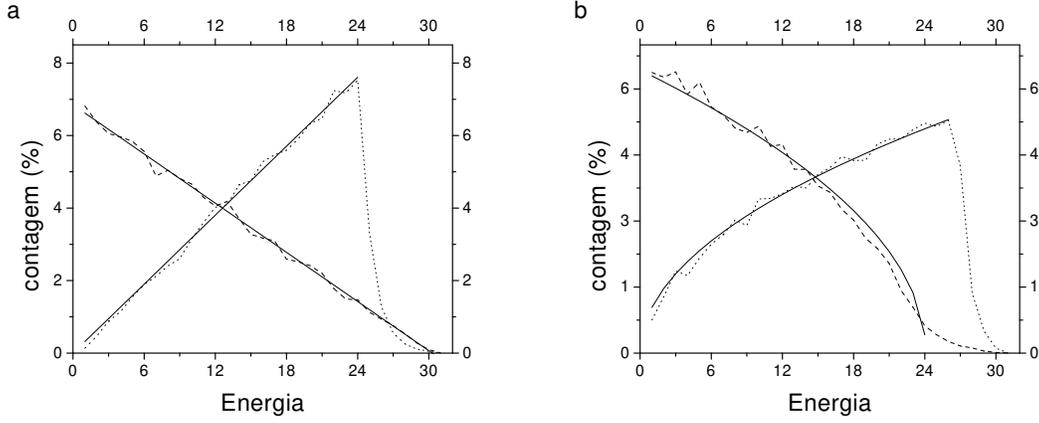


Figura 4.10: (a) Histograma de E_0 e E_c no instante 8.10^5 , na situação da figura 4.5a, para 30000 condições iniciais. A linha tracejada corresponde ao histograma de E_0 , a linha pontilhada ao de E_c e a linha cheia ao ajuste. (b) Histograma de E_0 e E_c no instante 16.10^5 , na situação da figura 4.6b. A linha tracejada corresponde ao histograma E_0 , a linha pontilhada ao de E_c e a linha cheia ao ajuste. A energia está em unidades de $E_T/30$.

(com dois graus de liberdade apenas) e sua energia é comparável à do oscilador. A distribuição de Boltzmann surge naturalmente quando o sistema de interesse está em contato com um reservatório de muitos graus de liberdade [44], condição que não é satisfeita aqui. Nesse contexto, não é claro se uma temperatura pode ser definida no presente caso. Retornaremos a essa questão mais adiante.

A distribuição de energia dos sub-sistemas pode ser totalmente compreendida em termos das densidades de estados. Para mostrarmos isso, assumimos duas hipóteses que são comuns na física estatística de sistemas de muitos graus de liberdade [44, 1]. A primeira é considerar que, no equilíbrio, todos os estados do sistema total, eq.(4.1), são igualmente prováveis, isto é, a hipótese de probabilidades iguais *a priori*. A segunda hipótese é assumir interação fraca entre os sub-sistemas. O número de estados $dN(E)$ do sistema todo, para o qual o oscilador tem energia entre E e $E + dE$, pode ser escrito em termos da densidade de estados

$$n(\epsilon) = \int dV \delta(H(x, y, z) - \epsilon), \quad (4.42)$$

na qual $H(x, y, z)$ é dada pela eq.(4.1) e $dV = dx dp_x dy dp_y dz dp_z$. Desprezando o

potencial de interação V_I na eq.(4.1), podemos escrever $dN(E) = n_o(E) n_c(E_T - E) dE$, na qual n_o e n_c são, respectivamente, as densidades de estados do oscilador e do sistema caótico, e E_T é a energia total.

Baseados nessas duas hipóteses, podemos calcular a probabilidade de que o oscilador tenha energia entre E e $E + dE$. A densidade de probabilidade $p_o(E)$ é, devido a primeira hipótese, proporcional ao número de estados $dN(E)$:

$$p_o(E)dE \propto dN(E) = n_o(E)n_c(E_T - E)dE. \quad (4.43)$$

Da mesma forma, a densidade de probabilidade para o sistema caótico é

$$p_c(E)dE \propto n_c(E)n_o(E_T - E)dE. \quad (4.44)$$

Encontramos que $n_o(E)$ é uma constante e que $n_c(E) \propto E$ para o sistema Nelson e $n_c(E) \propto E^{1/2}$ para o Quártico (ver apêndice C). Portanto, obtemos

$$\begin{cases} p_o(E) \propto (E_T - E) \\ p_c(E) \propto E \end{cases} \quad \text{para o Nelson} \quad (4.45)$$

e

$$\begin{cases} p_o(E) \propto (E_T - E)^{1/2} \\ p_c(E) \propto E^{1/2} \end{cases} \quad \text{para o Quártico} \quad (4.46)$$

Estas expressões só tem sentido no intervalo $0 < E < E_T$.

As linhas cheias da figura 4.10 mostram um ajuste linear, para o caso do sistema Nelson, e um ajuste raiz quadrada para o caso do sistema Quártico. Os ajustes concordam muito bem com os resultados numéricos. O decréscimo repentino das distribuições dos sistemas caóticos para altas energias se deve ao vínculo de E_T ser fixa.

Finalmente, com as eqs.(4.45) e (4.46), nós podemos também calcular a energia média do oscilador no equilíbrio e comparar os resultados com os valores das figuras 4.5 e 4.6. Temos

$$\bar{E}_o = \int_0^{E_T} dE \frac{p_o(E)}{Z} E, \quad (4.47)$$

na qual a constante de normalização é

$$Z = \int_0^{E_T} dE p_o(E) \quad (4.48)$$

é $Z = E_T^2/2$ para o Nelson e $Z = 2E_T^{3/2}/3$ para o Quártico. Obtemos então $\bar{E}_o = E_T/3$ para o Nelson e $\bar{E}_o = 2E_T/5$ para o Quártico. Das densidades de probabilidades p_c , obtemos $\bar{E}_c = 2E_T/3$ e $\bar{E}_c = 3E_T/5$, respectivamente, para o Nelson e para o Quártico. Para os parâmetros das figuras 4.5a e 4.5b, obtemos, respectivamente,

- $E_c(0) = 0.38$ e $E_o(0)/E_c(0) = 1.0 \Rightarrow \bar{E}_o = 0.253$,
- $E_c(0) = 0.38$ e $E_o(0)/E_c(0) = 0.1 \Rightarrow \bar{E}_o = 0.139$,

e para as figuras 4.6a e 4.6b, obtemos, respectivamente

- $E_c(0) = 5.0$ e $E_o(0)/E_c(0) = 5.0 \Rightarrow \bar{E}_o = 12$,
- $E_c(0) = 5.0$ e $E_o(0)/E_c(0) = 0.2 \Rightarrow \bar{E}_o = 2.4$,

Em todos os casos, os valores numéricos das energias de equilíbrio do oscilador são muito próximas a essas previsões estatísticas.

Retornamos agora à questão da temperatura. Mostraremos que além de ser possível definir uma temperatura para nossos sub-sistemas, o equilíbrio definido pela igualdade dessas temperaturas resulta na mesma partição das energias médias preditas pela análise estatística acima. Primeiro, consideramos a definição usual de temperatura dada por

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}. \quad (4.49)$$

na qual

$$S = k_B \ln n(E), \quad (4.50)$$

é a entropia e $n(E)$ é a densidade de estados dada por (4.42). O equilíbrio térmico entre o oscilador e o sistema caótico implica que $\partial S_o/\partial E_o = \partial S_c/\partial E_c$. Contudo, porque $n_o(E)$ não depende de E , tem-se $T_o = T_c = \infty$, e a condição de equilíbrio fica sem sentido.

Estudos recentes [45, 46] propuseram modificações no cálculo da entropia que, apesar de irrelevantes para sistemas grandes, fazem muita diferença para sistemas pequenos. A ref.[45] sugere correções dinâmicas do princípio de Boltzmann (eq.(4.50)).

Por outro lado, a ref.[46] argumenta que a entropia nas eqs.(4.49) e (4.50) deveria ser modificada por

$$S_{\Phi} = k_B \ln \Phi(E), \quad (4.51)$$

onde $n(E) = \frac{d\Phi(E)}{dE}$. É possível mostrar que as eqs.(4.50) e (4.51) levam a resultados idênticos no limite termodinâmico, o que não acontece para sistemas pequenos, onde (4.51) é capaz de descrever bem os resultados de simulações numéricas.

Para o modelo em questão, temos $\Phi_o(E) \propto E$, $\Phi_{NS}(E) \propto E^2$ e $\Phi_{QS}(E) \propto E^{3/2}$. A condição de equilíbrio pode ser obtida igualando as temperaturas do oscilador e do sistemas caótico, calculadas com a entropia modificada na eq.(4.51). Para o sistema Nelson, encontramos

$$\frac{\partial \ln \Phi_o(E_o)}{\partial E_o} = \frac{\partial \ln \Phi_{NS}(E_c)}{\partial E_c} \quad \rightarrow \quad \frac{E_o}{E_c} = \frac{1}{2} \quad (4.52)$$

e para o sistema Quártico

$$\frac{\partial \ln \Phi_o(E_o)}{\partial E_o} = \frac{\partial \ln \Phi_{QS}(E_c)}{\partial E_c} \quad \rightarrow \quad \frac{E_o}{E_c} = \frac{2}{3}. \quad (4.53)$$

Estes resultados estão em completada concordância com aqueles obtidos via densidades de probabilidade. Considerando que nossas energias de equilíbrio teóricas descrevem muito bem os cálculos numéricos e a concordância entre essas energias e as condições de equilíbrio térmico, podemos concluir que a temperatura T^{Φ} é na verdade um bom parâmetro para caracterizar o equilíbrio.

Gostaríamos de mencionar também que não é esperado que a função de distribuição inicial, que é microcanônica somente nos graus de liberdade caótico, evolua para uma distribuição completamente microcanônica sobre o sistema todo. Isto porque a dinâmica do sistema todo é provavelmente mista, não ergódica. Entretanto, a concordância entre as distribuições de energia para tempos longos com os cálculos acima sugerem que a dinâmica é, pelo menos, aproximadamente ergódica, no sentido de que trajetórias típicas exploram grande parte da superfície de energia disponível.

É interessante notar que ambas as análises para tempos curtos e longos permitem uma determinação das energias iniciais $E_o(0)$ e $E_c(0)$ tais que nenhuma troca de energia ocorra entre os sub-sistemas, em média. Para tempos curtos, isso é dado pela condição $A = 0$, eq.(4.22) para o sistema Nelson. Para os parâmetros da figura 4.5, essa condição fornece $E_o(0)/E_c(0) \approx 0.25$. Para tempos longos, como

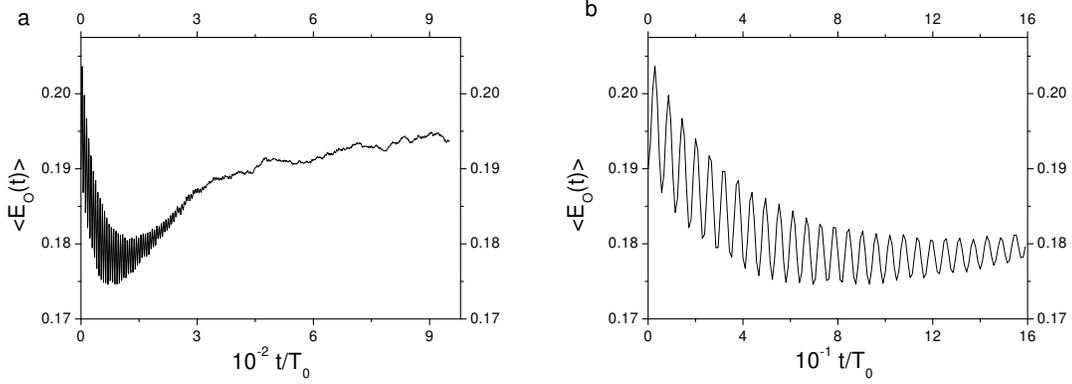


Figura 4.11: (a) $\langle E_o(t) \rangle$ para $E_c(0) = 0.38$ e $E_o(0) = E_c(0)/2 = 0.19$ para SN. (b) Aumento do intervalo de tempo de 0 a 2×10^5 mostrando a dissipação inicial de energia.

$\bar{E}_o = E_T/3$, impondo $\bar{E}_o = E_o(0)$ e $E_T = E_o(0) + E_c(0)$, obtemos $E_o(0)/E_c(0) = 0.5$. As duas estimativas claramente discordam, o que significa que, para tempos intermediários, correções não-lineares à teoria linear se tornam importantes e mudam o comportamento da energia média. Em outras palavras, a dinâmica a tempos curtos é completamente determinada pelas propriedades do sistema caótico isolado enquanto que o comportamento a tempos longos é ditado pelas propriedades estatísticas do sistema completo. A mesma discussão se aplica ao sistema Quártico. A figura 4.11 mostra $\langle E_o(t) \rangle$ para $E_c(0) = 0.38$ e $E_o(0) = E_c(0)/2 = 0.19$. Esta é a condição para nenhuma troca de energia em tempos longos, mas corresponde a uma situação que o oscilador deveria perder energia em tempos curtos. É exatamente o que acontece: o comportamento a tempos longos na figura 4.11a mostra que a energia média do oscilador é, na verdade, aproximadamente a sua energia inicial. Entretanto, para tempos curtos, figuras 4.11a e b, o oscilador claramente perde energia, reabsorvendo-a mais tarde. A discordância entre as condições de equilíbrio em tempos curtos e longos pode também estar relacionada a baixa dimensionalidade do sistema caótico [47].

Capítulo 5

Abordagem Quântica

5.1 Formulação em Funcionais de Influência

Passemos agora à abordagem quântica do modelo proposto no Capítulo anterior. Vamos considerar, primeiro, a situação geral em que temos dois sistemas quaisquer acoplados mas que somente um deles nos interessa. Queremos uma descrição quântica desse sistema eliminando, de alguma maneira, as coordenadas do sistema que não nos interessa. Uma forma de fazer isso é usando o formalismo desenvolvido por Feynman e Vernon[23] que trata esse problema de maneira eficiente, como já foi mostrado em outros trabalhos importantes [21]. Nosso objetivo é considerar o modelo do Capítulo anterior do ponto de vista quântico e mostrar que, da mesma maneira que no caso clássico, H_c pode influenciar a dinâmica de H_0 de maneira semelhante a um sistema de muitos graus de liberdade. Assim como no caso clássico, a escolha de H_0 como oscilador harmônico facilita os cálculos. A escolha de V_I também se deve a sua simplicidade e a sua relevância na modelagem do acoplamento de vários sistemas físicos.

Uma maneira de introduzir o formalismo de funcionais de influência criado por Feynman e Vernon é construir a equação de movimento do operador densidade reduzido de H_0 a partir do operador densidade de H . Denotando as coordenadas do sistema caótico por $(x, y) = X$ e do oscilador por z e sendo $\psi(t)$ a função de onda do sistema todo, temos

$$\hat{\rho}(T) = |\psi(T)\rangle\langle\psi(T)| = e^{-i\hat{H}T/\hbar}|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|e^{i\hat{H}T/\hbar} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \rho(z(T), X(T), z'(T), X'(T)) = \\
&= \langle z, X | \psi(T) \rangle \langle \psi(T) | z', X' \rangle \\
&= \int dz(0) dz'(0) dX(0) dX'(0) \langle z, X | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | z(0), X(0) \rangle \langle z(0), X(0) | \psi(0) \rangle \\
&\quad \langle \psi(0) | z'(0), X'(0) \rangle \langle z'(0), X'(0) | e^{i\hat{H}T/\hbar} | z', X' \rangle \\
&= \int dz(0) dz'(0) dX(0) dX'(0) K(z(T), X(T), z(0), X(0)) \psi(z(0), X(0)) \\
&\quad K^*(z'(T), X'(T), z'(0), X'(0)) \psi^*(z'(0), X'(0)), \tag{5.1}
\end{aligned}$$

onde

$$K(z(T), X(T), z(0), X(0)) = \int Dz(t)DX(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[z(t), X(t)] \right], \tag{5.2}$$

é o propagador de Feynman em termos de integrais de caminho [49] e

$$\begin{aligned}
S[z(t), X(t)] &= \int_0^T dt L(z(t), X(t)) \\
&= \int_0^T dt (L_0(z(t)) + L_c(X(t)) + L_I(z(t), X(t))). \tag{5.3}
\end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
&\rho(z(T), X(T), z'(T), X'(T)) = \\
&= \int dz(0) dz'(0) dX(0) dX'(0) Dz(t) Dz'(t) DX(t) DX'(t) \\
&\quad \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S[z(t), X(t)] - S[z'(t), X'(t)]) \right] \rho(z(0), X(0), z'(0), X'(0)), \tag{5.4}
\end{aligned}$$

onde

$$\rho(z(0), X(0), z'(0), X'(0)) = \psi(z(0), X(0)) \psi^*(z'(0), X'(0)). \tag{5.5}$$

Vamos supor que, inicialmente, os dois sistemas estavam desacoplados e que o estado inicial pode ser escrito como

$$\rho(z(0), X(0), z'(0), X'(0)) = \rho_0(z(0), z'(0)) \rho_c(X(0), X'(0)). \tag{5.6}$$

Definindo a densidade resuzida como

$$\rho_0(z(T), z'(T)) = \int dX(T) \rho(z(T), X(T), z'(T), X(T)), \tag{5.7}$$

temos

$$\begin{aligned} \rho_0(z(T), z'(T)) &= \int dz(0)dz'(0)Dz(t)Dz'(t) \\ &\left\{ \int dX(0)dX'(0)dX(T)dX'(T)DX(t)DX'(t)\delta(X(T) - X'(T)) \right. \\ &\exp \left[\frac{i}{\hbar}(S_c[X(t)] - S_c[X'(t)] + S_I[z(t), X(t)] - S_I[z'(t), X'(t)]) \right] \\ &\left. \rho_c(X(0), X'(0)) \right\} \exp \left[\frac{i}{\hbar}(S_0[z(t)] - S_0[z'(t)]) \right] \rho_0(z(0), z'(0)), \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde

$$\begin{aligned} S &= S_0 + S_c + S_I \\ &= \int dt L_0 + \int dt L_c + \int dt L_I. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Definimos então o chamado funcional de influência

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[z, z'] &= \int dX(0)dX'(0)dX(T)dX'(T)DX(t)DX'(t)\delta(X(T) - X'(T)) \\ &\exp \left[\frac{i}{\hbar}(S_c[X(t)] - S_c[X'(t)] + S_I[z(t), X(t)] - S_I[z'(t), X'(t)]) \right] \\ &\rho_c(X(0), X'(0)), \end{aligned} \quad (5.10)$$

e a expressão para $\rho_0(z(T), z'(T))$ fica

$$\rho_0(z(T), z'(T)) = \int dz(0)dz'(0)J(z(T), z'(T), z(0), z'(0))\rho_0(z(0), z'(0)), \quad (5.11)$$

onde

$$J(z(T), z'(T), z(0), z'(0)) = \int Dz(t)Dz'(t)\mathcal{F}[z(t), z'(t)] \exp \left[\frac{i}{\hbar}(S_0[z(t)] - S_0[z'(t)]) \right] \quad (5.12)$$

Primeiramente, vemos que a equação (5.11) fornece o operador densidade reduzido no instante T . Portanto, ela descreve a dinâmica quântica do sistema de interesse sob influência de um outro sistema. Justamente por isso, esse formalismo também pode ser enquadrado na categoria da Mecânica Estatística de não-equilíbrio.

Toda a informação sobre o sistema interagente está contida no funcional \mathcal{F} e J (que chamaremos de superpropagador) é a integral de caminho do produto de duas amplitudes: uma que guarda a informação do sistema interagente e outra que

dá a evolução usual do sistema de interesse quando desacoplado. Dessa maneira, vemos que quando não existe interação entre os sistemas, $\mathcal{F} = 1$ e J é o propagador de Feynman usual para a evolução temporal do operador densidade. Nosso objetivo agora será calcular J , já que nele está contida toda a dinâmica do sistema de interesse.

5.2 Cálculo do Superpropagador

Vamos assumir que, inicialmente, o sistema interagente está num autoestado de energia $\phi_a(X)$. Isto implica que

$$\rho_c(X(0), X'(0)) = \phi_a(X(0))\phi_a^*(X'(0)). \quad (5.13)$$

Esta condição inicial é o análogo quântico da condição inicial clássica escolhida para o sistema caótico, ou seja, tanto classicamente quanto quanticamente, o sistema caótico está num ensemble microcanônico.

Outro fato importante de se mencionar é que L_c não é quadrática, logo, teremos que tratar \mathcal{F} de maneira perturbativa. Reescrevendo \mathcal{F} , temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[z, z'] = & \int dX(0) \dots DX'(t) \delta(X(T) - X'(T)) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_c[X] - S_c[X']) \right] \times \\ & \exp \left[-\gamma \frac{i}{\hbar} \left(\int_0^T dt [z(t)x(t) - z'(t)x'(t)] \right) \right] \phi_a(X(0))\phi_a^*(X'(0)). \end{aligned} \quad (5.14)$$

Expandindo até segunda ordem o termo de interação, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[z, z'] = & \int dX(0) \dots DX'(t) \delta(X(T) - X'(T)) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_c[X] - S_c[X']) \right] \\ & \left\{ 1 + \left(\frac{-i\gamma}{\hbar} \right) \int_0^T dt [z(t)x(t) - z'(t)x'(t)] + \left(\frac{-i\gamma}{\hbar} \right)^2 \int_0^T dt \int_0^t ds [z(t)x(t) - \right. \\ & \left. z'(t)x'(t)][z(s)x(s) - z'(s)x'(s)] \right\} \phi_a(X(0))\phi_a^*(X'(0)). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Esses termos podem ser calculados introduzindo conjuntos completos de autoestados de H_c . O resultado, que pode ser acompanhado em Feynman e Vernon[23], é

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[z, z'] = & 1 - \left(\frac{i\gamma}{\hbar} \right) X_{aa} \int_0^T dt [z(t) - z'(t)] \\ & - \left(\frac{\gamma^2}{\hbar} \right) \int_0^T dt \int_0^t ds [z(t) - z'(t)][z(s)F_a^*(t-s) - z'(s)F_a(t-s)], \end{aligned} \quad (5.16)$$

onde

$$F_a(t-s) = \sum_b \frac{|X_{ba}|^2}{\hbar} \exp[i\omega_{ba}(t-s)], \quad \omega_{ba} = \frac{E_b - E_a}{\hbar}, \quad (5.17)$$

$$X_{ba} = \int dX \phi_b^*(X) x \phi_a(X), \quad (5.18)$$

e E_b são as auto-energias do sistema interagente e x a coordenada de H_c presente em V_I .

Vamos desprezar os termos com X_{aa} pois o efeito que eles causam é adicionar um potencial $V(z) = \gamma X_{aa} z$ ao sistema de interesse. Além disso, todos os sistemas caóticos de nosso interesse são simétricos em x , o que implica que $X_{aa} = 0$. Portanto, a forma final para \mathcal{F} é:

$$\mathcal{F}[z, z'] = 1 - \alpha_a[z, z'], \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned} \alpha_a[z, z'] &= \frac{1}{\hbar} \Phi[z, z'] \\ &= \frac{\gamma^2}{\hbar} \int_0^T dt \int_0^t ds [z(t) - z'(t)] [z(s) F_a^*(t-s) - z'(s) F_a(t-s)] \end{aligned} \quad (5.20)$$

Considerando que o acoplamento é pequeno

$$\mathcal{F}[z, z'] = 1 - \alpha_a[z, z'] \approx \exp -\alpha_a[z, z'] = \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \Phi[z, z'] \right] \quad (5.21)$$

Portanto, de (5.12), podemos escrever

$$J(z(T), z'(T), z(0), z'(0)) = \int Dz(t) Dz'(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\tilde{S}_0[z, z'] + i\Phi[z, z']) \right], \quad (5.22)$$

$$\tilde{S}_0[z, z'] = S_0[z] - S_0[z']. \quad (5.23)$$

Definindo uma ação efetiva como

$$\tilde{S}_{ef}[z, z'] = \tilde{S}_0[z, z'] + i\Phi[z, z'], \quad (5.24)$$

vamos reescrevê-la em termos de novas variáveis $r(t) = (z(t) + z'(t))/2$ e $y(t) = z(t) - z'(t)$ [41]

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{ef}[r(t), y(t)] &= \int_0^T dt m [\dot{r}(t) \dot{y}(t) - \omega_0^2 r(t) y(t)] \\ &+ i\gamma^2 \int_0^T dt \int_0^t ds y(t) [y(s) F_a'(t-s) - 2ir(s) F_a''(t-s)], \end{aligned} \quad (5.25)$$

onde separamos as partes real e imaginária de F_a como

$$F_a(t-s) = F'_a(t-s) + iF''_a(t-s). \quad (5.26)$$

Definindo

$$\tilde{S}[r(t), y(t)] \equiv \int_0^T dt \left\{ m[\dot{r}(t)\dot{y}(t) - \omega_0^2 r(t)y(t)] + 2\gamma^2 y(t) \int_0^t ds F''_a(t-s)r(s) \right\}, \quad (5.27)$$

$$\phi[r(t), y(t)] \equiv \gamma^2 \int_0^T dt \int_0^t ds y(t)y(s)F'_a(t-s). \quad (5.28)$$

Temos que

$$J(r(T), y(T), r(0), y(0)) = \int Dr(t)Dy(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{S}[r(t), y(t)] \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \phi[r(t), y(t)] \right\}. \quad (5.29)$$

Vamos resolver esta integral de caminho extremando $\tilde{S}[r(t), y(t)]$ que é quadrática. Consideramos um caminho vizinho ao caminho $(r_e(t), y_e(t))$ que extrema \tilde{S} . Esse caminho pode ser escrito como

$$r(t) = r_e(t) + \delta r(t) = r_e(t) + \epsilon_1 \tilde{r}(t) \quad , \quad (5.30)$$

$$y(t) = y_e(t) + \delta y(t) = y_e(t) + \epsilon_2 \tilde{y}(t) \quad , \quad (5.31)$$

onde $\tilde{r}(T) = \tilde{r}(0) = 0$ e $\tilde{y}(T) = \tilde{y}(0) = 0$.

Logo,

$$\begin{aligned} \tilde{S}[r_e(t) + \epsilon_1 \tilde{r}(t), y_e(t) + \epsilon_2 \tilde{y}(t)] = & \\ & \int_0^T dt m[(\dot{r}_e(t) + \epsilon_1 \dot{\tilde{r}}(t))(\dot{y}_e(t) + \epsilon_2 \dot{\tilde{y}}) - \omega_0^2 (r_e(t) + \epsilon_1 \tilde{r}(t))(y_e(t) + \epsilon_2 \tilde{y})] \\ & + 2\gamma^2 \int_0^T dt \int_0^t ds (y_e(t) + \epsilon_2 \tilde{y}(t))(r_e(s) + \epsilon_1 \tilde{r}(s))F''_a(t-s) \Rightarrow \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \tilde{S}[r_e(t) + \epsilon_1 \tilde{r}(t), y_e(t) + \epsilon_2 \tilde{y}(t)] - \tilde{S}[r_e(t), y_e(t)] = & \\ \epsilon_1 \left\{ \int_0^T dt m[\dot{\tilde{r}}(t)\dot{y}_e(t) - \omega_0^2 \tilde{r}(t)y_e(t)] + 2\gamma^2 \int_0^T dt \int_0^t ds y_e(t)\tilde{r}(s)F''_a(t-s) \right\} & \\ + \epsilon_2 \left\{ \int_0^T dt m[\dot{r}_e(t)\dot{\tilde{y}}(t) - \omega_0^2 r_e(t)\tilde{y}(t)] + 2\gamma^2 \int_0^T dt \int_0^t ds \tilde{y}(t)r_e(s)F''_a(t-s) \right\} & \\ + O(\epsilon_1 \epsilon_2) & \\ = \epsilon_1 \frac{d\Delta\tilde{S}}{d\epsilon_1} + \epsilon_2 \frac{d\Delta\tilde{S}}{d\epsilon_2} + O(\epsilon_1 \epsilon_2). & \end{aligned} \quad (5.33)$$

Extremado, temos que

$$\delta\tilde{S} = \left\{ \frac{\tilde{S}[r_e(t) + \epsilon_1\tilde{r}(t), y_e(t) + \epsilon_2\tilde{y}(t)] - \tilde{S}[r_e(t), y_e(t)]}{\epsilon_1 \text{ ou } \epsilon_2} \right\} = 0 \quad (5.34)$$

$$\text{quando } \epsilon_1, \epsilon_2 \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{d\Delta\tilde{S}}{d\epsilon_1} = 0 \text{ e } \frac{d\Delta\tilde{S}}{d\epsilon_2} = 0. \quad (5.35)$$

Para $d\Delta\tilde{S}/d\epsilon_1$ temos

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta\tilde{S}}{d\epsilon_1} &= \int_0^T dt m[\dot{\tilde{r}}(t)\dot{y}_e(t) - \omega_0^2\tilde{r}(t)y_e(t)] + 2\gamma^2 \int_0^T dt \int_0^t ds y_e(t)\tilde{r}(s)F_a''(t-s) \\ &= (m\tilde{r}(t)\dot{y}_e(t))\Big|_0^T - \int_0^T dt m[\tilde{r}(t)\ddot{y}_e(t) + \omega_0^2\tilde{r}(t)y_e(t)] \\ &\quad + \gamma^2 \int_0^T dt \int_0^T ds \tilde{r}(t)y_e(s)F_a''(s-t) \\ &= - \int_0^T dt \tilde{r}(t) \left\{ m[\ddot{y}_e(t) + \omega_0^2 y_e(t)] - 2\gamma^2 \int_0^t ds F_a''(s-t)y_e(s) \right\}, \quad (5.36) \end{aligned}$$

onde usamos $\tilde{r}(T) = \tilde{r}(0) = 0$ e $\int_0^T dt \int_0^T ds = 2 \int_0^T dt \int_0^t ds$.

Como $\tilde{r}(t)$ é qualquer (satisfazendo as condições de contorno especificadas)

$$\frac{d\Delta\tilde{S}}{d\epsilon_1} = 0 \Rightarrow \ddot{y}_e(t) + \omega_0^2 y_e(t) - \frac{2\gamma^2}{m} \int_0^t ds F_a''(s-t)y_e(s) = 0. \quad (5.37)$$

Analogamente:

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta\tilde{S}}{d\epsilon_2} &= \int_0^T dt m[\dot{r}_e(t)\dot{\tilde{y}}(t) - \omega_0^2 r_e(t)\tilde{y}(t)] + 2\gamma^2 \int_0^T dt \int_0^t ds \tilde{y}(t)r_e(s)F_a''(t-s) \\ &= (m\dot{r}_e(t)\tilde{y}(t))\Big|_0^T - \int_0^T dt m[\ddot{r}_e(t)\tilde{y}(t) + \omega_0^2 r_e(t)\tilde{y}(t)] \\ &\quad + 2\gamma^2 \int_0^T dt \int_0^t ds \tilde{y}(t)r_e(s)F_a''(t-s) \\ &= - \int_0^T dt \tilde{y}(t) \left\{ m[\ddot{r}_e(t) + \omega_0^2 r_e(t)] - 2\gamma^2 \int_0^t ds F_a''(t-s)r_e(s) \right\}, \quad (5.38) \end{aligned}$$

usando $\tilde{y}(T) = \tilde{y}(0) = 0$.

Como $\tilde{y}(t)$ é qualquer

$$\frac{d\Delta\tilde{S}}{d\epsilon_2} = 0 \Rightarrow \ddot{r}_e(t) + \omega_0^2 r_e(t) - \frac{2\gamma^2}{m} \int_0^t ds F_a''(t-s)r_e(s) = 0. \quad (5.39)$$

(5.37) e (5.39) são as equações que determinam o caminho que extremiza $\tilde{S}[r(t), y(t)]$.

Vamos calcular $\phi[r(t), y(t)]$

$$\begin{aligned}
\phi[r_e(t) + \epsilon_1 \tilde{r}(t), y_e(t) + \epsilon_2 \tilde{y}(t)] &= \\
&= \frac{1}{2} \gamma^2 \int_0^T dt \int_0^T ds [y_e(t) + \epsilon_2 \tilde{y}(t)] [y_e(s) + \epsilon_2 \tilde{y}(s)] F_a'(t-s) \\
&= \frac{1}{2} \gamma^2 \int_0^T dt \int_0^T ds y_e(t) y_e(s) F_a'(t-s) \\
&\quad + \frac{1}{2} \gamma^2 \epsilon_2 \int_0^T dt \int_0^T ds [\tilde{y}(t) y_e(t) + y_e(s) \tilde{y}(s)] F_a'(t-s) \\
&\quad + \epsilon_2^2 \frac{1}{2} \gamma^2 \int_0^T dt \int_0^T ds \tilde{y}(t) \tilde{y}(s) F_a'(t-s) = \phi[y_e, y_e] + 2\varphi[\tilde{y}, y_e] + \varphi[\tilde{y}, \tilde{y}] \quad (5.40)
\end{aligned}$$

Portanto, de (5.12), temos:

$$\begin{aligned}
J(r(T), y(T), r(0), y(0)) &= \\
&= e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{S}[r_e, y_e]} e^{-\frac{1}{\hbar} \phi[y_e, y_e]} \int_0^0 D\delta y(t) D\delta r(t) e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{S}[\delta r, \delta y]} e^{-\frac{2}{\hbar} \varphi[\delta y, y_e]} e^{-\frac{1}{\hbar} \varphi[\delta y, \delta y]}. \quad (5.41)
\end{aligned}$$

Vamos mostrar que a integral de caminho de (5.41) é uma função dos instantes inicial e final apenas, o que não é óbvio devido à dependência funcional em $y_e(t)$. Para isso, vamos discretizar os caminhos e reescrever a integral em (5.41) como usualmente se faz com as integrais de caminho[49]:

$$\begin{aligned}
&\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{S}[\delta r, \delta y] \right\} \approx \\
&\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{j=1}^N \epsilon m \left(\frac{(\delta r_j - \delta r_{j-1})(\delta y_j - \delta y_{j-1})}{\epsilon^2} - \omega_0^2 \delta r_{j-1} \delta y_{j-1} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \gamma^2 \epsilon^2 \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \delta y_j \delta r_k F''_{a(j-k)} \right] \right\}, \quad (5.42)
\end{aligned}$$

onde $\delta r_j = \delta r(t_j)$ e $F''_{a(j-k)} = F''_a(t_j - t_k)$,

$$\exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \varphi[\delta y, \delta y] \right\} \approx \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_{j=1}^N 2\gamma^2 \epsilon^2 \sum_{k=1}^N \delta y_j \delta y_k F'_{a(j-k)} \right\}, \quad (5.43)$$

$$\exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \varphi[\delta y, y_e] \right\} \approx \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_{j=1}^N 4\gamma^2 \epsilon^2 \sum_{k=1}^N \delta y_j y_{e_k} F'_{a(j-k)} \right\}, \quad (5.44)$$

Agrupando as fases temos

$$\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{S}[\delta r, \delta y] \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \varphi[\delta y, \delta y] \right\} \approx \exp \left\{ -\frac{i}{2} U^T M U \right\}, \quad (5.45)$$

$$U^T \equiv (\delta r_1 \dots \delta r_N \delta y_1 \dots \delta y_N) \quad M \equiv \begin{pmatrix} 0 & p \\ p & r \end{pmatrix}, \quad (5.46)$$

onde p e r são matrizes $N \times N$.

Para a fase restante, temos a forma

$$\exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \varphi[\delta y, y_e] \right\} \approx \exp [-A^T U], \quad (5.47)$$

onde $A^T = (0 \ a)$ e a é um vetor N -dimensional.

Portanto, podemos escrever a integral de caminho em (5.41) como

$$\mathcal{N} \int dU \exp [-U^T M U] \exp [-A^T U], \quad (5.48)$$

onde $dU = d\delta r_1 \dots d\delta r_N d\delta y_1 \dots d\delta y_N$ é o elemento de volume. A solução da equação acima é [22, 50]

$$\frac{1}{(\det M)^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{4} A^T M^{-1} A \right]. \quad (5.49)$$

Como M tem o bloco superior esquerdo nulo, sua inversa terá o bloco inferior direito nulo, logo, o produto $A^T M^{-1} A$ será nulo. Como toda a dependência com as posições iniciais e finais está em A , vemos que realmente o resultado da integral de caminho em (5.41) é uma função só dos instantes final e inicial.

Dessa maneira, podemos escrever o superpropagador J como

$$J(r(T), y(T), r(0), y(0)) = G(T, 0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{S}[r_e, y_e] \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \varphi[y_e, y_e] \right\}, \quad (5.50)$$

e $G(T, 0)$ pode ser obtida impondo que o operador densidade reduzido seja normalizado. Para obtermos a expressão completa de J , só nos falta portanto, obter os caminhos $r_e(t)$ e $y_e(t)$ das equações (5.37) e (5.39). No caso de um sistema integrável, podemos obter a função F_a analiticamente pois conhecemos o espectro

analiticamente. Faremos isso para o caso de um oscilador harmônico unidimensional. Da definição de F_a , temos:

$$F_a(t-s) = \sum_b \frac{|\langle b|\hat{x}|a\rangle|^2}{\hbar} \exp[i\omega_{ba}(t-s)], \quad (5.51)$$

onde $\{|n\rangle\}$ são os autoestados de energia do oscilador harmônico e \hat{x} é o operador posição associado à coordenada x . Reescrevendo o elemento de matriz

$$\begin{aligned} \langle b|\hat{x}|a\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle b|(\hat{a} + \hat{a}^+)|a\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [a^{1/2}\langle b|a-1\rangle + (a+1)^{1/2}\langle b|a+1\rangle] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [a^{1/2}\delta_{b,a-1} + (a+1)^{1/2}\delta_{b,a+1}] \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |\langle b|\hat{x}|a\rangle|^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} [a\delta_{b,a-1} + 2a^{1/2}(a+1)^{1/2}\delta_{b,a-1}\delta_{b,a+1} + (a+1)\delta_{b,a+1}], \quad (5.52)$$

onde m e ω são a massa e a frequência do oscilador, respectivamente. Fazendo $m = 1$ e substituindo (5.52) em (5.51) temos

$$\begin{aligned} F_a(t-s) &= \sum_b \frac{1}{2\omega} [a\delta_{b,a-1} + 2a^{1/2}(a+1)^{1/2}\delta_{b,a+1} + (a+1)\delta_{b,a+1}] \exp[i\omega_{ba}(t-s)] \\ &= \frac{1}{2\omega} \{a \exp[i\omega_{a-1,a}(t-s)] + (a+1) \exp[i\omega_{a+1,a}(t-s)]\} \\ &= \frac{1}{2\omega} \left\{ a \exp\left[i\frac{(E_{a-1} - E_a)}{\hbar}(t-s)\right] + (a+1) \exp\left[i\frac{(E_{a+1} - E_a)}{\hbar}(t-s)\right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.53)$$

Lembrando que

$$a = \frac{E_a}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad a+1 = \frac{E_a}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}, \quad (5.54)$$

a equação (5.53) fica

$$\begin{aligned} F_a(t-s) &= \frac{1}{2\omega} \left(\frac{E_a}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) e^{[i\frac{(-\hbar\omega)}{\hbar}(t-s)]} + \frac{1}{2\omega} \left(\frac{E_a}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \right) e^{[i\frac{\hbar\omega}{\hbar}(t-s)]} \\ &= \frac{1}{2\hbar\omega^2} E_a \{e^{[i\omega(t-s)]} + e^{[-i\omega(t-s)]}\} + \frac{1}{2\omega} \left\{ \frac{e^{[i\omega(t-s)]} - e^{[-i\omega(t-s)]}}{2} \right\} \\ &= \frac{E_a}{\hbar\omega} \frac{\cos[\omega(t-s)]}{\omega} + \frac{i}{2} \frac{\sin[\omega(t-s)]}{\omega} \\ &= F'_a(t-s) + iF''_a(t-s). \end{aligned} \quad (5.55)$$

Substituindo a expressão obtida acima para F_a'' na equação (5.39) temos

$$\begin{aligned} \ddot{r}_e(t) + \omega_0^2 r_e(t) - \frac{2\gamma^2}{m} \int_0^t ds \left\{ \frac{\sin[\omega(t-s)]}{2\omega} \right\} r_e(s) &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \ddot{r}_e(t) + \omega_0^2 r_e(t) - \frac{\gamma^2}{m} \int_0^t ds \frac{\sin[\omega(t-s)]}{\omega} r_e(s) &= 0. \end{aligned} \quad (5.56)$$

O análogo clássico do caso de termos um oscilador harmônico unidimensional como sistema interagente é descrito pela Hamiltoniana

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 z^2}{2} + \gamma z x + \frac{p_x^2}{2} + \frac{\omega^2 x^2}{2}, \quad (5.57)$$

que fornece as seguintes equações de movimento

$$\ddot{z}(t) + \omega_0^2 z(t) = -\frac{\gamma}{m} x(t), \quad (5.58)$$

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = -\gamma z(t). \quad (5.59)$$

A solução de (5.59) é

$$\begin{aligned} x(t) &= \left[x(0) \cos(\omega t) + \frac{p_x(0)}{\omega} \sin(\omega t) \right] - \gamma \int_0^t ds \frac{\sin[\omega(t-s)]}{\omega} z(s) \\ &= x_d(t) - \gamma \int_0^t ds \frac{\sin[\omega(t-s)]}{\omega} z(s). \end{aligned} \quad (5.60)$$

Como no caso do oscilador harmônico a resposta linear é a resposta total do oscilador sob efeito de uma perturbação, temos que, no ensemble microcanônico

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \langle x(t) \rangle_e - \gamma \int_0^t ds \frac{\sin[\omega(t-s)]}{\omega} z(s) \\ &= -\gamma \int_0^t ds \frac{\sin[\omega(t-s)]}{\omega} z(s), \end{aligned} \quad (5.61)$$

onde $\langle x(t) \rangle_e = 0$ devido à simetria do oscilador.

Portanto, sob o efeito médio do oscilador:

$$\begin{aligned} \ddot{z}(t) + \omega_0^2 z(t) &= -\frac{\gamma}{m} \langle x(t) \rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow \ddot{z}(t) + \omega_0^2 z(t) - \frac{\gamma^2}{m} \int_0^t ds \frac{\sin[\omega(t-s)]}{\omega} z(s) &= 0. \end{aligned} \quad (5.62)$$

Considerando que no limite clássico, $r_e(t) \rightarrow z(t)$ [41], vemos que (5.56) é idêntica a (5.62). Apesar do cálculo quântico ser perturbativo até segunda ordem, no caso do

oscilador harmônico, cuja Lagrangiana é quadrática, isso equivale ao cálculo exato. Mostramos, portanto, que o cálculo quântico está correto.

Assim como nos resultados clássicos, vemos que integrando o termo de convolução de (5.39) por partes, obtemos uma equação de Langevin que descreve um movimento dissipativo para $r_e(t)$ quando $F_a''(t-s)$ é uma função que decai com o tempo. No caso clássico, vimos que isso é possível para um sistema caótico. Queremos agora saber se em regime semiclássico, a função $F_a''(t-s)$ para um sistema caótico apresenta este comportamento, diferentemente do que acontece, como vimos no caso do oscilador harmônico, com um sistema integrável.

Podemos reescrever a função F_a como

$$F_a(t) = \frac{\langle a | \hat{x}(0) \hat{x}(t) | a \rangle}{\hbar} = F_a'(t) + iF_a''(t). \quad (5.63)$$

Para a parte real, temos

$$\begin{aligned} 2F_a'(t) &= F_a(t) + F_a^*(t) = \frac{\langle a | \hat{x}(0) \hat{x}(t) | a \rangle}{\hbar} + \frac{\langle a | \hat{x}(0) \hat{x}(t) | a \rangle^*}{\hbar} \\ &= \frac{\langle a | \hat{x}(0) \hat{x}(t) | a \rangle}{\hbar} + \frac{\langle a | \hat{x}(t) \hat{x}(0) | a \rangle}{\hbar} = \frac{\langle a | \{ \hat{x}(0), \hat{x}(t) \} | a \rangle}{\hbar} \Rightarrow \\ \Rightarrow F_a'(t) &= \frac{\langle a | \{ \hat{x}(0), \hat{x}(t) \} | a \rangle}{2\hbar}, \end{aligned} \quad (5.64)$$

onde $\{.\}$ é o anticomutador. Para a parte imaginária, temos:

$$\begin{aligned} 2iF_a''(t) &= F_a(t) - F_a^*(t) = \frac{\langle a | \hat{x}(0) \hat{x}(t) | a \rangle}{\hbar} - \frac{\langle a | \hat{x}(0) \hat{x}(t) | a \rangle^*}{\hbar} \\ &= \frac{\langle a | \hat{x}(0) \hat{x}(t) | a \rangle}{\hbar} - \frac{\langle a | \hat{x}(t) \hat{x}(0) | a \rangle}{\hbar} = \frac{\langle a | [\hat{x}(0), \hat{x}(t)] | a \rangle}{\hbar} \Rightarrow \\ \Rightarrow F_a''(t) &= \frac{\langle a | [\hat{x}(0), \hat{x}(t)] | a \rangle}{2i\hbar}, \end{aligned} \quad (5.65)$$

onde $[.]$ é o comutador.

As partes real e imaginária são, respectivamente, os análogos quânticos da função de correlação posição-posição e da função resposta. Vemos, então, que o problema quântico fica escrito em termos das versões quânticas das mesmas funções do caso clássico. Nosso objetivo passa a ser o cálculo semiclássico de $F_a(t)$.

5.3 Funções de Correlação Semiclássicas

Como apresentado na seção anterior, para podermos finalizar o cálculo do operador densidade reduzido, necessitamos de uma expressão semiclássica da função $F_a(t)$

que incorpore os aspectos da dinâmica clássica subjacente do sistema interagente. Segundo (5.63), $F_a(t)$ pode ser encarada como um elemento de matriz semiclássico de um operador. O cálculo de elementos de matriz semiclássicos é um assunto com grande progresso [51, 52] e que formula seus resultados em termos de quantidades da dinâmica clássica. Da mesma maneira, já existem formulações semiclássicas da Teoria de Resposta Linear [53, 54] com grande sucesso. Em particular, Richter [54] calcula, para um sistema num ensemble canônico e com desordem, que os dois termos mais importantes da transformada de Fourier da função resposta semiclássica são, primeiro, um termo suave que envolve uma função de correlação puramente clássica da variável dinâmica do acoplamento e, segundo, um termo oscilante que fornece a primeira correção quântica que envolve, como de praxe, as órbitas periódicas do sistema, seja ele integrável ou caótico. Devido a estes resultados, esperamos que, ao calcular as funções semiclássicas de correlação e resposta no ensemble microcanônico, encontremos também uma expansão dessa forma, na qual, basicamente, tenhamos um primeiro termo simplesmente clássico e uma correção em termos de órbitas periódicas. Isso seria exatamente o que precisaríamos para incorporar os efeitos do caos no cálculo do operador densidade reduzido já que, como vimos, as formas clássicas das funções resposta e de correlação já são fundamentalmente diferentes das respectivas no caso integrável.

Existem pelo menos duas abordagens principais para calcular $F_a(t)$ semiclassicamente e que serão descritas a seguir.

5.3.1 Abordagem via Matrizes Aleatórias

Da expressão (5.63) para F_a temos

$$F_a(t) = \frac{\langle a | \hat{x}(0) \hat{x}(t) | a \rangle}{\hbar} = \sum_b \frac{|\langle b | \hat{x} | a \rangle|^2}{\hbar} \exp(i\omega_{ba}t), \quad (5.66)$$

que reescrevemos como

$$F_a(t) = \sum_b \frac{|x_{ab}|^2}{\hbar} \exp\left[i \frac{(E_b - E_a)}{\hbar} t\right]. \quad (5.67)$$

Se admitirmos que estamos em regime semiclássico e que, portanto, os níveis de energia são muito próximos uns dos outros, podemos passar a expressão acima para

o contínuo da seguinte maneira

$$\sum_b \rightarrow \int dE d(E) \text{ e } x_{ab} \rightarrow g(E - E_a), \quad (5.68)$$

na qual $d(E)$ é a densidade de estados. Logo,

$$F_a(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty dE |g(E - E_a)|^2 d(E) \exp \left[i \frac{(E - E_a)}{\hbar} t \right]. \quad (5.69)$$

A expressão acima pode ser explorada da seguinte maneira: tanto a densidade de estados $d(E)$ quanto o comportamento de $g(E - E_a)$ e $E - E_a$ podem ser obtidos via os resultados de Matrizes Aleatórias para elementos de matriz e espaçamento entre níveis quando o sistema possui análogo clássico caótico. Esse método foi adotado por Esposito e Gaspard [17, 18] em problemas similares e não o abordaremos aqui.

5.3.2 Abordagem via Integrais de Trajetória

Para calcular $F_a(t)$ via integrais de caminho, notamos que podemos reescrever (5.63) da seguinte forma

$$F_a(t) = \frac{\langle a | \hat{x}(0) \hat{x}(t) | a \rangle}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \sum_b \langle b | \hat{x}(0) \hat{x}(t) \hat{\rho} | b \rangle, \quad (5.70)$$

sendo

$$\hat{\rho} = |a\rangle\langle a|, \quad (5.71)$$

que é uma representação da distribuição microcanônica quântica na base dos auto-estados de energia. Portanto, $F_a(t)$ pode ser escrita como

$$F_a(t) = \frac{1}{\hbar} \sum_b \langle b | \hat{x}(0) \hat{x}(t) \hat{\rho} | b \rangle = \frac{1}{\hbar} \text{Tr} \hat{O}(t) \hat{\rho} = \frac{1}{\hbar} \langle \hat{O}(t) \rangle, \quad (5.72)$$

na qual, $\langle \cdot \rangle$ denota a média no ensemble microcanônico quântico.

Embora no caso do ensemble canônico, as médias via integrais de caminho sejam facilmente formuláveis devido à similaridade do peso de Boltzmann, $e^{-\beta \hat{H}}$, com o operador de evolução temporal, $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, para o ensemble microcanônico, quando não conhecemos os auto-estados de energia (que é o caso aqui), temos uma complicação devido a forma geral do operador densidade microcanônico

$$\hat{\rho} = \delta(E - \hat{H}), \quad (5.73)$$

que temos que usar para calcular a média de um operador \hat{O} qualquer

$$\text{Tr } \hat{O} \hat{\rho} = \int dx dx' \langle x | \hat{O} | x' \rangle \langle x' | \delta(E - \hat{H}) | x \rangle. \quad (5.74)$$

No entanto, Lawson [55] contornou essa dificuldade utilizando a seguinte representação integral para (5.73),

$$\langle x' | \delta(E - \hat{H}) | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iEz} \langle x' | e^{-iz\hat{H}} | x \rangle, \quad (5.75)$$

na qual o elemento de matriz $\langle x' | e^{-iz\hat{H}} | x \rangle$ tem a forma de um propagador com $z = t/\hbar$.

Utilizando (5.75), Lawson calculou com sucesso as expressões para $\langle x' | \delta(E - \hat{H}) | x \rangle$, via integrais de caminho, no caso da partícula livre e do oscilador harmônico exatamente, além de calcular correções para casos anarmônicos. Nossa intenção é, utilizando (5.75), calcular as expressões semiclássicas para as médias microcanônicas.

Capítulo 6

Funções de Correlação Semiclássicas

Como foi mostrado no Capítulo anterior, $F'_a(t)$ e $F''_a(t)$ são dadas por

$$F'_a(t) = \frac{\langle a | \{\hat{x}(0), \hat{x}(t)\} | a \rangle}{2\hbar} \quad F''_a(t) = \frac{\langle a | [\hat{x}(0), \hat{x}(t)] | a \rangle}{2i\hbar}, \quad (6.1)$$

na qual $\{\cdot\}$ é o anticomutador, $[\cdot]$ é o comutador, $|a\rangle$ é um autoestado de energia do sistema caótico e $\hat{x}(t)$ é o operador de posição na representação de Heisenberg. Podemos reescrever, por exemplo, $F'_a(t)$ da seguinte maneira

$$\begin{aligned} F'_a(t) &= \frac{\langle a | \{\hat{x}(0), \hat{x}(t)\} | a \rangle}{2\hbar} = \frac{1}{2\hbar} \sum_b \langle b | \{\hat{x}(0), \hat{x}(t)\} \hat{\rho} | b \rangle \\ &= \frac{1}{2\hbar} \text{Tr}(\hat{f}(t)\hat{\rho}) = \frac{\langle \hat{f}(t) \rangle}{2\hbar}, \end{aligned} \quad (6.2)$$

sendo $\hat{\rho} = |a\rangle\langle a|$ uma representação da distribuição microcanônica quântica na base dos autoestados de energia.

Seguindo Lawson [55], vamos escrever $\hat{\rho}$ como (a menos de uma normalização)

$$\hat{\rho} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp[i(E_a - \hat{H})z] = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp[i(E_a - \hat{H})s/\hbar], \quad (6.3)$$

na qual escrevemos $z = s/\hbar$, tendo s dimensão de tempo. Devido à correspondência que queremos estabelecer com os análogos clássicos dessas funções, optamos por escrever os traços usando a representação de Wigner-Weyl[56], na qual, um traço como aquele em (6.2), pode ser escrito como

$$\text{Tr}[\hat{f}(t)\hat{\rho}] = \int \frac{d^D q d^D p}{(2\pi\hbar)^D} f(\vec{q}, \vec{p}; t) W(\vec{q}, \vec{p}), \quad (6.4)$$

onde (\vec{q}, \vec{p}) são coordenadas canonicamente conjugadas, D é o número de graus de liberdade, $f(\vec{q}, \vec{p}; t)$ é a transformada ou símbolo de Weyl do operador $\hat{f}(t)$ e $W(\vec{q}, \vec{p})$ é a função de Wigner associada a $\hat{\rho}$.

Vamos mostrar como podemos chegar a (6.4). Como $\hat{\rho}$ diz respeito ao sistema caótico que possui 2 graus de liberdade apenas, podemos expandí-lo nos autoestados de posição da seguinte forma

$$\hat{f}(t) = \int d\vec{q}' d\vec{q}'' |\vec{q}''\rangle \langle \vec{q}'' | \hat{f}(t) | \vec{q}'\rangle \langle \vec{q}'|. \quad (6.5)$$

Inserindo as completezas dos momentos temos

$$\hat{f}(t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\vec{q}' d\vec{q}'' d\vec{p}' d\vec{p}'' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\vec{p}' \cdot \vec{q}' - \vec{p}'' \cdot \vec{q}''] \right\} \langle \vec{q}'' | \hat{f}(t) | \vec{q}'\rangle |\vec{p}''\rangle \langle \vec{p}'|, \quad (6.6)$$

pois

$$\langle \vec{q} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{q} \right), \quad (6.7)$$

já que $\vec{q} = (q_x, q_y)$ e $\vec{p} = (p_x, p_y)$.

Fazendo,

$$\begin{aligned} 2\vec{p} &= \vec{p}'' + \vec{p}' & \vec{v} &= \vec{p}' - \vec{p}'' \\ 2\vec{q} &= \vec{q}'' + \vec{q}' & \vec{u} &= \vec{q}' - \vec{q}'' \end{aligned}, \quad (6.8)$$

tem-se

$$\vec{p}' \cdot \vec{q}' - \vec{p}'' \cdot \vec{q}'' = \vec{p} \cdot \vec{u} - \vec{q} \cdot \vec{v}, \quad (6.9)$$

e portanto

$$\begin{aligned} \hat{f}(t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\vec{q} d\vec{p} \int d\vec{u} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{u} \right) \langle \vec{q} - \vec{u}/2 | \hat{f}(t) | \vec{q} + \vec{u}/2 \rangle \times \\ &\quad \int d\vec{v} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{v} \right) |\vec{p} - \vec{v}/2\rangle \langle \vec{p} + \vec{v}/2| \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\vec{q} d\vec{p} f(\vec{q}, \vec{p}; t) \hat{\Delta}(\vec{q}, \vec{p}). \end{aligned} \quad (6.10)$$

Portanto, com $\hat{f}(t)$ dado por (6.10) e como o traço independe da base, temos

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{f}(t)\hat{\rho}] &= \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\vec{q}d\vec{p}f(\vec{q},\vec{p};t) \int d\vec{v}d\vec{v}' \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{v}\right) \langle\vec{v}'|\vec{p}-\vec{v}/2\rangle\langle\vec{p}+\vec{v}/2|\hat{\rho}|\hat{v}'\rangle. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Como,

$$\langle\vec{v}'|\vec{p}-\vec{v}/2\rangle = \delta(\vec{v}'-\vec{p}+\vec{v}/2), \quad (6.12)$$

implica que

$$\text{Tr}[\hat{f}(t)\hat{\rho}] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\vec{q}d\vec{p}f(\vec{q},\vec{p};t) \int d\vec{v} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{v}\right) \langle\vec{p}+\vec{v}/2|\hat{\rho}|\vec{p}-\vec{v}/2\rangle. \quad (6.13)$$

Podemos mudar de representação de tal maneira que

$$\begin{aligned} \int d\vec{v} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{v}\right) \langle\vec{p}+\vec{v}/2|\hat{\rho}|\vec{p}-\vec{v}/2\rangle &= \int d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{u}\right) \langle\vec{q}-\vec{u}/2|\hat{\rho}|\vec{q}+\vec{u}/2\rangle \\ &= W(\vec{q},\vec{p}) \end{aligned} \quad (6.14)$$

é a função de Wigner associada a $\hat{\rho}$.

Feito isso, temos agora que calcular semiclassicamente $f(\vec{q},\vec{p};t)$ e $W(\vec{q},\vec{p})$. Começaremos por $f(\vec{q},\vec{p};t)$

$$f(\vec{q},\vec{p};t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{u}\right) \langle\vec{q}-\vec{u}/2|\hat{f}(t)|\vec{q}+\vec{u}/2\rangle. \quad (6.15)$$

No caso de $\hat{f}(t) = -i[\hat{x}(0),\hat{x}(t)]$, tem-se

$$\begin{aligned} f(\vec{q},\vec{p};t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{u}\right) \langle\vec{q}-\vec{u}/2|(\hat{x}\hat{x}(t) - \hat{x}(t)\hat{x})|\vec{q}+\vec{u}/2\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{u}\right) (-u_x)\langle\vec{q}-\vec{u}/2|\hat{x}(t)|\vec{q}+\vec{u}/2\rangle \\ &= \hbar\frac{\partial}{\partial p_x} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{u}\right) \langle\vec{q}-\vec{u}/2|\hat{x}(t)|\vec{q}+\vec{u}/2\rangle \right\}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

O termo entre chaves fica

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{u}\right) \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} \langle\vec{q}-\vec{u}/2|e^{i\hat{H}t/\hbar}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\hat{x}e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\vec{q}+\vec{u}/2\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{u}\right) \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} x K^*(\vec{r},\vec{q}-\vec{u}/2;t)K(\vec{r},\vec{q}+\vec{u}/2;t) \end{aligned} \quad (6.17)$$

na qual $\vec{r} = (x, y)$ e $K(\vec{r}, \vec{r}'; t) = \langle \vec{r} | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \vec{r}' \rangle$ é o propagador de Feynman.

Como foi dito anteriormente, não temos acesso, analiticamente, às grandezas quânticas exatas do sistema caótico, ou seja, não temos a expressão analítica para K . Por isso, a integral em \vec{r} em (6.17) será feita semiclassicamente (ver apêndice E). Primeiro, substituímos os propagadores K por suas formas semiclassicas \tilde{K} . Em seguida, calculamos a integral em \vec{r} por fase estacionária. A condição de fase estacionária nos impõe que os caminhos que contribuirão mais serão os que partem de $\vec{q} - \vec{u}/2$ e $\vec{q} + \vec{u}/2$ e chegam a \vec{r} num tempo t , de tal maneira que

$$\nabla_{\vec{r}} R_k(\vec{r}, \vec{q} - \vec{u}/2) - \nabla_{\vec{r}} R_l(\vec{r}, \vec{q} + \vec{u}/2) = 0, \quad (6.18)$$

na qual R_k e R_l são as funções principais de Hamilton que aparecem nas fases de \tilde{K} e \tilde{K}^* . Como os gradientes dessas funções correspondem aos momentos finais, (6.18) impõe que os momentos finais têm que ser iguais.

Se o ponto final da propagação é o mesmo e os momentos finais também, isso significa que os pontos iniciais também devem ser iguais. Portanto,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} x \tilde{K}^*(\vec{r}, \vec{q} - \vec{u}/2; t) \tilde{K}(\vec{r}, \vec{q} + \vec{u}/2; t) \approx x(\vec{q}, \vec{p}; t) \delta(-\vec{u}), \quad (6.19)$$

na qual $x(\vec{q}, \vec{p}; t)$ é o caminho estacionário.

Voltando em (6.16) temos que

$$f(\vec{q}, \vec{p}; t) \approx i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} \bar{x}(\vec{q}, \vec{p}; t). \quad (6.20)$$

Relembrando que o parênteses de Poisson $\{x(0), x(t)\}$, em termos das condições iniciais, é dado por

$$\{x(0), x(t)\} = \frac{\partial x(0)}{\partial x(0)} \frac{\partial x(t)}{\partial p_x(0)} - \frac{\partial x(0)}{\partial p_x(0)} \frac{\partial x(t)}{\partial x(0)} = \frac{\partial x(t)}{\partial p_x(0)}, \quad (6.21)$$

reconhecemos que

$$f(\vec{q}, \vec{p}; t) \approx i\hbar \{x(0), x(t)\}, \quad (6.22)$$

ou seja, em ordem mais baixa, f é proporcional ao parênteses de Poisson.

No caso de $\hat{O}(t) = \{\hat{X}(0), \hat{X}(t)\}$, tem-se

$$\begin{aligned} f(\vec{q}, \vec{p}; t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{u}\right) \langle \vec{q} - \vec{u}/2 | (\hat{X} \hat{X}(t) + \hat{X}(t) \hat{X}) | \vec{q} + \vec{u}/2 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{u}\right) 2q_x \langle \vec{q} - \vec{u}/2 | \hat{X}(t) | \vec{q} + \vec{u}/2 \rangle. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Substituindo (6.19) em (6.23) tem-se

$$f(\vec{q}, \vec{p}; t) \approx 2q_x x(\vec{q}, \vec{p}; t) = 2x(0)x(t). \quad (6.24)$$

Resta calcular a função de Wigner semiclassicamente. De (6.14) e (6.3), tem-se

$$W(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iEt/\hbar} \int d\vec{u} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{u}\right) K(\vec{q} + \vec{u}/2, \vec{q} - \vec{u}/2; t). \quad (6.25)$$

Para fazer o cálculo semiclássico, seguimos Berry [57], substituindo K por sua expressão semiclássica e, em seguida, realizando as duas integrais por fase estacionária. Como sempre, há dois tipos de contribuições, a clássica, que fornece uma função delta sobre a superfície de energia, e a de órbitas periódicas, ou seja:

$$W(\vec{q}, \vec{p}) \approx \delta(E - H(\vec{q}, \vec{p})) + W_1(\vec{q}, \vec{p}; E), \quad (6.26)$$

na qual W_1 representa a correção de órbitas periódicas na superfície de energia E .

Voltando ao cálculo do traço, podemos escrevê-lo agora em termos de uma expansão semiclássica

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{O}(t)\hat{\rho}] &\approx \\ &\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\vec{q}d\vec{p} f(\vec{q}, \vec{p}; t) \delta(E - H(\vec{q}, \vec{p})) \\ &+ \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\vec{q}d\vec{p} f(\vec{q}, \vec{p}; t) W_1(\vec{q}, \vec{p}; E). \end{aligned} \quad (6.27)$$

Usando as expressões semiclássicas de $f(\vec{q}, \vec{p}; t)$, vemos que o primeiro termo de (6.27) nos dá expressões, a não ser por uma normalização, idênticas às funções de correlação e resposta. Já no segundo termo, é apropriado usar as coordenadas utilizadas no cálculo do traço da função de Wigner semiclássica. Seguindo [57], tem-se

$$\int d\vec{q}d\vec{p} f(\vec{q}, \vec{p}; t) W_1(\vec{q}, \vec{p}; E) \approx \sum_j A_j \cos(S_j(E)/\hbar + \gamma_j) \oint d\tau f(\vec{q}_j(\tau), \vec{p}_j(\tau); t). \quad (6.28)$$

na qual, A_j é um constante que depende de propriedades da órbita j , $S_j(E)$ é a ação da órbita j com energia E , γ_j é um número que contabiliza os pontos focais da órbita e a integral fechada significa a integral em um período da órbita periódica j . Resultados análogos a este podem ser encontrados, por exemplo, em [52].

Para calcularmos $\langle \hat{O}(t) \rangle$, temos também que calcular o traço de $\hat{\rho}$, ou seja

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\vec{q}d\vec{p} W(\vec{q}, \vec{p}), \quad (6.29)$$

que é o traço da função de Wigner. Fazendo isso semiclassicamente temos [57]

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\vec{q}d\vec{p} \delta(E - H(\vec{q}, \vec{p})) + n_q(E; \hbar) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} [n_c(E) + n_q(E; \hbar)], \quad (6.30)$$

ou seja, o primeiro termo é a densidade clássica e o segundo a densidade de níveis semiclássica de Gutzwiller. Calculando a média

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \frac{\text{Tr}[\hat{O}(t)\hat{\rho}]}{\text{Tr}[\hat{\rho}]} \approx \frac{f^0(E; t) + f^1(E; t)}{n_c(E) + n_q(E; \hbar)}, \quad (6.31)$$

na qual denotamos

$$f^0(E; t) = \int d\vec{q}d\vec{p} f(\vec{q}, \vec{p}; t) \delta(E - H(\vec{q}, \vec{p})) \quad (6.32)$$

$$f^1(E; t) = \int d\vec{q}d\vec{p} f(\vec{q}, \vec{p}; t) W_1(\vec{q}, \vec{p}; E). \quad (6.33)$$

No denominador de (6.31), n_q é menor que n_c pois é de ordem \hbar menor. Logo, reescrevendo o denominador como

$$[n_c(E) + n_q(E; \hbar)]^{-1} = n_c(E)^{-1} \left[1 + \frac{n_q(E; \hbar)}{n_c(E)} \right]^{-1} \approx n_c(E)^{-1} \left[1 - \frac{n_q(E; \hbar)}{n_c(E)} \right] \quad (6.34)$$

Substituindo (6.34) em (6.31), temos

$$\langle \hat{O}(t) \rangle \approx \frac{f^0(E; t)}{n_c(E)} \left[1 - \frac{n_q(E; \hbar)}{n_c(E)} \right] + \frac{f^1(E; t)}{n_c(E)} \left[1 - \frac{n_q(E; \hbar)}{n_c(E)} \right], \quad (6.35)$$

ou, de outra forma, retendo só os termos de ordem mais baixa em \hbar ,

$$\langle \hat{O}(t) \rangle \approx \langle f(\vec{q}, \vec{p}; t) \rangle_{cl.} \left[1 - \frac{n_q(E; \hbar)}{n_c(E)} \right] + \frac{f^1(E; t)}{n_c(E)} \left[1 - \frac{n_q(E; \hbar)}{n_c(E)} \right], \quad (6.36)$$

na qual,

$$\begin{aligned} \langle f(\vec{q}, \vec{p}; t) \rangle_{cl.} &= \int d\vec{q}d\vec{p} f(\vec{q}, \vec{p}; t) \delta(E - H(\vec{q}, \vec{p})) / \int d\vec{q}d\vec{p} \delta(E - H(\vec{q}, \vec{p})) \\ f^1(E, \hbar; t) &= \sum_j A_j \cos(S_j(E)/\hbar + \gamma_j) F_j(t) \\ F_j(t) &= \oint d\tau f(\vec{q}_j(\tau), \vec{p}_j(\tau); t). \end{aligned} \quad (6.37)$$

Vemos que $F_j(t)$ é uma função periódica no tempo pois é calculada sobre a j -ésima órbita periódica.

Podemos finalmente calcular as expressões semiclássicas para $F_a''(t)$ e $F_a'(t)$. Começamos por $F_a'(t)$. De (6.1) e (6.24), temos

$$F_a'(t) = \frac{\langle \hat{O}(t) \rangle}{2\hbar} \approx \frac{\langle x(0)x(t) \rangle_{cl.}}{\hbar} \left[1 - \frac{n_q(E; \hbar)}{n_c(E)} \right] + \frac{1}{\hbar n_c(E)} \sum_j A_j \cos(S_j(E)/\hbar + \gamma_j) \oint d\tau q_j(\tau) q_j(\tau + t). \quad (6.38)$$

Para $F_a''(t)$, de (6.1) e (6.22), temos

$$F_a''(t) = \frac{\langle \hat{O}(t) \rangle}{2\hbar} \approx \frac{\langle \{x(0), x(t)\} \rangle_{cl.}}{2} \left[1 - \frac{n_q(E; \hbar)}{n_c(E)} \right] + \frac{1}{2n_c(E)} \sum_j A_j \cos(S_j(E)/\hbar + \gamma_j) \oint d\tau \{q_j(\tau), q_j(\tau + t)\}. \quad (6.39)$$

Vemos de (6.38) e (6.39), que as expressões semiclássicas de $F_a''(t)$ e $F_a'(t)$ são, essencialmente, em mais baixa ordem em \hbar , suas contrapartidas clássicas mais duas correções: uma em amplitude, dada pelo termo $n_q(E; \hbar)/n_c(E)$, e outra em órbitas periódicas. A dependência temporal da primeira correção é dada pela dinâmica clássica e, como vimos no Capítulo 4, decai exponencialmente, enquanto que a segunda correção é a soma de funções oscilantes calculadas nas órbitas periódicas. Portanto, as expressões semiclássicas de $F_a''(t)$ e $F_a'(t)$ carregam em si a dependência temporal característica de um sistema regular ou caótico.

Capítulo 7

A Dinâmica Quântica

De posse dos resultados derivados nos dois Capítulos anteriores, pretendemos mostrar, finalmente, qual é a dinâmica quântica do oscilador devido à interação com o sistema caótico. Em especial, mostraremos que dissipação e perda de coerência são efeitos resultantes dessa dinâmica. A situação em que sistemas caóticos fazem o papel de ambientes que, do ponto de vista quântico, induzem dissipação e descoerência tem sido abordada com frequência na literatura recente[59, 60, 61]. Como foi mostrado no Capítulo 5, é necessário resolver duas equações íntegro-diferenciais para se calcular o superpropagador, objeto principal da dinâmica quântica no formalismo adotado aqui. Essas equações são

$$\ddot{r}_e(t) + \omega_0^2 r_e(t) - \frac{2\gamma^2}{m} \int_0^t ds F_a''(t-s) r_e(s) = 0, \quad (7.1)$$

$$\ddot{y}_e(t) + \omega_0^2 y_e(t) + \frac{2\gamma^2}{m} \int_0^t ds F_a''(t-s) y_e(s) = 0, \quad (7.2)$$

Vamos aqui fazer o cálculo mais simples, considerando apenas o termo de ordem zero de $F_a''(t)$, ou seja, $\phi_x(t)/2$. Substituindo isso em (7.1) e (7.2), podemos reescrevê-las como

$$\ddot{r}_e(t) + \Omega_0^2 r_e(t) + \frac{\gamma^2}{m} \int_0^t ds F(t-s) \dot{r}_e(s) = -\frac{\gamma^2}{m} r_e(0) F(t), \quad (7.3)$$

$$\ddot{y}_e(t) + \chi_0^2 y_e(t) - \frac{\gamma^2}{m} \int_0^t ds F(t-s) \dot{y}_e(s) = \frac{\gamma^2}{m} y_e(0) F(t), \quad (7.4)$$

na qual, $\Omega_0^2 = \omega_0^2 - \gamma^2 F(0)/m$ e $\chi_0^2 = \omega_0^2 + \gamma^2 F(0)/m$ e $F(t)$ é

$$F(t) = \int ds \phi_x(t-s). \quad (7.5)$$

Obtemos (7.3) e (7.4) integrando o termo de convolução de (7.1) e (7.2) por partes.

Lembrando que $\phi_x(t)$ vai como $e^{-\alpha|t|} \sin(\omega t)$ (para o caso do sistema Nelson que é mais simples), as equações (7.1) e (7.2) são mais convenientes para achar $r_e(t)$ e $y_e(t)$ com a forma citada acima para $\phi_x(t)$. Se fizermos alguma aproximação para $\phi_x(t)$ como, por exemplo, desconsiderar a oscilação em ω , tal que $F(t) \sim e^{-\alpha|t|}$, então, as eqs. (7.3) e (7.4) são mais convenientes.

7.1 Equações de Movimento

Vamos, portanto, resolver (7.1) e (7.2) para o caso do sistema Nelson apenas. Tomando a transformada de Laplace de (7.1), obtemos

$$\left[(s^2 + \Omega_0^2) - \frac{\gamma^2}{m} \tilde{\phi}_x(s) \right] \tilde{r}_e(s) = sr(0) + \dot{r}(0). \quad (7.6)$$

na qual

$$\tilde{f}(s) = \mathcal{L}\{f(t)\} \quad (7.7)$$

é a transformada de Laplace de $f(t)$. Como $\phi_x(t)$ é muito bem descrita por

$$\phi_x(t) = \frac{2}{E_c(0)} \langle p_x(0)x(t) \rangle_e = A e^{-\alpha|t|} \sin(\omega t), \quad (7.8)$$

(7.6) pode ser escrita como

$$\tilde{r}_e(s) = \frac{s[(s + \alpha)^2 + \omega^2]r(0) + [(s + \alpha)^2 + \omega^2]\dot{r}(0)}{\{(s^2 + \Omega_0^2)[(s + \alpha)^2 + \omega^2] - \frac{\gamma^2}{m}A\omega\}}. \quad (7.9)$$

O teorema de Heaviside estabelece que se $P(s)$ e $Q(s)$ são polinômios tais que $P(s)$ é de ordem mais baixa que $Q(s)$, então

$$\mathcal{L}^{-1} \left[\frac{P(s)}{Q(s)} \right] = \sum_{i=1}^n \frac{P(s_i)}{Q'(s_i)} e^{s_i t}, \quad (7.10)$$

na qual s_i são as raízes de $Q(s) = 0$ e $Q'(s)$ é a derivada de $Q(s)$ com relação a s . Portanto, temos que encontrar as raízes de

$$(s^2 + \omega_0^2)[(s + \alpha)^2 + \omega^2] - \frac{\gamma^2}{m}A\omega = 0. \quad (7.11)$$

Escalando (7.11) por α , obtemos

$$\left[x^2 + \left(\frac{\omega_0}{\alpha} \right)^2 \right] \left[(x+1)^2 + \left(\frac{\omega}{\alpha} \right)^2 \right] - \frac{\gamma^2 A \omega}{m \alpha^4} = 0, \quad (7.12)$$

com $x = s/\alpha$. Da seção 4.1.1,

$$\left(\frac{\omega_0}{\alpha} \right)^2 \approx 1.6 \times 10^{-2} \quad \left(\frac{\omega}{\alpha} \right)^2 \approx 25 \quad \frac{\gamma^2 A \omega}{m \alpha^4} \approx 3 \times 10^{-2}. \quad (7.13)$$

e as raízes de (7.12) são

$$\begin{aligned} x_1 &= -1.00 - i5.00 & x_2 &= -1.00 + i5.00 \\ x_3 &= -4 \times 10^{-5} - i0.12 & x_4 &= -4 \times 10^{-5} + i0.12, \end{aligned} \quad (7.14)$$

Multiplicando essas raízes por α , obtemos

$$\begin{aligned} s_1 &\approx -\alpha - i\omega & s_2 &\approx -\alpha + i\omega \\ s_3 &\approx -\Lambda - i\omega_0 & s_4 &\approx -\Lambda + i\omega_0. \end{aligned} \quad (7.15)$$

O mesmo procedimento pode ser aplicado a (7.2). A transformada de Laplace de (7.2) é dada por

$$\tilde{y}_e(s) = \frac{s[(s+\alpha)^2 + \omega^2]y(0) + [(s+\alpha)^2 + \omega^2]\dot{y}(0)}{\{(s^2 + \Omega_0^2)[(s+\alpha)^2 + \omega^2] + \frac{\gamma^2}{m}A\omega\}} \quad (7.16)$$

e as raízes são

$$\begin{aligned} s_1 &\approx -\alpha - i\omega & s_2 &\approx -\alpha + i\omega \\ s_3 &\approx \Lambda - i\omega_0 & s_4 &\approx \Lambda + i\omega_0. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Antes de apresentarmos a expressão para Λ , gostaríamos de chamar a atenção para as duas primeiras raízes de (7.15) e (7.17). Como estamos interessados em escalas de tempo tais que $t \sim 1/\omega_0$, s_1 e s_2 são soluções transientes e somente s_3 e s_4 são importantes. Se voltarmos para as equações (7.3) e (7.4) e considerarmos que $r_e(t)$ e $y_e(t)$ variam na escala de tempo $t \sim 1/\omega_0$, podemos reescrevê-las como

$$\ddot{r}_e(t) + 2\Lambda\dot{r}_e(t) + \Omega_0^2 r_e(t) = 0, \quad (7.18)$$

$$\ddot{y}_e(t) - 2\Lambda\dot{y}_e(t) + \chi_0^2 y_e(t) = 0, \quad (7.19)$$

nas quais os termos proporcionais a $F(t)$ foram desprezados (pois eles vão a zero para $t \sim 1/\omega_0$) e os termos de convolução foram aproximados da seguinte forma

$$\int_0^t ds F(t-s) \dot{r}_e(s) \approx \dot{r}_e(t) \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds F(t-s). \quad (7.20)$$

Portanto, Λ é dado por

$$\Lambda = \frac{\gamma^2}{2m} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds F(t-s). \quad (7.21)$$

Aplicando a transformada de Laplace em (7.18) e (7.19), obtemos

$$\tilde{r}(s) = \frac{s + 2\Lambda}{s^2 + 2\Lambda s + \Omega_0^2} r(0) + \frac{1}{s^2 + 2\Lambda s + \Omega_0^2} \dot{r}(0), \quad (7.22)$$

$$\tilde{y}(s) = \frac{s - 2\Lambda}{s^2 + 2\Lambda s + \Omega_0^2} y(0) + \frac{1}{s^2 + 2\Lambda s + \Omega_0^2} \dot{y}(0), \quad (7.23)$$

cujas raízes dos denominadores são, respectivamente,

$$s_1 = -\Lambda - i\omega_0 \quad s_2 = -\Lambda + i\omega_0, \quad (7.24)$$

e

$$s_1 = \Lambda - i\omega_0 \quad s_2 = \Lambda + i\omega_0, \quad (7.25)$$

pois $\Omega_0^2, \chi_0^2 \gg \Lambda$ e $\Omega_0^2 \approx \chi_0^2 \approx \omega_0^2$. Portanto, comparando (7.24) e (7.25) com (7.15) e (7.17), concluímos que as equações (7.18) e (7.19) descrevem muito bem o comportamento de (7.1) e (7.2) para $t \sim 1/\omega_0$.

As soluções de (7.18) e (7.19) são

$$\begin{aligned} r_e(t) &= \left[e^{-\Lambda t} \cos(\Omega_0 t) + \frac{\Lambda}{\Omega_0} e^{-\Lambda t} \sin(\Omega_0 t) \right] r(0) + e^{-\Lambda t} \frac{\sin(\Omega_0 t)}{\Omega_0} \dot{r}(0), \\ y_e(t) &= \left[e^{\Lambda t} \cos(\chi_0 t) - \frac{\Lambda}{\chi_0} e^{\Lambda t} \sin(\chi_0 t) \right] y(0) + e^{\Lambda t} \frac{\sin(\chi_0 t)}{\chi_0} \dot{y}(0). \end{aligned} \quad (7.26)$$

Reescrevendo (7.26) em termos de $r(T)$, $r(0)$, $y(T)$ e $y(0)$, fica

$$\begin{aligned} r_e(t) &= e^{-\Lambda t} \left\{ \frac{\sin[\Omega_0(T-t)]}{\sin(\Omega_0 T)} r(0) + e^{\Lambda T} \frac{\sin(\Omega_0 t)}{\sin(\Omega_0 T)} r(T) \right\}, \\ y_e(t) &= e^{\Lambda t} \left\{ \frac{\sin[\chi_0(T-t)]}{\sin(\chi_0 T)} y(0) + e^{-\Lambda T} \frac{\sin(\chi_0 t)}{\sin(\chi_0 T)} y(T) \right\}, \end{aligned} \quad (7.27)$$

que será útil para o cálculo do superpropagador.

7.2 O Superpropagador

Começaremos por calcular a ação $\tilde{S}[r_e, y_e]$ dada por

$$\tilde{S}[r_e, y_e] = \int_0^T dt \left\{ m[\dot{r}_e(t)\dot{y}_e(t) - \omega_0^2 r_e(t)y_e(t) + \frac{2\gamma^2}{m} y_e(t) \int_0^t ds F_a''(t-s)r_e(s)] \right\}. \quad (7.28)$$

Fazendo a integração por partes do último termo, desprezando termos do tipo $e^{-\alpha t}$ e admitindo que $F_a''(t-s) = \phi_x(t-s)/2$, (7.5) e (7.21), $\tilde{S}[r_e, y_e]$ fica

$$\tilde{S}[r_e, y_e] = \int_0^T dt m \left\{ \dot{r}_e(t)\dot{y}_e(t) - \omega_0^2 r_e(t)y_e(t) - 2\Lambda y_e(t)\dot{r}_e(t) \right\}. \quad (7.29)$$

Portanto, (7.29) é consistente com as aproximações feitas para obter $r_e(t)$ e $y_e(t)$ em (7.27) que, por sua vez, serão usadas na própria expressão (7.29).

Calculando $\dot{r}_e(t)$ e $\dot{y}_e(t)$ a partir de (7.27) e inserindo em (7.29), tem-se

$$\begin{aligned} \tilde{S}[r_e, y_e] &= (m\omega_0^2 K(T) - m\Lambda)r(T)y(T) + (m\omega_0^2 K(T) + m\Lambda)r(0)y(0) \\ &\quad - m\omega_0^2 L(T)r(0)y(T) - m\omega_0^2 N(T)r(T)y(0), \end{aligned} \quad (7.30)$$

na qual,

$$K(T) = \frac{1}{(\Omega_0 + \chi_0)} \frac{\sin[(\Omega_0 + \chi_0)T]}{\sin(\Omega_0 T) \sin(\chi_0 T)}, \quad (7.31)$$

$$L(T) = \frac{e^{-\Lambda T}}{(\Omega_0 + \chi_0)} \frac{[\sin(\Omega_0 T) + \sin(\chi_0 T)]}{\sin(\Omega_0 T) \sin(\chi_0 T)}, \quad (7.32)$$

$$N(T) = \frac{e^{\Lambda T}}{(\Omega_0 + \chi_0)} \frac{[\sin(\Omega_0 T) + \sin(\chi_0 T)]}{\sin(\Omega_0 T) \sin(\chi_0 T)}. \quad (7.33)$$

Temos que calcular também $\phi[y_e, y_e]$ dada por

$$\phi[y_e, y_e] = \gamma^2 \int_0^T dt y_e(t) \int_0^t ds F_a'(t-s)y_e(s). \quad (7.34)$$

Assim como feito para F_a'' , vamos tomar somente o primeiro termo de (6.38), ou seja, consideraremos

$$F_a'(t) = \frac{\langle x(0)x(t) \rangle_{cl.}}{\hbar} = \frac{B}{\hbar} e^{-\alpha t} \cos(\omega t), \quad (7.35)$$

na qual, B é uma constante. Sendo assim, devido a escala de tempo que estamos interessados

$$\int_0^t ds F'_a(t-s)y_e(s) \approx y_e(t) \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds F'_a(t-s) = y_e(t) \frac{B'}{\hbar}, \quad (7.36)$$

o que implica que

$$\phi[y_e, y_e] = \frac{\gamma^2 B'}{\hbar} \int_0^T dt y_e^2(t). \quad (7.37)$$

Usando (7.27) em (7.37), tem-se

$$\phi[y_e, y_e] = \frac{\gamma^2 B'}{\hbar} [A(T)y^2(T) + B(T)y(T)y(0) + C(T)y^2(0)], \quad (7.38)$$

na qual,

$$A(T) = \frac{[-\chi_0^2 e^{-2\Lambda T} + (\Lambda^2 + \chi_0^2) - \Lambda^2 \cos(2\chi_0 T) - \Lambda\chi_0 \sin(2\chi_0 T)]}{4\Lambda(\Omega_0^2 + \Lambda^2) \sin^2(\chi_0 T)}, \quad (7.39)$$

$$B(T) = \frac{[-\chi_0^2 \sinh(\Lambda T) \cos(\chi_0 T) + \Lambda\chi_0 \cosh(\Lambda T) \sin(\chi_0 T)]}{\Lambda(\Omega_0^2 + \Lambda^2) \sin^2(\chi_0 T)}, \quad (7.40)$$

$$C(T) = \frac{[\chi_0^2 e^{2\Lambda T} - (\Lambda^2 + \chi_0^2) + \Lambda^2 \cos(2\chi_0 T) - \Lambda\chi_0 \sin(2\chi_0 T)]}{4\Lambda(\Omega_0^2 + \Lambda^2) \sin^2(\chi_0 T)}. \quad (7.41)$$

Portanto, tendo calculado $\tilde{S}[r_e, y_e]$ e $\phi[y_e, y_e]$ e definindo

$$\begin{aligned} \tilde{K}_1(T) &= m\omega_0^2 K(T) \pm m\Lambda & \tilde{L}(T) &= m\omega_0^2 L(T) & \tilde{N}(T) &= m\omega_0^2 N(T) \\ \tilde{A}(T) &= \frac{\gamma^2 B'}{\hbar} A(T) & \tilde{B}(T) &= \frac{\gamma^2 B'}{\hbar} B(T) & \tilde{C}(T) &= \frac{\gamma^2 B'}{\hbar} C(T), \end{aligned} \quad (7.42)$$

o superpropagador fica

$$\begin{aligned} J(r(T), y(T), r(0), y(0)) &= G(T, 0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{S}[r_e, y_e] \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \phi[y_e, y_e] \right\} \\ &= G(T, 0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{K}_2(T) r(T) y(T) \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \tilde{A}(T) y^2(T) \right\} \times \\ &\quad \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\tilde{K}_1(T) r(0) y(0) - \tilde{L}(T) r(0) y(T) - \tilde{N}(T) r(T) y(0) \right] \right\} \times \\ &\quad \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \tilde{B}(T) y(T) y(0) - \frac{1}{\hbar} \tilde{C}(T) y^2(0) \right\}. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Esta forma em (7.43) é muito parecida com o resultado de Caldeira-Leggett [22] inclusive na forma funcional de alguns dos coeficientes como $\tilde{K}(T)$ e $\tilde{L}(T)$. Portanto, as aproximações feitas permitirão uma primeira comparação (a mais simples que poderia ser feita) entre o nosso modelo e o de Caldeira-Leggett.

7.3 Escalas de Tempo e Descrição Física do Modelo

Nessa seção, vamos abordar duas questões que, embora não tão técnicas quanto o conteúdo apresentado até agora, são de muito importância para a justificação da formulação quântica apresentada. Essas questões são: (I) dadas as aproximações feitas (teoria de perturbação, aproximação semiclássica etc), qual é o regime de validade dos resultados obtidos e (II) qual é a situação física que esse modelo descreve. Na verdade, essas duas questões estão ligadas. Os limites de validade impostos pelas aproximações acabam colocando vínculos em algumas grandezas do modelo, o que acaba determinando a situação física que este descreve.

É importante colocar também que regimes gostaríamos de descrever. Como as aproximações feitas limitam, essencialmente, a escala de tempo na qual os resultados são válidos, gostaríamos que os efeitos que estamos interessados, como dissipação e perda de coerência, acontecessem dentro da escala de tempo válida e numa situação física plausível para os dois subsistemas. De nada adiantam os resultados obtidos se esse critério mínimo não for satisfeito.

Feitas essas considerações, vamos responder as questões enumeradas. Para a primeira questão, gostaríamos primeiro de comentar sobre a solução $e^{-\alpha t}$ de $r_e(t)$ e $y_e(t)$ que foi desprezada. Da maneira como solucionamos as equações integro-diferenciais na seção 7.1, assumimos que nos interessa tempos da ordem de alguns períodos $1/\omega_0$ e que a influência do termo $e^{-\alpha t}$ é produzir um transiente, ou seja, um efeito que decai numa escala muito menor que $1/\omega_0$. Para verificar isso, incluímos o termo $e^{-\alpha t}$ no cálculo da ação do superpropagador. Infelizmente, os cálculos ficam muito mais pesados e não temos como incluí-los aqui. Inclusive, a ajuda de softwares como o *Mathematica* foi altamente necessária e verificamos pela comparação dos gráficos das novas funções com as antigas que os termos $e^{-\alpha t}$ produzem um transiente. Agora vamos abordar a consequência da aproximação feita nas funções $F'_a(t)$ e $F''_a(t)$. Nas seções anteriores, consideramos apenas os primeiros termos da aproximação semiclássica, que são, na verdade, as contrapartidas clássicas daquelas funções, ou seja, consideramos a dinâmica do sistema caótico como clássica. Isto é válido somente numa escala de tempo chamada de tempo de Ehrenfest [58], que

para sistemas caóticos é dada por

$$t_E \sim \frac{1}{\lambda_L} \ln \left(\frac{S_c}{\hbar} \right), \quad (7.44)$$

na qual λ_L é o expoente de Lyapunov do sistema e S_c é uma ação típica do sistema, por exemplo, a ação da órbita periódica mais curta. No nosso caso, podemos colocar α no lugar de λ_L , pois, este expoente que mede a perda de correlação é uma espécie de expoente de Lyapunov médio. Queremos, portanto, que t_E seja da ordem de alguns períodos do oscilador. Isso implica em

$$t_E \sim \frac{n}{\omega_0} = \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{S_c}{\hbar} \right) \Rightarrow \frac{S_c}{\hbar} = \exp \left(n \frac{\alpha}{\omega_0} \right). \quad (7.45)$$

No caso do sistema Nelson, $\alpha/\omega_0 \sim 8$ e (7.45) nos dá um primeiro vínculo de modo a satisfazer t_E . Esse vínculo nos diz que o sistema caótico deve ser bem clássico. Portanto, na medida em que não incluímos correções quânticas em $F'_a(t)$ e $F''_a(t)$, nosso modelo descreve a situação física dada por (7.45) na escala de tempo t_E . Discutimos a teoria de perturbação no apêndice D.

7.4 Propagação de Estados

Finalmente, de posse de (7.43), podemos propagar alguns estados e analisar o efeito do sistema caótico na dinâmica dos estados do oscilador. Relembrando, a equação de propagação é

$$\rho_0(r(T), y(T)) = \int dr(0)dy(0) J(r(T), y(T), r(0), y(0)) \rho_0(r(0), y(0)). \quad (7.46)$$

Faremos, na seqüência, a evolução de dois estados que ilustram efeitos interessantes da dinâmica presente em J e que permitem uma comparação com os resultados de Caldeira-Leggett.

7.4.1 Dissipação Quântica

Seja

$$\rho_0(z(0), z'(0)) = \psi^*(z'(0))\psi(z(0)), \quad (7.47)$$

tal que

$$\psi(z(0)) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar}pz(0)} e^{-z^2(0)/4\sigma^2} \quad (7.48)$$

é um estado Gaussiano.

Podemos reescrever $\rho_0(z(0), z'(0))$ usando $r = (z + z')/2$ e $y = z - z'$. Então, ρ_0 fica

$$\rho_0(r(0), y(0)) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}py(0)} e^{-r^2(0)/2\sigma^2} e^{-y^2(0)/8\sigma^2}. \quad (7.49)$$

Colocando (7.43) e (7.49) em (7.46) e fazendo as integrais (que são gaussianas), tem-se

$$\begin{aligned} \rho_0(r(T), y(T)) = & G(T, 0) \left[\frac{2\pi\hbar^2}{2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)} \right]^{1/2} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{\tilde{N}^2(T)}{2[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)]} \left(r(T) - \frac{p}{\tilde{N}(T)} \right)^2 \right\} \\ & \times \exp \left\{ -\left[\frac{\tilde{A}(T)}{\hbar} + \frac{\sigma^2\tilde{L}^2(T)}{2\hbar^2} - \frac{(\sigma^2\tilde{K}_1(T)\tilde{L}(T) - \hbar\tilde{B}(T))^2}{2\hbar^2[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)]} \right] y^2(T) \right\} \\ & \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar}\tilde{K}_2(T)r(T)y(T) - \frac{i(\sigma^2\tilde{K}_1(T)\tilde{L}(T) - \hbar\tilde{B}(T))}{\hbar(2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T))} \tilde{N}(T) \left(r(T) - \frac{p}{\tilde{N}(T)} \right) y(T) \right\}, \end{aligned} \quad (7.50)$$

na qual,

$$\tilde{C}_1(T) = \tilde{C}(T) + \frac{\hbar}{8\sigma^2}. \quad (7.51)$$

Apesar da quantidade de termos em (7.50), estamos interessados em $\rho_0(r(T), 0)$, que é o que nos dá a densidade de probabilidade, pois, quando $y = z - z' = 0$, temos só os elementos diagonais da matriz densidade,

$$\begin{aligned} \rho_0(r(T), 0) = & G(T, 0) \left[\frac{2\pi\hbar^2}{2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)} \right]^{1/2} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{\tilde{N}^2(T)}{2[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)]} \left(r(T) - \frac{p}{\tilde{N}(T)} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (7.52)$$

Normalizando (7.52), temos

$$\begin{aligned} \rho_0(r(T), 0) = & \left[\frac{\tilde{N}^2(T)}{2\pi[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)]} \right]^{1/2} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{\tilde{N}^2(T)}{2[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)]} \left(r(T) - \frac{p}{\tilde{N}(T)} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (7.53)$$

Vemos em (7.53) que o centro do pacote segue a trajetória

$$r(T) = \frac{p}{\tilde{N}(T)} = \frac{e^{-\Lambda T}(\chi_0 + \Omega_0) \sin(\chi_0 T) \sin(\Omega_0 T)}{m\omega_0^2[\sin(\chi_0 T) + \sin(\Omega_0 T)]} p \approx \frac{p}{m\omega_0} e^{-\Lambda T} \sin(\omega_0 T), \quad (7.54)$$

considerando $\Omega_0 \approx \omega_0$ e $\chi_0 \approx \omega_0$. Este é um dos resultados importantes desse cálculo pois evidencia o efeito dissipativo que o sistema caótico tem sobre o oscilador.

Vejam a evolução da largura do pacote dada em (7.53) por

$$\sigma^2(T) = \frac{\sigma^2 \tilde{K}_1^2(T) + 2\hbar \tilde{C}_1(T)}{\tilde{N}^2(T)}. \quad (7.55)$$

Assumindo que $\Omega_0 \approx \omega_0$ e $\chi_0 \approx \omega_0$, para simplificar, temos que

$$\begin{aligned} \sigma^2(T) = & \sigma^2 \left\{ \frac{(1 + \epsilon^2)e^{-2\Lambda T}}{1 + \epsilon^2} \right. \\ & \left. + \frac{\Gamma[1 - e^{-2\Lambda T}(1 + 2\epsilon \sin(\omega_0 T) \cos(\omega_0 T) + 2\epsilon^2 \sin^2(\omega_0 T))]}{1 + \epsilon^2} \right\}, \quad (7.56) \end{aligned}$$

na qual

$$\epsilon = \frac{\Lambda}{\omega_0} \quad \text{e} \quad \Gamma = \frac{E_c(0)}{\hbar\omega_0}. \quad (7.57)$$

Vemos que, devido a expressão para Γ em (7.57), só a opção $\Gamma > 1$ é possível, pois, em regime semiclassico $E_c(0) \gg \hbar\omega_0$. A expressão para Γ vem das seguintes considerações: de $\tilde{C}_1(T)$,

$$\Gamma = \frac{\gamma^2 B'}{\hbar m \omega_0 \Lambda}. \quad (7.58)$$

Como

$$\Lambda = \frac{\gamma^2}{2m} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds F(t-s) = \frac{\gamma^2 A'}{2m} \Rightarrow \Gamma = \frac{2}{\hbar\omega_0} \frac{B'}{A'}. \quad (7.59)$$

Como a massa de SN é igual a 1, [41]

$$\langle p_x(0)x(t) \rangle_e = -\frac{\partial}{\partial t} \langle x(0)x(t) \rangle_e \Rightarrow F(t-s) = \int ds \phi_x(t-s) = A \langle x(0)x(t) \rangle_e. \quad (7.60)$$

Portanto,

$$A' = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds F(t-s) = A \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds \langle x(0)x(t) \rangle_e. \quad (7.61)$$

Como

$$B' = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds \langle x(0)x(t) \rangle_e, \quad (7.62)$$

de (7.59), (7.61) and (7.62)

$$\frac{B'}{A'} = \frac{E_c(0)}{2} \Rightarrow \Gamma = \frac{E_c(0)}{\hbar\omega_0}. \quad (7.63)$$

Vemos da figura 7.1 que, essencialmente, podemos escrever $\sigma^2(T)$ como

$$\sigma^2(T) = \sigma^2[e^{-2\Lambda T} + \Gamma(1 - e^{-2\Lambda T})], \quad (7.64)$$

que, para tempos da ordem $1/\omega_0$, se comporta como

$$\sigma^2(T) = \sigma^2[1 + (\Gamma - 1)2\Lambda T]. \quad (7.65)$$

As expressões (7.64) e (7.65) são outros resultados importantes que gostaríamos de apresentar. Em (7.65), $\sigma^2(\Gamma - 1)\Lambda$ faz o papel de uma constante difusiva como $\frac{\gamma k_B T}{m\omega^2}$ em (3.8) na seção 3.1. Considerando que $\Gamma \gg 1$ e que $\sigma^2 = \hbar/2m\omega_0$,

$$\sigma^2(\Gamma - 1)\Lambda \approx \frac{\hbar}{2m\omega_0}\Gamma\Lambda = \frac{E_c(0)}{2m\omega_0}\Lambda \quad (7.66)$$

Aqui, o pacote Gaussiano se alarga, ao passo que no modelo Caldeira-Leggett, isso só acontece com temperaturas diferentes de zero. A temperatura zero o pacote se estreita em posição. Isso mostra que a constante Γ seria o análogo da razão $k_B T/\hbar\omega$ do modelo Caldeira-Leggett. Porém, é importante lembrar que nosso resultado é perturbativo e semiclássico, o que implica que os resultados derivados dele só tem sentido para escalas de tempo da ordem de n/ω_0 . Portanto, podemos afirmar que, inicialmente, o pacote se alarga. Para tempos maiores, outros efeitos se tornam importantes e a evolução de $\sigma^2(T)$ pode mudar.

É interessante também saber como evolui a largura em momento. Temos, portanto, que calcular a matriz densidade no espaço de momentos e olhar a distribuição de probabilidade nesse espaço. No caso de uma função de onda, a relação entre a representação de posição e momento é

$$\psi(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar}. \quad (7.67)$$

Portanto, no caso de um estado puro

$$\tilde{\rho}(p, p') = \psi(p)\psi^*(p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi(x)\psi^*(x')e^{-i(px-p'x')/\hbar}, \quad (7.68)$$

ou seja,

$$\tilde{\rho}(p, p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \rho(x, x')e^{-i(px-p'x')/\hbar}, \quad (7.69)$$

que é o análogo de (7.67).

Reescrevendo em termos de $r = (x + x')/2$ e $y = x - x'$, temos

$$\tilde{\rho}(P, K) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dr \int_{-\infty}^{\infty} dy \rho(r, y)e^{-i(Kr+Py)/\hbar}, \quad (7.70)$$

na qual $P = (p + p')/2$ e $K = p - p'$. Como estamos interessados na distribuição de probabilidade em momento, somente os elementos $\tilde{\rho}(P, 0)$ importam,

$$\tilde{\rho}(P, 0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dr \int_{-\infty}^{\infty} dy \rho(r, y)e^{-iPy/\hbar}, \quad (7.71)$$

Usando (7.71) para $\rho_0(r(T), y(T))$ calculado em (7.50), tem-se

$$\tilde{\rho}(P(T), 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2(T))} \exp \left\{ -\frac{[P(T) - (\tilde{K}_2(T)/\tilde{N}(T))p]^2}{2\sigma_p^2(T)} \right\}. \quad (7.72)$$

O centro do pacote, segue a seguinte trajetória em momento

$$\frac{\tilde{K}_2(T)}{\tilde{N}(T)}p = p \left[e^{-\Lambda T} \cos(\omega_0 T) - \frac{\Lambda}{\omega_0} e^{-\Lambda T} \sin(\omega_0 T) \right]. \quad (7.73)$$

Isso mostra que a posição média e o momento médio do pacote evoluem conforme as soluções das equações de movimento de um oscilador harmônico clássico com dissipação com condições iniciais $(z(0), p_z(0)) = (0, p)$, que são condizentes com a posição média e o momento médio do pacote inicial.

A largura $\sigma_p^2(T)$ é dada por

$$\begin{aligned} \sigma_p^2(T) &= \frac{\hbar m \omega_0}{2} e^{-2\Lambda T} \{ [1 + 3\epsilon^2 \sin(\omega_0 T) + \epsilon^4 \sin^2(\omega_0 T) - 2\epsilon \sin(\omega_0) \cos(\omega_0 T)] \\ &+ \Gamma[e^{2\Lambda T} - 1 - 2\epsilon^2 \sin^2(\omega_0 T) + 2\epsilon \sin(\omega_0 T) \cos(\omega_0 T)] \}, \end{aligned} \quad (7.74)$$

que, assim como $\sigma^2(T)$ podemos escrever como

$$\sigma_p^2(T) = \sigma_p^2[e^{-2\Lambda T} + \Gamma(1 - e^{-2\Lambda T})], \quad (7.75)$$

que mostra que a incerteza em momento também aumenta com o tempo.

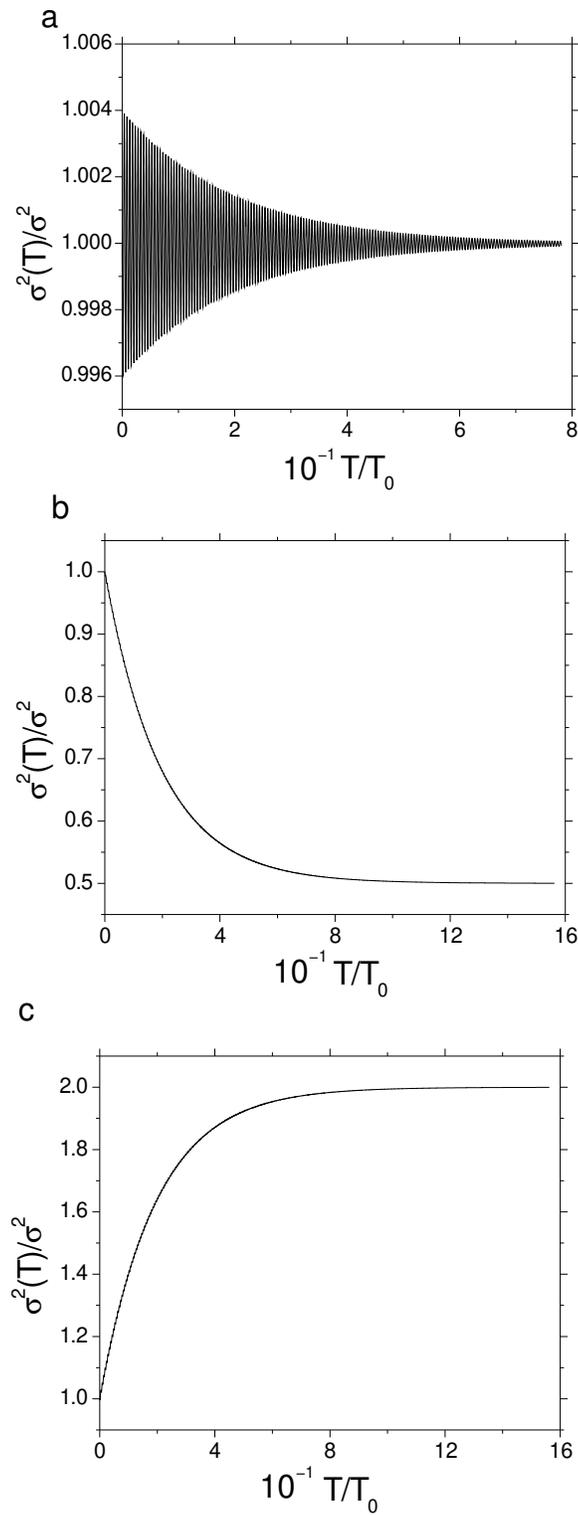


Figura 7.1: $\sigma^2(T)/\sigma^2$ dada por (7.56). Em (a) temos $\Gamma = 1.0$, em (b) $\Gamma = 0.5$ e em (c) $\Gamma = 2.0$.

7.4.2 Perda de Coerência

Tomemos agora um estado inicial como (7.47) mas com

$$\begin{aligned}\psi(z(0)) &= N^{1/2}[\psi_1(z(0)) + \psi_2(z(0))] \\ &= N^{1/2} \left\{ \exp \left[-\frac{z^2(0)}{4\sigma^2} \right] + \exp \left[-\frac{(z(0) - q_0)^2}{4\sigma^2} \right] \right\}.\end{aligned}\quad (7.76)$$

Portanto,

$$\begin{aligned}\rho_0(z(0), z'(0)) &= N [\rho_1(z(0), z'(0)) + \rho_2(z(0), z'(0)) \\ &\quad + \rho_{12}(z(0), z'(0)) + \rho_{21}(z(0), z'(0))],\end{aligned}\quad (7.77)$$

na qual, transformando para $r(0)$ e $y(0)$, tem-se

$$\rho_1(z(0), z'(0)) = \psi_1(z(0))\psi_1^*(z'(0)) = Ne^{-r^2(0)/2\sigma^2} e^{-y^2(0)/8\sigma^2}, \quad (7.78)$$

$$\begin{aligned}\rho_2(z(0), z'(0)) &= \psi_2(z(0))\psi_2^*(z'(0)) = Ne^{-r^2(0)/2\sigma^2} e^{-y^2(0)/8\sigma^2} e^{q_0 r(0)/\sigma^2} \\ &\quad \times e^{-q_0^2/2\sigma^2},\end{aligned}\quad (7.79)$$

$$\begin{aligned}\rho_{12}(z(0), z'(0)) &= \psi_1(z(0))\psi_2^*(z'(0)) = Ne^{-r^2(0)/2\sigma^2} e^{-y^2(0)/8\sigma^2} e^{q_0 r(0)/2\sigma^2} \\ &\quad \times e^{-q_0 y(0)/4\sigma^2} e^{-q_0^2/4\sigma^2},\end{aligned}\quad (7.80)$$

$$\begin{aligned}\rho_{21}(z(0), z'(0)) &= \psi_2(z(0))\psi_1^*(z'(0)) = Ne^{-r^2(0)/2\sigma^2} e^{-y^2(0)/8\sigma^2} e^{q_0 r(0)/2\sigma^2} \\ &\quad \times e^{q_0 y(0)/4\sigma^2} e^{-q_0^2/4\sigma^2},\end{aligned}\quad (7.81)$$

Vemos de (7.80) e (7.81) que a única diferença entre ρ_{12} e ρ_{21} é o sinal do expoente $y(0)q_0$. Portanto, vamos escrever as duas expressões numa só introduzindo o símbolo $\delta = \pm$ e definindo

$$\rho_{12}^\delta(r(0), y(0)) = N \exp \left\{ -\frac{r^2(0)}{2\sigma^2} - \frac{y^2(0)}{8\sigma^2} + \frac{r(0)q_0}{2\sigma^2} + \frac{\delta y(0)q_0}{4\sigma^2} - \frac{q_0^2}{4\sigma^2} \right\}. \quad (7.82)$$

Assim como foi feito em (7.50), vamos evoluir ρ_1 , ρ_2 e ρ_{12}^δ . Da mesma forma que em (7.52), só nos interessa os elementos de matriz com $y(T) = 0$. Temos então as

seguintes expressões

$$\rho_1(r(T), 0) = N G(T, 0) \frac{2\pi\sigma\hbar}{[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)]^{1/2}} \exp\left\{-\frac{\tilde{N}^2(T)}{\tilde{f}(T)} r^2(T)\right\} \quad (7.83)$$

$$\begin{aligned} \rho_2(r(T), 0) &= N G(T, 0) \frac{2\pi\sigma\hbar}{[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)]^{1/2}} \\ &\times \exp\left\{-\frac{\tilde{N}^2(T)}{\tilde{f}(T)} \left(r(T) - \frac{\tilde{K}_1(T)}{\tilde{N}(T)} q_0\right)^2\right\}, \end{aligned} \quad (7.84)$$

$$\begin{aligned} \rho_{12}^\delta(r(T), 0) &= N G(T, 0) \frac{2\pi\sigma\hbar}{[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)]^{1/2}} \exp\left[-\frac{\tilde{K}_0^2(T)q_0^2}{4\tilde{f}(T)} - \frac{q_0^2}{8\sigma^2}\right] \\ &\times \exp\left[-\frac{\tilde{N}^2(T)r^2(T)}{2\tilde{f}(T)}\right] \exp\left[-\frac{\tilde{N}^2(T)}{2\tilde{f}(T)} \left(r(T) - \frac{\tilde{K}_1(T)}{\tilde{N}(T)} q_0\right)^2\right] \\ &\times \exp\left\{\frac{i\hbar\delta}{4\sigma^2} \frac{\tilde{N}^2(T)}{\tilde{f}(T)\tilde{K}_1(T)} \left[\left(r(T) - \frac{\tilde{K}_1(T)}{\tilde{N}(T)} q_0\right)^2 - r^2(T)\right]\right\} \end{aligned} \quad (7.85)$$

onde

$$\tilde{f}(T) = 2[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)], \quad (7.86)$$

$$\tilde{K}_0^2(T) = \tilde{K}_1^2(T) + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}. \quad (7.87)$$

Impondo que $\rho_0(r(T), 0)$ seja normalizado, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dr(T) \rho_0(r(T), 0) &= N G(T, 0) \frac{2\pi\sigma\hbar}{[2\hbar\tilde{C}_1(T) + \sigma^2\tilde{K}_1^2(T)]} \left(\frac{\pi\tilde{f}(T)}{\tilde{N}^2(T)}\right)^{1/2} \\ &\times 2 \left[1 + e^{(-q_0^2/8\sigma^2)(1+g(T))}\right] = 1. \end{aligned} \quad (7.88)$$

Logo,

$$\rho_1(r(T), 0) = \frac{1}{2[1+h(T)]} \left(\frac{\tilde{N}^2(T)}{\pi \tilde{f}(T)} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{\tilde{N}^2(T)}{\tilde{f}(T)} r^2(T) \right\}, \quad (7.89)$$

$$\rho_2(r(T), 0) = \frac{1}{2[1+h(T)]} \left(\frac{\tilde{N}^2(T)}{\pi \tilde{f}(T)} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{\tilde{N}^2(T)}{\tilde{f}(T)} [r(T) - Q(T)]^2 \right\}, \quad (7.90)$$

$$\begin{aligned} & \rho^{12}(r(T), 0) + \\ \rho^{21}(r(T), 0) &= \frac{1}{2[1+h(T)]} \left(\frac{\tilde{N}^2(T)}{\pi \tilde{f}(T)} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{q_0^2}{8\sigma^2} g(T) \right] \exp \left\{ -\frac{\tilde{N}^2(T)}{\tilde{f}(T)} r^2(T) \right\} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{\tilde{N}^2(T)}{\tilde{f}(T)} [r(T) - Q(T)]^2 \right\} \\ & \times 2 \cos \left\{ \frac{\hbar \tilde{N}^2(T)}{4\sigma^2 \tilde{f}(T) \tilde{K}_1(T)} [(r(T) - Q(T))^2 - r^2(T)] \right\}, \quad (7.91) \end{aligned}$$

nas quais

$$h(T) = \exp \left\{ -\frac{q_0^2}{8\sigma^2} [1 + g(T)] \right\}, \quad (7.92)$$

$$Q(T) = \frac{\tilde{K}_1(T)}{\tilde{N}(T)} q_0, \quad (7.93)$$

$$g(T) = \frac{2\hbar \tilde{C}(T)}{2\hbar \tilde{C}_1(T) + \sigma^2 \tilde{K}_1^2(T)}. \quad (7.94)$$

Comparando o termo de interferência (7.91) com (7.90) e (7.89), vemos que ele tem a seguinte forma

$$\begin{aligned} \rho_{12}(r(T), 0) + \rho_{21}(r(T), 0) &= 2 \cos [a(T)((r(T) - Q(T))^2 - r^2(T))] \\ & \times \rho_1^{1/2}(r(T), 0) \rho_2^{1/2}(r(T), 0) \exp \left[-\frac{q_0^2}{8\sigma^2} g(T) \right]. \quad (7.95) \end{aligned}$$

Logo, a interferência é atenuada por $\exp [-(q_0^2/8\sigma^2)g(T)]$.

A expressão (7.95) nos mostra que a interação do oscilador com o sistema caótico provoca perda de coerência nos estados inicialmente superpostos do oscilador. A expressão (7.95) tem a mesma forma que a do modelo Caldeira-Leggett [62]. Porém, aqui, a função $g(T)$ não tem dependência com a temperatura. Podemos reescrever a função $g(T)$ da seguinte forma

$$g(T) = \frac{\Gamma b(T)}{(1 + \epsilon^2) + \Gamma b(T)}, \quad (7.96)$$

com

$$b(T) = e^{2\Lambda T} - 1 - 2\epsilon \sin(\omega_0 T) \cos(\omega_0 T) - 2\epsilon^2 \sin^2(\omega_0 T) \quad (7.97)$$

e $\epsilon = \Lambda/\omega_0$, e vemos que

$$g(T=0) = 0 \quad \text{e} \quad g(T \rightarrow \infty) \rightarrow 1 \quad (7.98)$$

que são os mesmos limites assintóticos do modelo Caldeira-Leggett [62].

Para $\Gamma > 10$, percebe-se que (ver figura 7.2)

$$g(T) = \frac{2\Gamma\Lambda T}{1 + 2\Gamma\Lambda T} \quad (7.99)$$

descreve muito bem o comportamento de (7.96). Essa expressão mais simplificada nos ajuda a fazer uma estimativa mais simples da taxa de perda de coerência. Por exemplo, usando (7.99) podemos estimar o tempo T' tal que

$$\exp\left[-\frac{q_0^2}{8\sigma^2}g(T')\right] \sim 10^{-3}. \quad (7.100)$$

Definindo $n \equiv q_0^2/8\sigma^2$ (n é o número médio de quanta de energia $\hbar\omega_0$ do oscilador no instante inicial) e como estamos interessados em $q_0 \gg \sigma$, ou $n \gg 1$, temos que (7.100) implica

$$\left[\frac{n - \ln(10)}{3\ln(10)}\right] \Gamma\Lambda T' = \tilde{n}\Gamma\Lambda T' = 1 \Rightarrow T' = \frac{1}{\tilde{n}\Gamma\Lambda}. \quad (7.101)$$

Vemos que o tempo de decaimento T' é muito menor que $1/\Lambda$, que é a escala de tempo de dissipação, pois, tanto \tilde{n} quanto Γ são muito maiores que 1 no regime semiclassico.

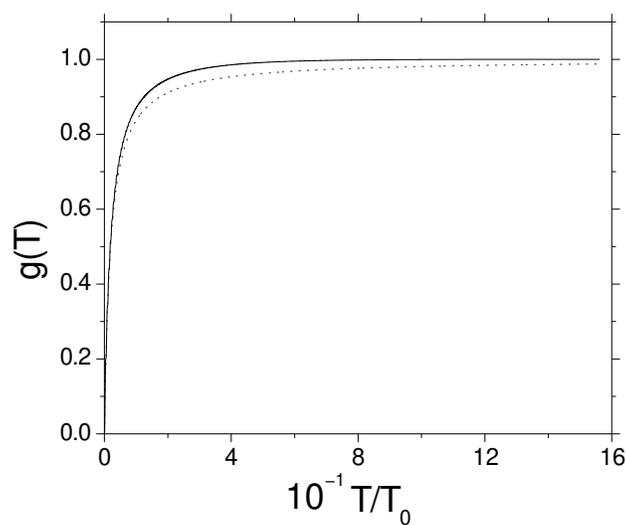


Figura 7.2: A linha cheia mostra $g(T)$ dada por (7.96) e (7.97) para $\Gamma = 10.0$. A linha pontilhada mostra $g(T)$ dada por (7.99) com $\Gamma = 10.0$. Vemos que (7.99) reproduz muito bem o comportamento de (7.96) e possui os mesmos limites assintóticos.

Conclusões e Perspectivas

Do ponto de vista clássico, concluímos que um sistema de poucos graus de liberdade, desde que tenha uma dinâmica caótica, é capaz de produzir efeitos irreversíveis como dissipação e termalização. Os resultados obtidos para a energia média do oscilador é que nos levam a essa conclusão. Isto já havia sido notado em outros trabalhos [8, 9, 10], porém, através de uma abordagem adiabática. Esse papel da dinâmica pôde ser evidenciado através do cálculo da resposta linear. Nesse cálculo, as funções de correlação do sistema que faz o papel de reservatório são o ingrediente mais importante. Essas funções têm um comportamento qualitativamente distinto para dinâmicas regulares e caóticas, sendo quasi-periódicas para a primeira e decaindo exponencialmente para a segunda devido à alta instabilidade das trajetórias. Esse decaimento é responsável, como mostrado em resposta linear, pela dissipação produzida. A termalização que ocorre, apesar de qualitativamente análoga a do movimento Browniano, apresenta diferenças importantes com relação à ocorrida neste. Uma delas é o fato de o reservatório, por possuir poucos graus de liberdade, ser influenciado pelo sistema de interesse. Isso é evidenciado nos valores diferentes em que a energia termaliza mostrados nas figuras 4.5 e 4.6. Outra diferença é o comportamento das distribuições de energia no equilíbrio. Apesar de terem sido derivadas usando as mesmas hipóteses aplicadas ao movimento Browniano usual, o comportamento daquelas distribuições é muito diferente da distribuição de Boltzmann, dependendo diretamente das densidades de estados clássicas. Aliás, essas hipóteses se confirmaram válidas para esse caso *a posteriori*. Em princípio, o sistema total, composto por oscilador e sistema caótico, tem uma dinâmica mista e, portanto, não-ergódica, o que não permitiria a aplicação da hipótese de probabilidades iguais para os estados. Esta questão, juntamente com a definição de temperatura feita no Capítulo 4 para descrever o equilíbrio, apontam que estes modelos de poucos graus de liberdade têm grande potencial no estudo de questões importantes de

Mecânica Estatística de equilíbrio e não-equilíbrio. Uma questão ainda aberta que gostaríamos de investigar é se a dinâmica do sistema caótico sob o efeito da interação com o oscilador apresenta um atrator. Essa seria uma outra maneira de mostrar o efeito dissipativo do sistema caótico do ponto de vista dinâmico já que o atrator representa uma redução do espaço de fase acessível devido à dinâmica.

Do ponto de vista quântico, a formulação em termos de Funcionais de Influência foi muito adequada pois pudemos explicitar o efeito da dinâmica na descrição da dissipação e da perda de coerência. Concluimos que, na medida em que o sistema caótico é suficientemente clássico, a dinâmica caótica, através dos análogos quânticos das funções resposta e de correlação, é responsável pela descrição de efeitos dissipativos e de descoerência. A análise clássica do modelo se mostrou essencial para a formulação quântica. Em particular, as escalas de tempo estabelecidas classicamente são muito importantes na derivação da dinâmica do oscilador sob a influência do sistema caótico. Entretanto, não foi possível analisar a termalização no contexto quântico pois nossos cálculos são perturbativos. Por outro lado, os resultados obtidos mostram grande analogia com a descrição em termos de reservatórios de muitos graus de liberdade. Os resultados das seções 7.4.1 e 7.4.2 são qualitativamente similares aos do modelo Caldeira-Leggett [21, 22, 62] no regime de alta temperatura e sub-amortecimento. O regime de amortecimento forte não é possível aqui por ser uma situação não-perturbativa. O análogo da temperatura alta é a constante $\Gamma = E_c(0)/\hbar\omega_0$ que é muito maior que um no regime semiclássico. Deixar o sistema caótico mais ou menos quântico é análogo a aumentar ou diminuir a temperatura no caso dos reservatórios térmicos. O regime semiclássico foi determinado pelo nível de aproximação nas funções resposta e correlação quânticas. As expressões semiclássicas para essas funções não foram totalmente exploradas. Porém, a primeira correção, por alterar a amplitude apenas, pode ser facilmente incluída. No entanto, da eq.(7.59), vemos que ela não tem influência no valor de Γ . Por sua vez, a taxa de dissipação Λ e, por conseqüência, a constante de difusão e a taxa de perda de coerência dependem dessa correção. As correções em órbitas periódicas parecem fornecer uma contribuição que evolui de forma periódica no tempo e que, portanto, não levaria a dissipação. Isso nos levaria a pensar que, do ponto de vista puramente quântico, não haveria dissipação usando o formalismo adotado. Isso já foi notado por Berry[9] considerando o sistema caótico como puramente quântico mas interagindo em regime adiabático com um sistema de interesse. Berry mostrou que, até

segunda ordem na aproximação adiabática, o sistema caótico não causa dissipação devido a correlações quasi-periódicas decorrentes do espectro discreto. Diante disso, poderíamos pensar que uma formulação apropriada da instabilidade caótica no contexto quântico é altamente necessária para que a abordagem dinâmica dos processos irreversíveis possa ser sustentável. Alguns esforços têm sido feitos no estudo dessa instabilidade no contexto quântico seguindo a linha do que foi proposto por Peres [14]. Acreditamos que o tipo de abordagem apresentada tenha grande aplicação em sistemas mesoscópicos como mostrado em [17, 18, 19]. Sistemas como o do apêndice F, permitem um estudo da relaxação e descoerência de spin devido ao seu acoplamento com graus de liberdade orbitais cujo movimento é caótico. Nesses casos, o spin faz o papel de sistema de interesse, os graus de liberdade orbitais funcionariam como reservatório caótico pequeno e a interação spin-órbita como acoplamento.

Apêndice A

Teorema Flutuação-Dissipação

Seja o operador de Heisenberg

$$\hat{A}(t) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \quad (\text{A.1})$$

e o operador densidade do ensemble canônico

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z}, \quad (\text{A.2})$$

na qual $\beta = 1/k_B T$ e Z é a função de partição.

Definimos então a seguinte função

$$S(t - t') \equiv \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t)\hat{A}(t')\} \quad (\text{A.3})$$

e sua transformada de Fourier

$$S(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} S(\omega) e^{-i\omega(t-t')}. \quad (\text{A.4})$$

A seguinte relação nos será útil

$$e^{-\beta\hat{H}} \hat{A}(t) = e^{-\beta\hat{H}} e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \quad (\text{A.5})$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}(t+i\beta\hbar)\hat{H}} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar}(t+i\beta\hbar)\hat{H}} e^{-\beta\hat{H}} \quad (\text{A.6})$$

$$= \hat{A}(t + i\beta\hbar) e^{-\beta\hat{H}}. \quad (\text{A.7})$$

De (A.7), tem-se

$$\text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t)\hat{A}(t')\} = \text{Tr}\{\hat{A}(t + i\beta\hbar)\hat{\rho}\hat{A}(t')\} \quad (\text{A.8})$$

$$= \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t')\hat{A}(t + i\beta\hbar)\}, \quad (\text{A.9})$$

e de (A.3) e (A.4), definindo $\tau = t - t'$, tem-se

$$S(-\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau S(\tau) e^{i(-\omega)\tau} \quad (\text{A.10})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau S(-\tau) e^{i\omega\tau} \quad (\text{A.11})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t')\hat{A}(t)\} e^{i\omega\tau}. \quad (\text{A.12})$$

Definindo $t'' = t' + i\beta\hbar$ e $\tau' = \tau - i\beta\hbar$, tem-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t)\hat{A}(t' + i\beta\hbar)\} e^{i\omega\tau} = \quad (\text{A.13})$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t)\hat{A}(t'')\} e^{i\omega\tau'} e^{i\omega(i\beta\hbar)} \quad (\text{A.14})$$

$$= e^{-\beta\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t)\hat{A}(t'')\} e^{i\omega\tau'} = e^{-\beta\hbar\omega} S(\omega). \quad (\text{A.15})$$

De (A.9)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t)\hat{A}(t' + i\beta\hbar)\} e^{i\omega\tau} = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t')\hat{A}(t)\} e^{i\omega\tau} = S(-\omega). \quad (\text{A.16})$$

Logo, de (A.15) e (A.16)

$$S(-\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} S(\omega). \quad (\text{A.17})$$

A função de correlação quântica é definida por

$$C(t - t') = \frac{1}{2} \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t)\hat{A}(t') + \hat{\rho}\hat{A}(t')\hat{A}(t)\} = \frac{1}{2}[S(t - t') + S(t' - t)]. \quad (\text{A.18})$$

Logo,

$$C(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau C(\tau) e^{i\omega\tau} = \frac{1}{2}[S(\omega) + S(-\omega)] \quad (\text{A.19})$$

e, de (A.17), tem-se

$$C(\omega) = S(\omega) \frac{(1 + e^{-\beta\hbar\omega})}{2}. \quad (\text{A.20})$$

A função resposta quântica é definida por

$$\Phi(t - t') = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}(t')\hat{A}(t) - \hat{\rho}\hat{A}(t)\hat{A}(t')\} = \frac{1}{i\hbar}[-S(t - t') + S(t' - t)]. \quad (\text{A.21})$$

Logo,

$$\Phi(\omega) = -\frac{1}{i\hbar}[S(\omega) - S(-\omega)] = -\frac{1}{i\hbar}S(\omega)(1 - e^{-\beta\hbar\omega}). \quad (\text{A.22})$$

Portanto, como

$$2\text{Re}[\Phi(\omega)] = \Phi(\omega) + \Phi^*(\omega) = 0 \quad (\text{A.23})$$

$$2i\text{Im}[\Phi(\omega)] = \Phi(\omega) - \Phi^*(\omega) = 2\Phi(\omega) = 2i\Phi''(\omega), \quad (\text{A.24})$$

tem-se de (A.20) e (A.22)

$$C(\omega) = \frac{\hbar}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\Phi''(\omega), \quad (\text{A.25})$$

que relaciona a função de correlação com a função resposta e é uma das formas do Teorema Flutuação-Dissipação. No limite clássico em que $\hbar \rightarrow 0$, tem-se

$$c(\omega) = \frac{1}{\beta\omega}\phi''(\omega). \quad (\text{A.26})$$

Apêndice B

Cálculo de $J_k(\omega)$

Nesse apêndice, a expressão (3.43) será derivada. A função resposta retardada de um oscilador é dada por

$$\chi_k^r(t) = \Theta(t) \langle \{q_k^d(0), q_k^d(t)\} \rangle = \Theta(t) \frac{\sin(\omega_k t)}{m_k \omega_k}. \quad (\text{B.1})$$

Portanto, sua transformada de Fourier fica

$$\tilde{\chi}_k(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \chi_k^r(t) = \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \frac{\sin(\omega_k t)}{m_k \omega_k}, \quad (\text{B.2})$$

cuja parte imaginária é dada por

$$\text{Im}[\tilde{\chi}_k(\omega)] = \text{Im} \left[\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega+i\epsilon)t} \frac{\sin(\omega_k t)}{m_k \omega_k} \right]. \quad (\text{B.3})$$

Logo, como $\omega_k > 0$,

$$\begin{aligned} J_k(\omega) &= \text{Im}[\mathcal{F}\{\Theta(t-s)\chi_k(t-s)\}] = \text{Im}[\tilde{\chi}_k(\omega)] \\ &= \frac{\pi}{2} \frac{1}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Apêndice C

Mudança de Coordenadas para SN e SQ

Nesse apêndice, mostramos as mudanças de coordenadas para SN e SQ que possibilitaram o cálculo das funções resposta e da densidade de estados. Para SN, a transformação é a seguinte

$$\begin{aligned}x &= \left(\frac{1}{0.05}\right)^{1/2} \sqrt{H_c} \cos \xi \cos \theta & y &= \frac{x^2}{2} + \sqrt{H_c} \sin \xi \cos \varphi \\p_x &= \sqrt{2H_c} \cos \xi \sin \theta & p_y &= \sqrt{2H_c} \sin \xi \sin \varphi\end{aligned}$$

na qual $0 \leq \xi < \pi/2$, $0 \leq \varphi < 2\pi$ e $0 \leq \theta < 2\pi$. Logo, o Jacobiano da transformação fica $J = H_c f_N(\Theta)$.

Para SQ, a transformação segue abaixo

$$\begin{aligned}x^2 &= \sqrt{\frac{2H_c}{\cos 2\theta}} \left[\frac{\cos \theta}{\sqrt{1+a}} + \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-a}} \right] \sin \xi \\y^2 &= \sqrt{\frac{2H_c}{\cos 2\theta}} \left[\frac{\cos \theta}{\sqrt{1+a}} - \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-a}} \right] \sin \xi \\p_x &= \sqrt{2H_c} \cos \varphi \cos \xi \\p_y &= \sqrt{2H_c} \sin \varphi \cos \xi\end{aligned} \tag{C.1}$$

na qual $0 < \theta < \theta_0 < \pi/4$ e $\tan \theta_0 = \sqrt{(1-a)/(1+a)}$. O Jacobiano é dado por $J = H_c^{1/2} f_Q(\Theta)$.

Apêndice D

Teoria de Perturbação

A teoria de perturbação em segunda ordem feita na seção 5.2 também limita o tempo de validade dos resultados. Lembremos que na abordagem de Feynman-Vernon de funcionais de influência, o potencial de interação entre os subsistemas é considerado como uma perturbação no sistema caótico. Em termos do propagador, podemos formular a questão da seguinte maneira: seja o propagador do sistema caótico perturbado dado por

$$K_c(X_f, X_i; t - t_0) = \int_{X_i}^{X_f} DX(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' (L_c[X(t')] - \gamma U[X(t'), t']) \right\}, \quad (\text{D.1})$$

na qual L_c é a Lagrangiana, por exemplo, do sistema Nelson e

$$\gamma U[X(t'), t'] = \gamma x(t') z(t'), \quad (\text{D.2})$$

que temos usado como interação. É claro que, devido a interação, $z(t')$ passa a depender das coordenadas do sistema caótico. Porém, nessa análise, basta pensar $z(t')$ como uma função do tempo, fruto da dinâmica do oscilador harmônico isolado. Seja \bar{S}_c uma ação típica do sistema caótico. Reescrevemos (D.1) como

$$\begin{aligned} K_c(X_f, X_i; t - t_0) &= \int_{X_i}^{X_f} DX(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \bar{S}_c \left(\int_{t_0}^t dt' \frac{L_c[X(t')]}{\bar{S}_c} - \gamma \int_{t_0}^t dt' \frac{U[X(t'), t']}{\bar{S}_c} \right) \right\} \\ &= \int_{X_i}^{X_f} DX(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\tilde{S}_c[X(t')] + \tilde{S}_u[X(t')] \right) \right\}, \quad (\text{D.3}) \end{aligned}$$

na qual definimos $\tilde{\hbar} = \hbar/\bar{S}_c$ e as ações \tilde{S}_c e \tilde{S}_u que incorporam \bar{S}_c . Dessa maneira, com grandezas adimensionais, podemos definir a seguinte expansão: \tilde{S}_c é de ordem 1, seja $\tilde{S}_u \ll 1$, então

$$\exp \left\{ \frac{i}{\tilde{\hbar}} (\tilde{S}_c + \tilde{S}_u) \right\} = \exp \left(\frac{i}{\tilde{\hbar}} \tilde{S}_c \right) \left[1 + \frac{i}{\tilde{\hbar}} \tilde{S}_u + \left(\frac{i}{\tilde{\hbar}} \tilde{S}_u \right)^2 + \left(\frac{i}{\tilde{\hbar}} \tilde{S}_u \right)^3 + \dots \right] \quad (\text{D.4})$$

Truncando a série acima estamos fazendo teoria de perturbação e, conseqüentemente, limitando de alguma forma os resultados. Podemos estimar essa limitação comparando os termos da série. Como se trata de uma série complexa, temos que comparar termos reais e complexos entre si. Por exemplo, se truncarmos em segunda ordem em \tilde{S}_u e quisermos garantir um erro ϵ , impomos que

$$\frac{|\tilde{S}_u^4/\tilde{\hbar}^4|}{|\tilde{S}_u^2/\tilde{\hbar}^2|} \leq \epsilon \quad \text{e} \quad \frac{|\tilde{S}_u^3/\tilde{\hbar}^3|}{|\tilde{S}_u/\tilde{\hbar}|} \leq \epsilon. \quad (\text{D.5})$$

Para analisarmos as condições acima, definimos

$$\frac{\tilde{S}_u}{\tilde{\hbar}} = \frac{\Delta t \gamma}{\Delta t \tilde{\hbar}} \int_{t_0}^t dt' U[X(t'), t'] = \frac{\Delta t}{\tilde{\hbar}} \langle U[X(t'), t'] \rangle \quad (\text{D.6})$$

$$\frac{\tilde{S}_u^2}{\tilde{\hbar}^2} = \left(\frac{\Delta t}{\Delta t} \right)^2 \frac{\gamma^2}{\tilde{\hbar}^2} \int_{t_0}^t dt' U_2[X(t'), t'] = \frac{(\Delta t)^2}{\tilde{\hbar}^2} \langle U_2[X(t'), t'] \rangle \quad (\text{D.7})$$

$$\frac{\tilde{S}_u^3}{\tilde{\hbar}^3} = \left(\frac{\Delta t}{\Delta t} \right)^3 \frac{\gamma^3}{\tilde{\hbar}^3} \int_{t_0}^t dt' U_3[X(t'), t'] = \frac{(\Delta t)^3}{\tilde{\hbar}^3} \langle U_3[X(t'), t'] \rangle \quad (\text{D.8})$$

$$\frac{\tilde{S}_u^4}{\tilde{\hbar}^4} = \left(\frac{\Delta t}{\Delta t} \right)^4 \frac{\gamma^4}{\tilde{\hbar}^4} \int_{t_0}^t dt' U_4[X(t'), t'] = \frac{(\Delta t)^4}{\tilde{\hbar}^4} \langle U_4[X(t'), t'] \rangle \quad (\text{D.9})$$

onde $\Delta t = t - t_0$ e

$$\begin{aligned} U_k[X(t'), t'] &= U[X(t'), t'] \int_{t_0}^{t'} dt_1 U[X(t_1), t_1] \int_{t_0}^{t_1} dt_2 U[X(t_2), t_2] \times \\ &\dots \int_{t_0}^{t_{k-2}} dt_{k-1} U[X(t_{k-1}), t_{k-1}] \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

e

$$\langle U_k[X(t'), t'] \rangle = \frac{1}{(\Delta t)^k} \int_{t_0}^t dt' U_k[X(t'), t'] \quad (\text{D.11})$$

Portanto, temos

$$\frac{|\tilde{S}_u^4/\tilde{\hbar}^4|}{|\tilde{S}_u^2/\tilde{\hbar}^2|} = \frac{(\Delta t)^2}{\tilde{\hbar}^2} \frac{|\langle U_4 \rangle|}{|\langle U_2 \rangle|} \leq \epsilon \Rightarrow (\Delta t)^2 \leq \epsilon \tilde{\hbar}^2 \frac{|\langle U_2 \rangle|}{|\langle U_4 \rangle|}, \quad (\text{D.12})$$

$$\frac{|\tilde{S}_u^3/\tilde{\hbar}^3|}{|\tilde{S}_u/\tilde{\hbar}|} = \frac{(\Delta t)^2}{\tilde{\hbar}^2} \frac{|\langle U_3 \rangle|}{|\langle U \rangle|} \leq \epsilon \Rightarrow (\Delta t)^2 \leq \epsilon \tilde{\hbar}^2 \frac{|\langle U \rangle|}{|\langle U_3 \rangle|}. \quad (\text{D.13})$$

Logo, dado γ , ϵ e uma trajetória $X(t')$, podemos calcular (D.12) e (D.13) para um intervalo Δt . Como queremos que $\Delta t \sim n/\omega_0$, n inteiro

$$\left(\frac{n}{\omega_0}\right)^2 \leq \epsilon \tilde{\hbar}^2 \frac{|\langle U_2 \rangle|}{|\langle U_4 \rangle|} \quad \text{e} \quad \left(\frac{n}{\omega_0}\right)^2 \leq \epsilon \tilde{\hbar}^2 \frac{|\langle U \rangle|}{|\langle U_3 \rangle|}. \quad (\text{D.14})$$

Estas desigualdades devem ser satisfeitas para a escolha de parâmetros do nosso modelo de maneira a podermos validar os cálculos feitos.

Apêndice E

Elemento de Matriz Semiclássico

Queremos calcular semiclassicamente a quantidade

$$\langle x | \hat{X}(t) | x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} du u K^*(u, x; t) K(u, x'; t) \quad (\text{E.1})$$

na qual, $K(u, x; t) = \langle u | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | x \rangle$.

Tomemos, portanto, as expressões semiclassicas dos propagadores [71]

$$\tilde{K}(u, x'; t) = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{1/2}} \sum_k |R_k''(u, x'; t)|^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} R_k(u, x'; t) - \frac{i\pi}{2} \alpha_k \right], \quad (\text{E.2})$$

$$\tilde{K}^*(u, x; t) = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{1/2}} \sum_q |R_q''(u, x; t)|^{1/2} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} R_q(u, x; t) + \frac{i\pi}{2} \alpha_q \right], \quad (\text{E.3})$$

nas quais,

$$R_j(x'', x'; t) = \int_0^t ds [p(s)\dot{q}(s) - H(p(s), q(s))] \quad (\text{E.4})$$

é a função principal de Hamilton com as condições $q(0) = x'$ e $q(t) = x''$ e

$$R_j''(x'', x'; t) = -\frac{\partial^2 R_j(x'', x'; t)}{\partial x' \partial x''}. \quad (\text{E.5})$$

Substituindo (E.2) e (E.3) em (E.1) e fazendo a integral em fase estacionária, obtemos

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} du u \tilde{K}^*(u, x; t) \tilde{K}(u, x'; t) \approx \\ & \bar{u} \left[\frac{1}{2\pi i \hbar} \sum_{kq} |R_k''(\bar{u}, x'; t)|^{1/2} |R_q''(\bar{u}, x; t)|^{1/2} \times \right. \\ & \left. |R_k''(\bar{u}, x'; t) - R_q''(\bar{u}, x; t)|^{-1/2} e^{-\frac{i}{2}\pi(\alpha_k - \alpha_q)} \right], \quad (\text{E.6}) \end{aligned}$$

na qual \bar{u} é o ponto estacionário. A condição de fase estacionária fornece

$$\frac{\partial R_k}{\partial u} - \frac{\partial R_q}{\partial u} = 0 \Rightarrow p_k^f - p_q^f = 0, \quad (\text{E.7})$$

onde p_k^f e p_q^f são os momentos finais. Da condição acima, os momentos finais devem ser iguais. De (E.2) e (E.3), vemos que \tilde{K} e \tilde{K}^* propagam pontos iniciais diferentes para o mesmo ponto final u . Como os momentos finais e as posições finais são os mesmos, implica que $x = x'$. De fato, o termo entre conchetes em (E.6) é o mesmo que se obteria de

$$\int_{-\infty}^{\infty} du \tilde{K}^*(u, x; t) \tilde{K}(u, x'; t). \quad (\text{E.8})$$

Porém, do ponto de vista quântico, (E.8) fica

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} du K^*(u, x; t) K(u, x'; t) &= \int_{-\infty}^{\infty} du \langle x | e^{i\hat{H}t/\hbar} | u \rangle \langle u | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | x' \rangle \\ &= \langle x | x' \rangle = \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

Logo,

$$\int_{-\infty}^{\infty} du \tilde{K}^*(u, x; t) \tilde{K}(u, x'; t) \approx \delta(x - x'). \quad (\text{E.10})$$

Portanto, de (E.11)

$$\int_{-\infty}^{\infty} du u \tilde{K}^*(u, x; t) \tilde{K}(u, x'; t) \approx \bar{u} \delta(x - x'). \quad (\text{E.11})$$

Apêndice F

Bilhares de Andreev

Neste apêndice, discutiremos o trabalho desenvolvido durante o estágio no *Instituto de Física Teórica da Universidade de Regensburg*, de Agosto a Dezembro de 2005, sob a supervisão do *Prof. Dr. Klaus Richter* e em colaboração com *Dr. Oleg Zaitsev*. Como veremos a seguir, os resultados são preliminares e mostram que até certo nível de aproximação temos um resultado trivial. Apesar dessa trivialidade, foi essencial mostrar que não há efeito nesse nível de aproximação. O projeto foi de grande valia pois o aluno pode ter uma experiência com as abordagens semiclássicas a teoria de transporte em sistemas mesoscópicos.

F.1 Introdução

Nosso principal objetivo aqui é incluir a interação spin-órbita na dinâmica de bilhares de Andreev [63] e então calcular a densidade de estados. A expressão para a densidade de estados é derivada na abordagem semiclássica da matriz S , seguindo W. Ihra et al.[64]. Sem o grau de liberdade de spin, a densidade de estados semiclássica é dada por [64]

$$d(E) = d_N(E) + \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \text{Tr} \left\{ \frac{\partial}{\partial E} [S^e(E)S^h(E)]^m \right\}, \quad (\text{F.1})$$

na qual

$$S^h(E) = S^{e*}(-E). \quad (\text{F.2})$$

e S^e é a matriz S para elétrons e S^h para buracos.

Incluindo o grau de liberdade de spin, temos que generalizar (F.1) de maneira a levá-lo em consideração. Basicamente, temos que incluir a parte de spin em $S^e(E)$ e generalizar (F.2) para o caso com spin.

Podemos duvidar da validade de (F.1) quando o spin é incluído. Esse não parece ser o caso pois em um trabalho recente [65] uma expressão ligada a esta foi usada no cálculo dos níveis de energia de Andreev em uma junção supercondutor-normal-supercondutor, incluindo interação spin-órbita.

F.2 Matriz S Semiclássica com Spin

Seguindo O. Zaitsev et al.[66], tomamos a mesma expressão semiclássica para a matriz S como a derivada por eles para as amplitudes de transmissão incluindo spin (eq.(19) de [66]). Portanto, podemos escrever os elementos de matriz de S como

$$S_{n\sigma, m\sigma'} = \sum_{\gamma(\bar{n}, \bar{m})} \left(\hat{K}_\gamma \right)_{\sigma\sigma'} A_\gamma \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_\gamma \right), \quad (\text{F.3})$$

onde a soma se dá sobre todas as trajetórias $\gamma(\bar{n}, \bar{m})$, de energia E , que entram (saem) no bilhar em um certo ângulo $\theta_{\bar{m}}$ ($\theta_{\bar{n}}$) medido em relação a normal da seção transversal do canal.

A expressão acima foi derivada da função de Green semiclássica calculada como a transformada de Laplace do propagador semiclássico em aproximação de fase estacionária

$$\begin{aligned} G(E) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT \exp [i(E + 0^+)T/\hbar] U_{sc}(T) \Rightarrow \\ \Rightarrow G_{\sigma\sigma'}(\vec{q}_2, \vec{q}_1; E) &= \sum_\gamma \left(\hat{K}_\gamma \right)_{\sigma\sigma'} F_\gamma \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_\gamma^0(\vec{q}_2, \vec{q}_1; E) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

na qual $\sigma, \sigma' = -s, \dots, s$ (índices de spin), γ é a trajetória clássica da Hamiltoniana $H^0 = E$ com ação $S_\gamma^0 = \int_\gamma \vec{p} \cdot d\vec{q}$, $T_\gamma(E) = \partial S_\gamma^0 / \partial E$ e $(\hat{K}_\gamma)_{\sigma\sigma'}$ é o elemento de matriz $\langle \sigma | \hat{K}_\gamma(T_\gamma(E)) | \sigma' \rangle$ do propagador em spin.

É importante mencionar que $U_{sc}(T)$ e (F.4) foram derivados em [66] assumindo o seguinte Hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hbar \hat{s} \cdot \hat{C}(\hat{q}, \hat{p}), \quad (\text{F.5})$$

na qual \hat{H}^0 é independente de spin, \hat{s} é o operador de spin, e considerando a parte dependente de spin como uma perturbação. Portanto, nas aproximações semiclássicas, as trajectórias estacionárias são órbitas do Hamiltoniano \hat{H}^0 sem spin. Nesse caso, os elementos de matriz do propagador de spin, para spin 1/2, são dados por

$$\begin{aligned} \left[\hat{K}_\gamma(T_\gamma(E)) \right]_{\sigma\sigma'} &= \exp \left\{ -\frac{i}{2} \hat{T} \vec{\sigma} \cdot \int_0^{T_\gamma(E)} ds \vec{C}_\gamma(s) \right\} \\ &= \exp \left\{ -\frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\eta}_\gamma(T) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

na qual \hat{T} é o operador de ordenamento temporal.

F.3 Densidade de Estados Semiclássica

Seguinto [64], começamos com a eq.(F.3) expandindo a fase $S_\gamma(E)$ em torno da energia de Fermi como $S_\gamma(\pm E) \approx S_\gamma(0) \pm ET_\gamma(0)$, então

$$S_{n\sigma, m\sigma'}(E) = \sum_\gamma A_\gamma \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_\gamma + ET_\gamma) \right] \left[\hat{K}(T_\gamma) \right]_{\sigma\sigma'}. \quad (\text{F.7})$$

Assumindo que a matriz S para os buracos é dada por [67]

$$S^h(E) = \mathcal{T} S^e(-E) \mathcal{T}^{-1}, \quad (\text{F.8})$$

na qual \mathcal{T} é a representação matricial do operador de reversão temporal dado por $i\sigma_y \hat{C}$ (com \hat{C} sendo a operação de conjugação complexa), temos de (F.8) e (F.7)

$$\begin{aligned} S^h(E) &= \mathcal{T} S_{n\sigma, m\sigma'}^*(-E) \mathcal{T}^{-1} \\ &= \sum_{\gamma'} A_{\gamma'}^* \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (S_{\gamma'} - ET_{\gamma'}) \right] \left(\mathcal{T} \left[\hat{K}(T_{\gamma'}) \right]_{\sigma\sigma'} \mathcal{T}^{-1} \right). \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

Escrevendo $\left[\hat{K}(T_{\gamma'}) \right]_{\sigma\sigma'}$ como

$$\left[\hat{K}(T_{\gamma'}) \right]_{\sigma, \sigma'} = \hat{1} \cos(\phi_{\gamma'}) - i(\vec{\sigma} \cdot \vec{m}_{\gamma'}) \sin(\phi_{\gamma'}), \quad (\text{F.10})$$

é fácil ver que

$$\mathcal{T} \left[\hat{K}(T_{\gamma'}) \right]_{\sigma\sigma'} \mathcal{T}^{-1} = \left[\hat{K}(T_{\gamma'}) \right]_{\sigma\sigma'}. \quad (\text{F.11})$$

Na aproximação diagonal, temos

$$[S^e(E)S^h(E)]_{n\sigma,n'\sigma'}^m = \delta_{nn'} \sum_{n''} \sum_{\gamma} |A_{\gamma}(n \rightarrow n'')|^2 \exp\left(2\frac{i}{\hbar}mET_{\gamma}\right) \left[\hat{K}^2(T_{\gamma})\right]_{\sigma\sigma'}^m, \quad (\text{F.12})$$

na qual

$$\left[\hat{K}^2(T_{\gamma})\right]_{\sigma\sigma'}^m = \left[\hat{K}^{2m}(T_{\gamma})\right]_{\sigma\sigma'} = \hat{1} \cos(2m\phi_{\gamma}) - i(\vec{\sigma} \cdot \vec{m}_{\gamma}) \sin(2m\phi_{\gamma}). \quad (\text{F.13})$$

Finalmente, é possível calcular o traço em (F.1)

$$\text{Tr} [S^e(E)S^h(E)] = \text{Tr}_n [S(E)S^*(-E)]^m \text{Tr}_{\sigma} \left[\left(\hat{K}_{\gamma}^2\right)_{\sigma\sigma'}^m\right], \quad (\text{F.14})$$

na qual, agora $S(E)$ denota a parte orbital da matriz S dada por (F.3). O traço em spin fica

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\sigma} \left[\left(\hat{K}_{\gamma}^2\right)_{\sigma\sigma'}^m\right] &= [\cos(2m\phi_{\gamma}) - im_z \sin(2m\phi_{\gamma})] \\ &\quad + [\cos(2m\phi_{\gamma}) + im_z \sin(2m\phi_{\gamma})] \\ &= 2 \cos(2m\phi_{\gamma}), \end{aligned} \quad (\text{F.15})$$

onde m_z é a componente z de $\vec{m}_{\gamma} = (m_x, m_y, m_z)$.

Nesse ponto, é possível escrever (F.1) na forma

$$\begin{aligned} d(E) &= d_N(E) \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \frac{\partial}{\partial E} \left\{ \text{Tr}_n [S(E)S^*(-E)]^m 2 \cos(2m\phi_{\gamma}) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{F.16})$$

que podemos comparar com o caso sem acoplamento spin-órbita.

Seguindo [64], no limite semiclássico temos

$$\begin{aligned} \text{Tr}_n [S(E)S^*(-E)]^m 2 \cos(2m\phi_{\gamma}) &= \\ \frac{k_F}{2\pi} \int_{-1}^1 d(\sin \theta) \int_0^w dy \exp\left(2\frac{i}{\hbar}mET(y)\right) 2 \cos(2m\phi(y)). \end{aligned} \quad (\text{F.17})$$

Se não há dependência com a energia em ϕ

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial E} \left\{ \text{Tr}_n [S(E)S^*(-E)]^m 2 \cos(2m\phi_{\gamma}) \right\} &= \\ \frac{k_F}{2\pi} \int_{-1}^1 d(\sin \theta) \int_0^w dy 2\frac{i}{\hbar}mT(y) \exp\left(2\frac{i}{\hbar}mET(y)\right) 2 \cos(2m\phi(y)). \end{aligned} \quad (\text{F.18})$$

Usando (F.18) e (F.1)

$$d(E) = d_N(E) + \frac{k_F}{\pi^2 \hbar} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m 2 \int_{-1}^1 d(\sin \theta) \int_0^w dy T(y) \cos \left[2 \frac{i}{\hbar} m E T(y) \right] \cos(2m\phi(y)). \quad (\text{F.19})$$

Usando a relação $\cos(a+b) + \cos(a-b) = 2 \cos(a) \cos(b)$, podemos reescrever (F.19) como

$$d(E) = d_N(E) + \frac{k_F}{2\pi^2 \hbar} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m 2 \int_{-1}^1 d(\sin \theta) \int_0^w dy T(y) \cos \left[2 \frac{i}{\hbar} m E T(y) - 2m\phi(y) \right] + \frac{k_F}{2\pi^2 \hbar} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m 2 \int_{-1}^1 d(\sin \theta) \int_0^w dy T(y) \cos \left[2 \frac{i}{\hbar} m E T(y) + 2m\phi(y) \right]. \quad (\text{F.20})$$

Eq.(F.20) é bem parecida com o caso considerado em [64] com um campo magnético externo.

F.4 Cálculo Numérico de $d(E)$

Como não conhecemos a função ϕ , uma opção é calcularmos $d(E)$ numericamente. Para fazermos isso, escrevemos (F.19) em termos de quantidades adimensionais

$$d(E) = d_N(E) + d_N(E) \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m 2 \int_{-1}^1 d(\sin \theta) \int_0^w \frac{dy}{w} \frac{L(y)}{L_T} \cos \left[m \frac{E}{E_T} \frac{L(y)}{L_T} \right] \cos(2m\phi(y)), \quad (\text{F.21})$$

na qual $d_N(E) = mA/\pi\hbar^2$ é a densidade de estados média do bilhar isolado com spin $1/2$, $L_T = \pi A/w$ (A é a área do bilhar e w o tamanho do canal) e $E_T = \hbar v_F/2L_T$ (v_F é a velocidade de Fermi).

Agora, podemos expressar as integrais em (F.21) como uma média sobre o ensemble de condições iniciais que pode ser calculado numericamente como

$$\frac{d(\epsilon)}{d_N(\epsilon)} = 1 + \frac{2}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^M (-1)^m \frac{L_j}{L_T} \cos \left(m \epsilon \frac{L_j}{L_T} \right) \cos(2m\phi_j), \quad (\text{F.22})$$

na qual $\epsilon = E/E_T$, N é o número de trajetórias, M é o m máximo, L_j é o comprimento da j -ésima trajetória e ϕ_j é a fase devido a interação spin-órbita da j -ésima trajetória.

O cálculo numérico de (F.22) foi feito para o bilhar de Sinai assimétrico de [66] escolhendo aleatoriamente condições iniciais no canal e propagando cada uma até que ela retornasse ao canal. A fase ϕ_j foi obtida dos elementos de matriz do propagador em spin calculado como o produto dos propagadores de cada pedaço da trajetória.

Os resultados são mostrados na figura E.1. A figura mostra em linha cheia, um teste numérico de (F.22). Colocamos $\cos(2m\phi_j) = 1$ para todas as trajetórias apenas para reproduzir os resultados de [64] para os bilhares caóticos de Andreev. A linha pontilhada mostra (F.22) com a fase devido a spin-órbita. Para estes resultados numéricos, escolhemos o m máximo igual a 100 e a intensidade $\theta_R/2\pi$ do acoplamento Rashba igual a 0.2. O tamanho w do canal foi definido como $P/w = 60$, onde P é o perímetro do bilhar.

F.5 Discussão.

Encontramos um certo desacordo na literatura sobre os efeitos da interação spin-órbita em sistemas balísticos do tipo normal-supercondutor. Basicamente, os artigos falam sobre efeitos na condutância, não na densidade de estados, mas essas duas quantidades estão relacionadas. Por exemplo, em [65], os autores mostram, usando a abordagem da matriz S relacionada com a apresentada aqui, uma quebra de degenerescência dos níveis de Andreev em uma junção pequena bidimensional do tipo supercondutor-normal-supercondutor devido a interação Rashba. Por outro lado, eles mostram que não há efeito na condutância devido a interação spin-órbita se a simetria de reversão temporal é preservada. Em [68], os autores estão interessados também na condutância em junções do tipo normal-supercondutor. Eles calculam as correções quânticas à condutância clássica e, como em [66], falam sobre correções devido a caminhos revertidos temporalmente (chamada de diagonal) e a caminhos idênticos (chamada de loop). Eles argumentam que há efeito na condutância devido a interação spin-órbita mas que ele vem dos caminhos idênticos somente. A correção diagonal não contribuição alguma. Eles explicam isso da seguinte maneira: a rotação do spin de um elétron percorrendo uma certa trajetória cancela exatamente aquela de um buraco percorrendo a trajetória revertida temporalmente (essas trajetórias

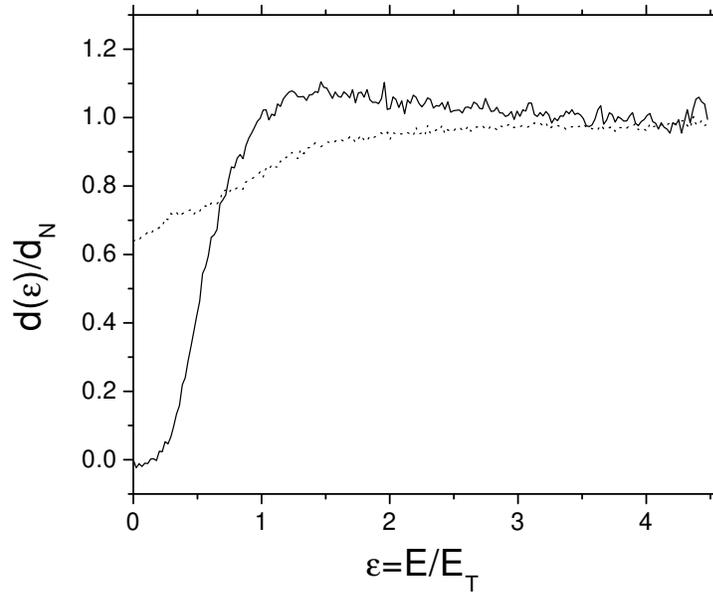


Figura F.1: Densidade de estados semiclássica para o bilhar de Sinai assimétrico calculada numericamente via (F.22) com (linha pontilhada) e sem (linha cheia) interação spin-órbita. O número máximo de trajetórias no ensemble foi escolhido igual a 3×10^6 , o m máximo igual a 100, a intensidade da interação Rashba igual a 0.2 e o tamanho do canal igual a $w = P/60$. O ponto em $\epsilon = 0$ deve ser desconsiderado.

revertidas são devido a reflexão de Andreev na fronteira entre o condutor normal e o supercondutor). Em outras palavras, a contribuição dos caminhos revertidos temporalmente é proporcional a $\text{Tr}_\sigma[\hat{K}\hat{K}^\dagger] = \text{Tr}_\sigma\hat{1}$. A situação é diferente para os loops, dizem os autores, porque nesse caso elétron e buraco percorrem a mesma trajetória e no mesmo sentido (caminhos idênticos) e tem a mesma rotação de spin. Portanto, a contribuição de caminhos idênticos é proporcional a $\text{Tr}_\sigma[\hat{K}\hat{K}]$.

O motivo da aparente discordância dos nossos resultados com esses da literatura se deve ao seguinte. Em (F.12), devido a (F.11), deveríamos tomar as trajetórias temporalmente revertidas, e por isso teríamos $\text{Tr}_\sigma[\hat{K}\hat{K}^\dagger] = \text{Tr}_\sigma\hat{1}$ ao invés de $\text{Tr}_\sigma[\hat{K}\hat{K}]$ como obtivemos. Procuramos, portanto, incorporar correções de loop e correções não-diagonais no formalismo apresentado aqui e calcular o efeito devido a interação spin-órbita.

Bibliografia

- [1] R. Luzzi, *Mecânica Estatística Vol.1 e Vol.2*, Notas de Física-IFGW 3 e 4, (Unicamp, Campinas, 1999 e 2000).
- [2] R. Luzzi, *Tópicos em Termodinâmica Estatística de Processos Dissipativos-Teoria da Função Resposta*, (Ed. Unicamp, Campinas, 2000).
- [3] R. Tolman, *The Principles of Statistical Mechanics*, (Dover Publications, New York, 1979).
- [4] E. Zermelo, Ann. Phys. **57** (Leipzig), 485 (1896).
- [5] M.C. Mackey, Rev. Mod. Phys. **61**, 981 (1989).
- [6] P.Gaspard, M.E. Briggs, M.K. Francis, J.V. Sengers, R.W. Gammon, J.R. Dorfman e R.V. Calabrese, Nature **394**, 865 (1998); C.P. Dettmann, E.G.D. Cohen e H. van Beijeren, Nature **401**, 875 (1999); P. Grassberger e T. Schreiber, Nature **401** 875 (1999); T. Kinoshita, T. Wenger e D.S. Weiss, Nature **440**, 900 (2006).
- [7] J.L. Lebowitz e O. Penrose, Phys. Today **36**, 23 (1973).
- [8] M. Wilkinson, J. Phys. A **23**, 3603 (1990).
- [9] M.V. Berry e J.M. Robbins, Proc. R. Soc. London A **442**, 659 (1993).
- [10] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **74**, 2937 (1995).
- [11] T.O. de Carvalho e M.A.M. de Aguiar, Phys. Rev. Lett. **76**, 2690 (1996).
- [12] M.V.S. Bonança e M.A.M. de Aguiar, Physica A **365**, 333 (2006).
- [13] I. Prigogine, *As Leis do Caos* (Ed. Unesp, 2003).

- [14] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods*, (Kluwer Academic Publishers, 1995).
- [15] I. Zutic, J. Fabian e S. das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [16] W.M. Gelbart, S.A. Rice e K.F. Freed, *J. Chem. Phys.* **57**, 4699 (1972).
- [17] M. Esposito e P. Gaspard, *Phys. Rev. E* **68**, 066112 (2003).
- [18] M. Esposito e P. Gaspard, *Europhys. Lett.* **65**, 742 (2004).
- [19] M. Esposito e P. Gaspard, *Phys. Lett. A* **341**, 435 (2005).
- [20] J.L. Lebowitz e L. Pastur, *J. Phys. A* **37**, 1517 (2004).
- [21] A.O. Caldeira e A.J. Leggett, *Physica A (Amsterdam)* **121**, 587 (1983).
- [22] A.O. Caldeira, *Alguns Aspectos da Dinâmica Quântica de uma Partícula Browniana*, Notas de Física-IFGW 7 (Campinas, 1994).
- [23] R.P. Feynman e F.L. Vernon, *Ann. Phys.* **24**, 118 (1963).
- [24] R. Kubo, M. Toda e N. Hashitsume, *Statistical Physics II* (Spring-Verlag, Heidelberg, 1985).
- [25] R. Kubo, *R. Prog. Phys.* **29**, 255 (1966).
- [26] H.B. Callen e R.F. Welton, *Phys. Rev.* **86**, 702 (1952).
- [27] H. Nyquist, *Phys. Rev.* **32**, 110 (1928).
- [28] A.J. Lichtenberg e M.A. Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics*, (Spring-Verlag, New York, 1992).
- [29] M. Baranger e K. T. R. Davies, *Ann. Phys.* **177** 330, (1987).
- [30] A. Canergie e I. C. Percival, *J. Phys. A* **17**, 801 (1983).
- [31] J.R. Dorfman, *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Cambridge Lecture Notes in Physics 14, (Cambridge University Press, 1999).

- [32] C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988).
- [33] P. Hänggi e F. Marchesoni, Chaos **15**, 026101 (2005).
- [34] R. Brown, Philos. Mag. **4**, 161 (1828); **6**, 161 (1829).
- [35] A. Einstein, Ann. Phys. (Leipzig) **17**, 549 (1905); **19**, 371 (1906); *Investigations on the Theory of the Brownian Motion*, (Dover, New York, 1956).
- [36] P. Langevin, C. R. Acad. Sci. (Paris) **146**, 530 (1908), traduzido para o inglês por A. Gythiel e introduzido por D.S. Lemons, Am. J. Phys. **65** (11), 1079 (1997).
- [37] M.C. Wang e G.E. Uhlenbeck, Rev. Mod. Phys. **17**, 323 (1945).
- [38] T. Tomé e M.J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, (Ed. USP, São Paulo, 2001).
- [39] R. Kubo, *The Fluctuation-Dissipation Theorem and Brownian Motion*, Tokyo Summer Lectures in Theoretical Physics, 268 (1965).
- [40] P. Hänggi e G.L. Ingold, Chaos **15**, 026105 (2005).
- [41] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, Singapore, 1993).
- [42] V. S. Anishchenko, T. E. Vadivasova, G. A. Okrokvertskhov e G. I. Strelkova, Physica A **325**, 199 (2003).
- [43] E. Forest e R. Ruth, Physica D **43**, 105 (1990).
- [44] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* (McGraw-Hill, Singapore, 1985).
- [45] M. Bianucci, R. Mannella, B.J. West e P. Grigolini, Phys. Rev. E **51** 3002 (1995).
- [46] A.B. Adib, J. Stat. Phys. **117** 581 (2004).
- [47] M. Bianucci, R. Mannella, B.J. West e P. Grigolini, Phys. Rev. E **50** 2630 (1994).

- [48] M.V.S. Bonança e M.A.M. de Aguiar, *Phys. Rev. A* **74**, 012105 (2006).
- [49] R. P. Feynman e A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, Boston, 1965).
- [50] M. Swanson, *Path Integrals and Quantum Processes* (Academic Press, Inc. 1992).
- [51] M. Wilkinson, *J. Phys. A* **20**, 2415 (1987).
- [52] B. Eckhardt, S. Fishman, K. Muller e D. Wintgen, *Phys. Rev. A* **45**, 3531 (1992).
- [53] B. Mehlig e K. Richter, *Phys. Rev. Lett.* **80** 1936, (1998).
- [54] K. Richter, *Semiclassical Theory of Mesoscopic Quantum Systems* (Springer, Berlin, 2000).
- [55] J.W. Lawson, *Phys. Rev. E* **61**, 61 (2000).
- [56] M. Hillery, R.F. O'Connell, M.O. Scully e E.P. Wigner, *Phys. Rep.* **106** 121 (1984).
- [57] M.V. Berry, *Proc. R. Soc. London A* **423**, 219 (1989).
- [58] P.G. Silvestrov e C.W.J. Beenakker, *Phys. Rev. E* **65**, 035208(R) (2002).
- [59] Z.P. Karkuszewski, C. Jarzynski e W.H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 170405 (2002).
- [60] D. Cohen e T. Kottos, *Phys. Rev. E* **69**, 055201 (2004).
- [61] L. Ermann, J.P. Paz e M. Saraceno, *Phys. Rev. A* **73**, 012302 (2006).
- [62] A.O. Caldeira e A.J. Leggett, *Phys. Rev. A* **31**, 1059 (1985).
- [63] C.W.J. Beenakker, *Lect. Notes Phys.* **667**, 131 (2005).
- [64] W. Ihra, M. Leadbeater, J.L. Vega e K. Richter, *Eur. Phys. J. B* **21**, 425-435 (2001).
- [65] O. Dimitrova e M.V. Feigel'man, cond-mat/0510182 v2.

- [66] O. Zaitsev, D. Frustaglia e K. Richter, Phys. Rev. B **72**, 155325 (2005).
- [67] O. Zaitsev, *Normal part of the scattering matrix for Andreev billiard with spin*, notas Dez.(2005).
- [68] K. Slevin, J.L. Pichard e P.A. Mello, cond-mat/9507028.
- [69] E. Doron e U. Smilansky, Phys. Rev. Lett. **68**, 1255-1258 (1992).
- [70] C.W.J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **67**, 3836-3839 (1991).
- [71] M.A.M. de Aguiar, *O Limite Semiclássico da Mecânica Quântica*, notas (1998).