Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física Gleb Wataghin

Dissertação de Mestrado

Interferência quântica com objetos complexos: O efeito dos graus de liberdade internos

João de Abreu Barbosa Coelho

Orientador: Amir Ordacgi Caldeira

Este exemplar corresponde à redação final da dissertação de mestrado defendida pelo aluno João de Abreu Barbosa Coelho e aprovada pela comissão julgadora

Campinas 08/09/2008

Campinas, 2008

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

C65i

Coelho, João de Abreu Barbosa
Interferência quântica com objetos complexos: o efeito dos graus de liberdade internos / João de Abreu Barbosa Coelho. -- Campinas, SP : [s.n.], 2008.

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

1. Descoerencia. 2. Interferometria. 3. Moleculas. I. Caldeira, Amir Ordacgi. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin" III. Título.

- **Título em inglês:** Quantum interference with complex objects: the effect of internal degrees of freedom
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
  1. Decoherence
  2. Interferometry
  3. Molecules
- **Área de concentração:** Física Clássica e Física Quântica; Mecânica e Campos.
- **Titulação:** Mestre em Física
- **Banca examinadora:**
  Prof. Amir Ordacgi Caldeira
  Prof. George Emanuel Avraam Matsas
  Prof. Marco Aurélio Pinheiro Lima
- **Data da defesa:** 25.04.2008

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **JOÃO DE ABREU BARBOSA COELHO – RA 024097** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 25 / 04 / 2008.

COMISSÃO JULGADORA:

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

Prof. Dr. George Emanuel Avraam Matsas
IFT/UNESP

Prof. Dr. Marco Aurélio Pinheiro Lima
DEQ/IFGW/UNICAMP

O espelho não gela como águas profundas.

João Coelho e Igor Azevedo

Agradecimentos

Em primeiro lugar (E o Oscar vai para...), quero agradecer profundamente a meus pais, Moisés e Sylvia. Sem eles nada disso seria possível. Agradeço também a meus irmãos, André e Nina, o carinho e o apoio que foram tão importantes durante todos esses anos.

Pela companhia, dedicação, compreensão e, principalmente, por me dizer diversas vezes: "João! Escreve a conclusão!", gostaria de agradecer a Juliana, minha amiga e namorada que tornou minha vida mais fácil e agradável durante os últimos três anos.

Sou muito grato a Amir, por ter me orientado de forma sincera e fraterna. Esses dois anos foram muito importantes para o meu crescimento profissional e pessoal e acredito que ele contribuiu bastante nesse sentido.

Agradeço o apoio financeiro a FAPESP e CNPq. Meus estudos não seriam possíveis sem essa contribuição.

Por fim (Não chorem emos), gostaria de agradecer a meus amigos que me aturaram por tanto tempo. Em especial agradeço a Erick, Fábio, Gustavo, Igor, Maíra e Mariele.

Resumo

Nesta dissertação, analisamos o efeito dos graus de liberdade internos de um objeto na dinâmica do seu centro de massa visando a determinar sua relevância para processos de descoerência em experimentos de fenda dupla. Mostramos que esses graus de liberdade se acoplam ao centro de massa na presença de um potencial que quebra a invariância translacional do sistema, e assim fazendo, funcionam como um ambiente que evolui em conjunto com o centro de massa do objeto.

Utilizando uma abordagem de espalhamento, calculamos o operador densidade do sistema composto de centro de massa e coordenadas relativas na aproximação de Born para espalhamentos elásticos. Argumentamos como esse operador densidade nos dá informação sobre os processos inelásticos e concluímos que, dentro da aproximação de Born, limitações geométricas impedem que os graus de liberdade internos do objeto atuem como um fator relevante para a descoerência.

Abstract

In this work, we analyze the effect of an object's internal degrees of freedom on its center of mass dynamics in order to determine its relevance to decoherence processes in double slit experiments. We show that these degrees of freedom couple to the center of mass in the presence of a potential that breaks the translational invariance of the system, and in so doing, act as an environment that evolves together with the object's center of mass.

Using a scattering approach, we compute the density operator of the system composed of its center of mass and relative coordinates, in the Born approximation, for elastic scattering. We argue how this density operator gives us information about inelastic processes and conclude that, within the Born approximation, geometric constraints prevent the internal degrees of freedom from acting as a relevant factor for decoherence.

Sumário

Agradecimentos **iv**

Resumo **v**

Abstract **vi**

1 Introdução **1**

2 Modelo **5**

2.1 Hamiltoniana 5

2.2 Problema de Espalhamento 9

3 Tratamento Fenomenológico **13**

3.1 Modelo Caldeira-Leggett 13

3.2 Diagonalização 15

3.3 Função de Onda 18

4 Algumas Aproximações **21**

4.1 Aproximação de Born 21

4.2 Ensemble em Equilíbrio Térmico 23

4.3 Função de Onda Efetiva 26

5 Largura Térmica **30**

5.1 Somatórias e Integrais 30

5.2 Aproximação de Fônons 33
5.3 Estimativas 36

6 Um exemplo de interferência 40
6.1 Fendas Gaussianas 40
6.2 Função de Onda 41
6.3 Quão Inelástico? 44

7 Conclusões e Perspectivas 46

A Função de Onda na Representação de Posição 49

B Média Térmica 52

Capítulo 1

Introdução

A interpretação da mecânica quântica sempre foi um tema de extrema controvérsia [1, 2, 3]. Essa controvérsia está fortemente ligada ao fato de que, na teoria quântica, medidas de uma mesma grandeza efetuadas sobre dois sistemas idênticos fornecerão resultados bem definidos, porém, em geral, diferentes. Apenas a probabilidade de obtenção de cada resultado é passível de predição pela mecânica quântica, entretanto, quando medimos uma grandeza, obtemos um resultado bem definido. Mais do que isso, o processo de medida atribui um valor à grandeza medida, alterando o estado do sistema. Esse processo é comumente denominado colapso da função de onda [4, 5].

Vê-se que o papel da medida é transpor um sistema de um estado quântico para um estado "clássico", ou seja, transformar a informação probabilística contida na função de onda em uma informação determinística a respeito da grandeza medida. Porém, o que caracteriza uma medida? Que processos físicos são responsáveis pelo colapso da função de onda? A mecânica quântica pode descrever esse colapso? Afinal, a física clássica é uma aproximação da física quântica? Como se dá a transição do mundo quântico para o mundo clássico? A resposta para todas essas perguntas é: Não sabemos.

Independente da resposta para tais questões, existe um fenômeno inerente à mecânica quântica, conhecido como descoerência [5 - 9], que nos permite

dar um passo na direção do aparecimento do mundo clássico. Descoerência é o mecanismo pelo qual um sistema quântico interage com o meio ao seu redor de forma a suprimir os efeitos de interferência dando a impressão de um colapso da função de onda. A semelhança entre sistemas quânticos com efeitos de descoerência e sistemas clássicos é, quase sempre, tão grande que muitos físicos acreditam ser ela a única responsável pelo aparecimento do mundo clássico e que não há um colapso real da função de onda. Contudo, essa não é uma visão consensual do assunto [5, 10] e a teoria de descoerência não depende dela, portanto, não iremos nos preocupar com esse tipo de interpretação nesta dissertação.

O esquema geral da teoria de descoerência consiste em considerar um sistema quântico do qual apenas um subsistema de interesse será observado. Em geral este interage com o subsistema restante, que representa o ambiente, de forma que suas relações de fase são distribuídas por todo o sistema. As relações de fase são responsáveis pelos processos de interferência quântica e sua distribuição por um sistema maior acaba por suprimir a interferência dentro das componentes que representam o subsistema de interesse.

As características detalhadas do processo de descoerência dependem das particularidades do ambiente e da forma como este interage com o subsistema de interesse. Essas minúcias podem ser obtidas por uma abordagem direta ou fenomenológica. No primeiro caso, parte-se de um modelo microscópico do sistema quântico completo e então isola-se as componentes do subsistema de interesse, enquanto no segundo, sabe-se o comportamento do subsistema de interesse, e a partir deste, modela-se o ambiente e a interação entre os dois. Em geral, a abordagem direta é muito difícil de tratar e modelos fenomenológicos costumam ser mais bem sucedidos. Além disso, modelos fenomenológicos muitas vezes podem ser justificados como aproximações dos modelos microscópicos.

Um dos experimentos, se não o experimento, que mais realça o fenômeno de interferência quântica é o experimento de fenda dupla. O experimento

consiste em disparar um feixe de partículas através de um anteparo com duas fendas estreitas e observar as posições de impacto das partículas num segundo anteparo sólido atrás do primeiro. As relações de fase aqui são dadas em função das diferenças de caminho tomado pelas partículas e daí surge um termo de interferência que é observado como um padrão de faixas populadas e vazias alternadas no segundo anteparo.

O padrão de interferência formado no experimento de fenda dupla é o resultado de uma medida da posição das partículas após a passagem pelo primeiro anteparo. Nesse caso o subsistema observado é o centro de massa das partículas. Muitos elementos desse experimento podem levar à supressão do padrão de interferência ao ampliar o sistema considerado. Se incluirmos o primeiro anteparo como parte do sistema quântico, por exemplo, veremos que flutuações em sua posição reduzirão o contraste das faixas formadas assim como a interação entre as partículas e o anteparo, que causará um emaranhamento entre os caminhos tomados pelas partículas e o momento do anteparo. Raios cósmicos, atmosfera [11] e radiação [12, 13], presentes entre os anteparos, também agiriam como um ambiente que interage com o subsistema de interesse (os centros de massa) suprimindo o padrão de interferência. Além disso, existem características intrínsecas do objeto, como a radiação que ele emite [14] e sua estrutura interna [15], que também formam um subsistema, em geral não observado, que interage com o centro de massa causando descoerência. Todos esses elementos dão origem, espontaneamente, a um aparente colapso da função de onda.

A única forma de reduzir esses efeitos é evitar a interação entre o ambiente e o subsistema de interesse, reduzindo o acoplamento entre eles ou simplesmente eliminando o ambiente. Modificações do aparato experimental, por exemplo, poderiam reduzir a perda de coerência limitando as flutuações do anteparo e melhorando o vácuo. Entretanto, as características intrínsecas de um objeto são fatores incontornáveis para a descoerência e talvez representem a maior restrição para a realização de interferência com partículas macroscópicas.

Nesta dissertação consideraremos os efeitos de descoerência num experimento de fenda dupla provenientes do acoplamento entre os graus de liberdade internos de uma partícula e seu centro de massa. No Capítulo 2 partiremos de um sistema genérico de N partículas sob a ação de um potencial fixo no espaço. Mostraremos como esse potencial acopla o centro de massa aos graus de liberdade internos e desenvolveremos uma prescrição para tratar o problema como um espalhamento efetivo do centro de massa.

No Capítulo 3 utilizaremos uma abordagem fenomenológica a partir do modelo Caldeira-Leggett [16, 17, 18] com acoplamento bi-linear, para obter uma hamiltoniana que acopla o centro de massa aos graus de liberdade internos através de um potencial fixo no espaço. Utilizaremos então a prescrição feita no Capítulo 2 para escrever a função de onda do sistema.

A seguir, no Capítulo 4, faremos algumas aproximações e tomaremos o traço parcial sobre as variáveis internas. Resolveremos os termos elásticos e mostraremos que ele se reduz a um problema de espalhamento por um potencial efetivo em que a estrutura do objeto é representada por um único parâmetro.

Esse parâmetro funciona como uma largura térmica que aumenta a largura efetiva do potencial e será determinado em função de características macroscópicas do objeto, modelando os graus de liberdade internos como fônons acústicos, no Capítulo 5.

Por fim, no Capítulo 6, utilizaremos o formalismo desenvolvido num exemplo de potencial equivalente a uma fenda dupla. Mostraremos então que papel os graus de liberdade internos desempenham numa situação deste tipo.

Capítulo 2

Modelo

2.1 Hamiltoniana

Para começar, precisamos definir o nosso problema matematicamente. Para isso vamos modelar uma hamiltoniana que será nosso ponto de partida. Consideraremos um objeto formado por N partículas sujeitas a um potencial interno $f(\{\boldsymbol{r}_\alpha\})$, que as liga, e a um potencial externo $V(\boldsymbol{r})$, fixo no espaço. Podemos escrever a hamiltoniana de forma bastante geral como:

$$H = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^{N} V(\boldsymbol{r}_\alpha) + f(\{\boldsymbol{r}_\alpha\}) \tag{2.1}$$

onde $\boldsymbol{r}_\alpha$ representa a posição da α-ésima partícula, de massa m_α, e $\boldsymbol{p}_\alpha$ seu momento conjugado.

Não conhecemos o potencial interno exato do problema, mas sabemos que este potencial deve manter as partículas ligadas e, portanto, assumiremos que existe uma posição de equilíbrio estável para cada partícula. Supondo que as partículas não têm energia suficiente para se afastar substancialmente dessas posições de equilíbrio, expandiremos o potencial ao redor das mesmas. Como estamos expandindo ao redor de um ponto de equilíbrio, o primeiro termo

não nulo, exceto por uma constante que não afeta a dinâmica do sistema, é quadrático em r_α. Para simplificar as coisas definimos novas coordenadas de deslocamento em relação às posições de equilíbrio: $\boldsymbol{\rho}_\alpha = \boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}^0_\alpha$. Se escolhermos o sistema de coordenadas com origem no centro de massa do objeto e em rotação com o mesmo, o momento conjugado a $\boldsymbol{\rho}_\alpha$ é $\boldsymbol{p}_\alpha$. Ignoraremos os termos resultantes da escolha de um referencial não inercial que dariam origem a forças centrífugas e de Coriolis, assumindo que esses termos são muito pequenos se o objeto é semi-rígido. Temos então:

$$\begin{aligned} f\left(\{\boldsymbol{r}_\alpha\}\right) &\approx \sum_{\alpha,\beta=1}^{N}\sum_{i,j=1}^{3}\frac{1}{2}\rho^i_\alpha \left.\frac{\partial^2 f}{\partial\rho^i_\alpha\partial\rho^j_\beta}\right|_{\{\boldsymbol{\rho}_\alpha\}=\{0\}}\rho^j_\beta \\ &= \sum_{\alpha,\beta=1}^{N}\sum_{i,j=1}^{3}\frac{1}{2}\rho^i_\alpha\sqrt{m_\alpha}\Omega_{(\alpha,i)(\beta,j)}\sqrt{m_\beta}\rho^j_\beta \end{aligned} \tag{2.2}$$

onde os índices latinos representam as componentes cartesianas dos vetores e na última igualdade apenas definimos a matriz Ω a partir da hessiana de f.

Por ora, esqueçamos do potencial externo e diagonalizemos a hamiltoniana restante. Para isso faremos a seguinte transformação de coordenadas:

$$\rho^i_\alpha = \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\sqrt{\frac{\mu_\beta}{m_\alpha}}U_{(\alpha,i)(\beta,j)}\eta^j_\beta, \quad p^i_\alpha = \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\sqrt{\frac{m_\alpha}{\mu_\beta}}U_{(\alpha,i)(\beta,j)}\pi^j_\beta \tag{2.3}$$

onde μ_β passa a ser a nova massa da β-ésima partícula e escolhemos uma matriz U tal que:

$$\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{i=1}^{3}U_{(\alpha,i)(\beta,j)}U_{(\alpha,i)(\gamma,k)} = \delta_{\beta,\gamma}\delta_{j,k}, \tag{2.4}$$

$$\sum_{\alpha,\beta=1}^{N}\sum_{i,j=1}^{3}U_{(\alpha,i)(\gamma,k)}\Omega_{(\alpha,i)(\beta,j)}U_{(\beta,j)(\lambda,l)} = \omega^2_{(\gamma,k)}\delta_{\gamma,\lambda}\delta_{k,l} \tag{2.5}$$

Obtemos então a seguinte hamiltoniana:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\pi_\alpha^2}{2\mu_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{2}\mu_\alpha \omega_{(\alpha,i)}^2 {\eta_\alpha^i}^2 \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N} V\left(\boldsymbol{r}_\alpha^0 + \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{j=1}^{3} \sqrt{\frac{\mu_\beta}{m_\alpha}} \boldsymbol{U}_{\alpha\,(\beta,j)} \eta_\beta^j \right) \end{aligned} \tag{2.6}$$

onde $\boldsymbol{U}_{\alpha\,(\beta,j)}$ é um vetor de componentes $U_{(\alpha,i)(\beta,j)}$.

Pode-se mostrar pela invariância de f por rotações e translações que 6 (ou 5, se o objeto for linear) dos $3N$ valores de $\omega_{(\alpha,i)}$ são nulos. Eles representam os graus de liberdade de translação e rotação do objeto. Diremos que esses são graus de liberdade macroscópicos do objeto. Nesta dissertação ignoraremos solenemente as rotações. Seus efeitos são relevantes [15], porém podem ser tratados separadamente na aproximação harmônica, pois não há acoplamento entre rotação e vibração.

Ignorando então 3 graus de liberdade, redefiniremos as nossas variáveis da seguinte forma:

$$\begin{gathered} \boldsymbol{\eta}_N = \boldsymbol{R}, \quad \boldsymbol{\pi}_N = \boldsymbol{P}, \quad \mu_N \equiv M = \sum_{\alpha=1}^{N} m_\alpha, \quad \omega_{(N,i)} = 0, \\ \alpha \leq N-2 \;\Leftrightarrow X_{(\alpha,i)} \equiv X_\alpha^i \equiv X_{\alpha+(N-2)(i-1)} \end{gathered} \tag{2.7}$$

onde $\boldsymbol{R}$ e $\boldsymbol{P}$ são, respectivamente, a coordenada e o momento linear do centro de massa. Substituindo na hamiltoniana temos:

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2M} + \sum_{\alpha=1}^{3N-6} \frac{\pi_\alpha^2}{2\mu_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^{3N-6} \frac{1}{2}\mu_\alpha \omega_\alpha^2 \eta_\alpha^2 \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N} V\left(\boldsymbol{r}_\alpha^0 + \sum_{j=1}^{3} \sqrt{\frac{M}{m_\alpha}} \boldsymbol{U}_{\alpha\,(N,j)} R^j + \sum_{\beta=1}^{3N-6} \sqrt{\frac{\mu_\beta}{m_\alpha}} \boldsymbol{U}_{\alpha\beta} \eta_\beta \right) \end{aligned} \tag{2.8}$$

A partir dessa hamiltoniana podemos tirar algumas conclusões. A presença de um potencial fixo no espaço quebra a invariância translacional do sistema, acoplando o centro de massa aos graus de liberdade internos. Entretanto, esse acoplamento não ocorrerá se o potencial for linear, ou seja, se a força aplicada for constante, pois esse tipo de potencial não quebra a invariância translacional. Se o potencial for harmônico, também não haverá acoplamento desde que as massas de todas as partículas sejam iguais. Isso pode ser mostrado através da unitariedade da matriz U (eq. (2.4)) e ocorre devido à aproximação harmônica do potencial interno. Além disso, os graus de vibração devem obedecer às chamadas condições de Eckart [19], que representam a escolha de um sistema de coordenadas com origem no centro de massa e girando com o objeto na aproximação harmônica do potencial interno. A partir disso pode-se mostrar que um acoplamento linear nas coordenadas internas é impossível para partículas de massas iguais.

Estamos considerando um objeto semi-rígido, portanto, a não existência de um acoplamento linear nas coordenadas internas implica um acoplamento efetivo mais fraco. Isso mostra que podemos explorar simetrias para diminuir o efeito dos graus de liberdade internos na dinâmica do centro de massa. Assim poderia se preservar a coerência do centro de massa por tempos mais longos.

Agora introduzimos operadores de criação e aniquilação para as coordenadas internas:

$$a_\alpha = \frac{\pi_\alpha - i\mu_\alpha\omega_\alpha\eta_\alpha}{\sqrt{2\mu_\alpha\hbar\omega_\alpha}}, \quad a_\alpha^\dagger = \frac{\pi_\alpha + i\mu_\alpha\omega_\alpha\eta_\alpha}{\sqrt{2\mu_\alpha\hbar\omega_\alpha}} \tag{2.9}$$

e escrevemos nossa hamiltoniana final:

$$H = \frac{P^2}{2M} + \sum_{\alpha=1}^{3N-6} \hbar\omega_\alpha \left(a_\alpha^\dagger a_\alpha + 1/2\right) + V\left(\boldsymbol{R}, \left\{a_\alpha, a_\alpha^\dagger\right\}\right) \tag{2.10}$$

onde escrevemos o potencial em função das variáveis internas e externas de uma forma mais geral para incluir a possibilidade de um potencial que age de forma diferente sobre cada partícula, já que a forma como o potencial depende dessas variáveis não será relevante para o resto deste capítulo.

2.2 Problema de Espalhamento

Se o potencial V tiver alcance finito, teremos um cenário típico de espalhamento, onde o estado assintótico do objeto é dado por uma partícula livre e um conjunto de $3N-6$ osciladores harmônicos unidimensionais e desacoplados. A idéia então é obter uma equação de Lippmann-Schwinger, como foi feito por Castro Neto e Caldeira [20], e traçar as coordenadas internas para achar a dinâmica efetiva do centro de massa do objeto.

Escrevemos a hamiltoniana da seguinte forma:

$$H_0 = \frac{P^2}{2M} + \sum_{\alpha=1}^{3N-6} \hbar\omega_\alpha \left(a_\alpha^\dagger a_\alpha + 1/2\right), \; H = H_0 + V\left(\boldsymbol{R}, \left\{a_\alpha, a_\alpha^\dagger\right\}\right) \quad (2.11)$$

Como V tem alcance finito, os autovalores de H devem ser idênticos aos de H_0, pois H converge assintoticamente para H_0 longe do potencial. Temos então:

$$H\left|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right\rangle = \left[\frac{\hbar^2 q^2}{2M} + \sum_{\alpha=1}^{3N-6} \hbar\omega_\alpha \left(n_\alpha + \frac{1}{2}\right)\right] \left|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right\rangle \quad (2.12)$$

Tomando esta equação no espaço de momentos do centro de massa e no espaço de Fock dos osciladores e rearranjando os termos, obtemos:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2M}\left(k^2-q^2\right)+\sum_{\alpha=1}^{3N-6}\hbar\omega_\alpha\left(m_\alpha-n_\alpha\right)\right]\left\langle \boldsymbol{k},\{m_\alpha\}\left|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right.\right\rangle$$
$$=-\left\langle \boldsymbol{k},\{m_\alpha\}\left|V\left(\boldsymbol{R},\left\{a_\alpha,a_\alpha^\dagger\right\}\right)\right|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right\rangle \tag{2.13}$$

Fica evidente nessa equação que $|\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}\rangle$, que é autoestado de H_0, é uma solução no caso homogêneo, ou seja, quando $V\to 0$. A seguinte expressão satisfaz a equação não homogênea, porém seu denominador é singular.

$$\left\langle \boldsymbol{k},\{m_\alpha\}\left|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right.\right\rangle=-\frac{\left\langle \boldsymbol{k},\{m_\alpha\}\left|V\left(\boldsymbol{R},\left\{a_\alpha,a_\alpha^\dagger\right\}\right)\right|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right\rangle}{\frac{\hbar^2\left(k^2-q^2\right)}{2M}+\sum_{\alpha=1}^{3N-6}\hbar\omega_\alpha\left(m_\alpha-n_\alpha\right)} \tag{2.14}$$

Para contornar esta situação podemos adicionar um termo imaginário que tende a zero, fazendo com que o denominador torne-se complexo. O sinal deste termo está relacionado com a direção de propagação do estado e escolheremos o sinal positivo que representa um estado que se afasta do potencial. Obtemos finalmente a seguinte equação de Lippmann-Schwinger:

$$\left\langle \boldsymbol{k},\{m_\alpha\}\left|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right.\right\rangle=\left\langle \boldsymbol{k},\{m_\alpha\}\left|\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}\right.\right\rangle$$
$$-\frac{\left\langle \boldsymbol{k},\{m_\alpha\}\left|V\left(\boldsymbol{R},\left\{a_\alpha,a_\alpha^\dagger\right\}\right)\right|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right\rangle}{\frac{\hbar^2\left(k^2-q^2\right)}{2M}+\sum_{\alpha=1}^{3N-6}\hbar\omega_\alpha\left(m_\alpha-n_\alpha\right)+i\epsilon} \tag{2.15}$$

Computando a transformada de Fourier desta equação na aproximação de Born obtemos (veja Apêndice A):

$$\left\langle \boldsymbol{r}, \{m_\alpha\} \middle| \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \right\rangle \approx \frac{e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \delta_{\{n_\alpha\},\{m_\alpha\}} - \frac{\sqrt{2\pi}M}{\hbar^2} \frac{e^{i\widetilde{k}r}}{r} \left\langle \widetilde{k}\hat{\boldsymbol{r}}, \{m_\alpha\} \middle| V\left(\boldsymbol{R}, \{a_\alpha, a_\alpha^\dagger\}\right) \middle| \boldsymbol{q}, \{n_\alpha\} \right\rangle \tag{2.16}$$

onde $\widetilde{k} = \sqrt{q^2 - \sum_\alpha \frac{2M\omega_\alpha}{\hbar}(m_\alpha - n_\alpha)}$.

Como era de se esperar, obtemos uma onda esférica modulada por uma amplitude de espalhamento dada pela transformada de Fourier de um potencial efetivo, modificado pelo banho. Além disso, o módulo do momento é alterado para espalhamentos inelásticos. Se o potencial for uma fenda dupla, por exemplo, haverá uma redução da visibilidade das franjas de interferência devido ao alargamento efetivo da distribuição de momentos caso o estado interno final do objeto não seja medido. A dimensão desse alargamento dependerá de quanto a amplitude de espalhamento se afasta de um delta de Kronecker na função de onda, ou seja, de quão inelástico é o espalhamento.

Em geral, medir o estado interno final de um objeto é muito difícil assim como raramente é possível preparar o sistema num estado interno inicial bem definido. Na prática temos informação apenas sobre o centro de massa e possivelmente um estado interno inicial misto. Para representar essa ignorância experimental vamos descrever o objeto num estado interno inicial em equilíbrio térmico e então tomaremos o traço parcial em relação às coordenadas dos osciladores. Obtemos então o seguinte operador densidade reduzido:

$$\rho_R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \sum_{\substack{\{n_\alpha\},\\ \{m_\alpha\}}} \frac{1}{Z} \exp\left(- \sum_{\alpha=1}^{3N-6} \frac{\hbar\omega_\alpha}{k_B T} n_\alpha \right) \times \left\langle \boldsymbol{r}, \{m_\alpha\} \middle| \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \right\rangle \left\langle \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \middle| \boldsymbol{r}', \{m_\alpha\} \right\rangle \tag{2.17}$$

onde $Z = \sum_{\{n_\alpha\},} \exp\left(-\sum_{\alpha=1}^{3N-6} \frac{\hbar\omega_\alpha}{k_B T} n_\alpha\right)$ é a função de partição do banho de osciladores, k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. Os elementos diagonais deste operador densidade reduzido representam a distribuição de probabilidades de encontrarmos o objeto num determinado ponto do espaço. É esta distribuição que esperamos ver como a intensidade do feixe num experimento de espalhamento.

Nos próximos capítulos, utilizaremos a prescrição feita até aqui num modelo fenomenológico simples e mostraremos como ele se relaciona com o problema que estamos tratando.

Capítulo 3

Tratamento Fenomenológico

3.1 Modelo Caldeira-Leggett

Os efeitos de descoerência são provenientes da interação do sistema de interesse com o meio ao seu redor. A forma exata dessa interação raramente é bem conhecida, e quando o é, dificilmente é passível de resolução exata. Para contornar essa situação, modelos fenomenológicos são propostos, e dentre eles, um merece destaque: o chamado modelo Caldeira-Leggett [16].

Por sua simplicidade, esse modelo é amplamente utilizado na descrição de fenômenos quânticos dissipativos obtendo resultados condizentes com os resultados experimentais. O modelo consiste em descrever o ambiente como um conjunto de osciladores harmônicos e acoplá-los ao sistema de interesse linearmente. Descreveremos este cenário a partir da seguinte hamiltoniana:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) + \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{\widetilde{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 \widetilde{r}_\alpha^2 - C_\alpha \widetilde{\boldsymbol{r}}_\alpha \cdot \boldsymbol{r} + \frac{C_\alpha^2 r^2}{2m_\alpha \omega_\alpha^2} \right) \quad (3.1)$$

onde m, $\boldsymbol{p}$ e $\boldsymbol{r}$ são, respectivamente, a massa, o momento e a posição do sistema de interesse, m_α, $\widetilde{\boldsymbol{p}}_\alpha$ e $\widetilde{\boldsymbol{r}}_\alpha$ são, respectivamente, os momentos e posições dos osciladores e C_α são as constantes de acoplamento. O acoplamento en-

tre os osciladores e o sistema de interesse naturalmente modifica o potencial real sentido pelo último, subtraindo um termo harmônico. Antecipando este fenômeno, um contratermo foi adicionado ao final da hamiltoniana de forma a cancelar o termo que surgiria na dinâmica do sistema de interesse. Com isso, $V(\boldsymbol{r})$ representa o potencial real, não modificado pela presença dos osciladores.

A partir dessa hamiltoniana podemos calcular toda a dinâmica do sistema de interesse, tendo como parâmetros apenas as constantes de acoplamento, as massas das partículas e as frequências características dos osciladores. Esses parâmetros podem ser encontrados a partir de uma análise microscópica detalhada do sistema real em que se está trabalhando, mas esta nem sempre é uma opção. Alternativamente, pode-se utilizar uma dinâmica macroscópica conhecida e tentar determinar que parâmetros levariam a esse tipo de dinâmica.

Uma maneira de simplificar o problema é transformar as somatórias em integrais introduzindo a seguinte densidade espectral:

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha} \delta(\omega - \omega_\alpha) \tag{3.2}$$

que é a parte imaginária da transformada de Fourier da susceptibilidade dinâmica retardada do banho de osciladores. O trabalho agora passa a ser determinar $J(\omega)$. Uma dissipação clássica com força proporcional a velocidade, por exemplo, seria descrita por uma densidade espectral linear. Por enquanto, não vamos nos ater a nenhuma densidade espectral específica.

Para tornar mais clara a conexão entre esse modelo e o nosso problema de espalhamento descrito no capítulo anterior, façamos a seguinte transformação de coordenadas:

$$\widetilde{\boldsymbol{r}}_\alpha = \sqrt{\frac{\mu_\alpha}{m_\alpha}}\boldsymbol{r}_\alpha, \quad \widetilde{\boldsymbol{p}}_\alpha = \sqrt{\frac{m_\alpha}{\mu_\alpha}}\boldsymbol{p}_\alpha, \text{ onde } \mu_\alpha = \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^4} \tag{3.3}$$

Nossa hamiltoniana assume então a seguinte forma:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) + \sum_{\alpha=1}^{N}\left[\frac{p_\alpha^2}{2\mu_\alpha} + \frac{1}{2}\mu_\alpha\omega_\alpha^2(\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r})^2\right] \tag{3.4}$$

Fica claro que essa hamiltoniana descreve uma partícula de massa m, sujeita a um potencial $V(\boldsymbol{r})$ e ligada por "molas" a N partículas de massa μ_α. O conjunto das $N+1$ partículas forma um único objeto cujo centro de massa será o nosso sistema de interesse. Nosso trabalho agora é achar um conjunto de transformações que explicitem as coordenadas do centro de massa do objeto e como ele se acopla às variáveis internas através do potencial $V(\boldsymbol{r})$.

3.2 Diagonalização

Assim como no capítulo anterior, vamos ignorar temporariamente o potencial externo e vamos nos concentrar na diagonalização da hamiltoniana restante. Faremos isso seguindo os passos de Hakim e Ambegaokar [21] numa generalização para 3 dimensões.

Faremos a diagonalização utilizando um conjunto de transformações unitárias. A primeira transformação aplicada é dada por:

$$U_1 = \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{r}}{\hbar}\cdot\sum_{\alpha=1}^{N}\boldsymbol{p}_\alpha\right) \tag{3.5}$$

e sua ação efetiva é deslocar $\boldsymbol{p}$ e $\boldsymbol{r}_\alpha$, de acordo com a fórmula $e^A B e^{-A} = B + [A,B] \Leftrightarrow [[B,A],A] = 0$, de forma que: $\boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} - \sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{p}_\alpha$ e $\boldsymbol{r}_\alpha \to \boldsymbol{r}_\alpha + \boldsymbol{r}$. Assim, $\boldsymbol{p}$ passa a ser o momento do centro de massa do objeto, que é conservado, e os osciladores ficam centrados na origem. Com isso ficamos com a seguinte hamiltoniana:

$$U_1^\dagger H U_1 = \frac{\left(\boldsymbol{p} - \sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{p}_\alpha\right)^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) + \sum_{\alpha=1}^{N}\left(\frac{p_\alpha^2}{2\mu_\alpha} + \frac{1}{2}\mu_\alpha \omega_\alpha^2 r_\alpha^2\right) \tag{3.6}$$

A próxima transformação irá desacoplar os momentos. Ela é expressa da seguinte forma:

$$U_2 = \exp\left(\frac{i\boldsymbol{p}}{\hbar} \cdot \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\mu_\alpha \boldsymbol{r}_\alpha}{M}\right), \text{ com } M = m + \sum_{\alpha=1}^{N} \mu_\alpha \tag{3.7}$$

e sua ação efetiva é deslocar $\boldsymbol{p}_\alpha$ e $\boldsymbol{r}$ tal que: $\boldsymbol{p}_\alpha \to \boldsymbol{p}_\alpha + \frac{\mu_\alpha \boldsymbol{p}}{M}$ e $\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r} - \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\mu_\alpha \boldsymbol{r}_\alpha}{M}$, desacoplando $\boldsymbol{p}_\alpha$ e $\boldsymbol{p}$ de forma que o centro de massa se acopla ao banho apenas através do potencial externo. Após alguma álgebra, obtemos a hamiltoniana abaixo:

$$\begin{aligned} U_2^\dagger U_1^\dagger H U_1 U_2 &= \frac{p^2}{2M} + V\left(\boldsymbol{r} - \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\mu_\alpha \boldsymbol{r}_\alpha}{M}\right) \\ &+ \frac{1}{2M}\left(\sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{p}_\alpha\right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N}\left(\frac{p_\alpha^2}{2\mu_\alpha} + \frac{1}{2}\mu_\alpha \omega_\alpha^2 r_\alpha^2\right) \end{aligned} \tag{3.8}$$

O próximo passo é diagonalizar a hamiltoniana dos osciladores. Para tanto, introduzimos operadores de criação e aniquilação como no capítulo anterior. Com isso, ficamos com a seguinte hamiltoniana:

$$U_2^\dagger U_1^\dagger H\, U_1 U_2 = \frac{p^2}{2M} + V\left(\boldsymbol{r} + \frac{i}{M}\sum_{\alpha=1}^{N}\sqrt{\frac{\hbar\mu_\alpha}{2\omega_\alpha}}\left(\boldsymbol{a}_\alpha^\dagger - \boldsymbol{a}_\alpha\right)\right) + \frac{1}{2M}\left[\sum_{\alpha=1}^{N}\sqrt{\frac{\hbar\mu_\alpha\omega_\alpha}{2}}\left(\boldsymbol{a}_\alpha^\dagger + \boldsymbol{a}_\alpha\right)\right]^2 + \sum_{\alpha=1}^{N}\hbar\omega_\alpha\left(\boldsymbol{a}_\alpha^\dagger\cdot\boldsymbol{a}_\alpha + \frac{3}{2}\right) \quad (3.9)$$

Agora faremos a seguinte transformação de Bogoliubov:

$$\begin{aligned} U_3^\dagger \boldsymbol{a}_\alpha U_3 &= \sum_{\beta=1}^{N} A_{\alpha\beta}\boldsymbol{a}_\beta^\dagger + B_{\alpha\beta}\boldsymbol{a}_\beta, \\ U_3^\dagger \boldsymbol{a}_\alpha^\dagger U_3 &= \sum_{\beta=1}^{N} B_{\alpha\beta}\boldsymbol{a}_\beta^\dagger + A_{\alpha\beta}\boldsymbol{a}_\beta \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} A_{\alpha\beta} &= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\mu_\alpha\omega_\alpha}{\Omega_\beta}}\frac{1}{\Omega_\beta+\omega_\alpha}\left[\sum_{\gamma=1}^{N}\frac{\mu_\gamma\omega_\gamma^2}{\left(\Omega_\beta^2-\omega_\gamma^2\right)^2}\right]^{-1/2}, \\ B_{\alpha\beta} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\mu_\alpha\omega_\alpha}{\Omega_\beta}}\frac{1}{\Omega_\beta-\omega_\alpha}\left[\sum_{\gamma=1}^{N}\frac{\mu_\gamma\omega_\gamma^2}{\left(\Omega_\beta^2-\omega_\gamma^2\right)^2}\right]^{-1/2} \end{aligned} \quad (3.11)$$

que diagonaliza a hamiltoniana do banho de osciladores, onde $\{\Omega_\beta\}$ é o conjunto das soluções da seguinte equação:

$$\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{\mu_\alpha\omega_\alpha^2}{M\left(\Omega_\beta^2-\omega_\alpha^2\right)} = 1 \quad (3.12)$$

O resultado é que:

$$U_3^\dagger U_2^\dagger U_1^\dagger \, H \, U_1 U_2 U_3 = H' = \frac{p^2}{2M} + \sum_{\alpha=1}^{N} \hbar\Omega_\alpha \left(\boldsymbol{a}_\alpha^\dagger \cdot \boldsymbol{a}_\alpha + \frac{3}{2} \right) + V\left(\boldsymbol{r} + \frac{i}{M} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N} \sqrt{\frac{\hbar\mu_\alpha}{2\omega_\alpha}} \left(B_{\alpha\beta} - A_{\alpha\beta}\right) \left(\boldsymbol{a}_\beta^\dagger - \boldsymbol{a}_\beta \right) \right) \quad (3.13)$$

Este é o resultado principal desta seção. Mostramos que, através de um conjunto de transformações, a hamiltoniana (3.1) pode ser colocada na forma da equação (2.10). A seguir iremos usar esta hamiltoniana para escrever a equação de Lippmann-Schwinger que pretendemos resolver.

3.3 Função de Onda

Em primeiro lugar, escrevamos o potencial da equação (3.13) nas coordenadas dos novos osciladores da seguinte forma:

$$V\left(\boldsymbol{r} + \frac{i}{M} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N} \sqrt{\frac{\hbar\mu_\alpha}{2\omega_\alpha}} \left(B_{\alpha\beta} - A_{\alpha\beta}\right) \left(\boldsymbol{a}_\beta^\dagger - \boldsymbol{a}_\beta \right) \right) = V\left(\boldsymbol{r} + i\hbar \sum_{\beta=1}^{N} K_\beta \left(\boldsymbol{a}_\beta^\dagger - \boldsymbol{a}_\beta \right) \right), \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \text{onde } K_\beta &= \frac{1}{M} \sum_{\alpha=1}^{N} \sqrt{\frac{\mu_\alpha}{2\hbar\omega_\alpha}} \left(B_{\alpha\beta} - A_{\alpha\beta}\right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\mu_\alpha \sqrt{\Omega_\beta}}{\sqrt{2\hbar} M \left(\Omega_\beta^2 - \omega_\alpha^2\right)} \left[\sum_{\gamma=1}^{N} \frac{\mu_\gamma \omega_\gamma^2}{\left(\Omega_\beta^2 - \omega_\gamma^2\right)^2} \right]^{-1/2} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Podemos ver que o resultado das transformações aplicadas em $V(\boldsymbol{r})$ é deslocar $\boldsymbol{r}$ de forma que $\boldsymbol{r} \rightarrow \boldsymbol{r} + i\hbar \sum_{\beta=1}^{N} K_\beta \left(\boldsymbol{a}_\beta^\dagger - \boldsymbol{a}_\beta \right)$. A transformação unitária que causa esse deslocamento é dada por:

$$U = \exp\left(\boldsymbol{p} \cdot \sum_{\beta=1}^{N} K_\beta \left(\boldsymbol{a}_\beta^\dagger - \boldsymbol{a}_\beta \right) \right) \tag{3.16}$$

que é simplesmente a combinação $U_3^\dagger U_2 U_3$, já que $V(\boldsymbol{r})$ comuta com U_1 e U_3. Escrevemos então a hamiltoniana (3.13) da seguinte forma:

$$H' = H_0 + U^\dagger V U \tag{3.17}$$

Como estamos nos restringindo a sistemas finitos, haverá sempre uma frequência mínima de corte. Como veremos no Capítulo 5, isso garante que o termo dependente das coordenadas do banho no argumento do potencial seja finito, desde que a densidade espectral não seja singular. Portanto, se o potencial tem um alcance finito, haverá sempre uma distância $\boldsymbol{r}$ suficientemente afastada da origem tal que o potencial é praticamente nulo e o sistema se comporta como uma partícula livre de massa M e momento $\hbar\boldsymbol{q}$ e N osciladores harmônicos desacoplados descritos pelos números de ocupação $\{\boldsymbol{n}_\alpha\}$. Com isso nós sabemos os estados assintóticos do problema e podemos tratá-lo como um problema de espalhamento.

Escrevemos a seguinte equação de Lippmann-Schwinger, de acordo com a equação (2.15):

$$\begin{aligned} \left\langle \boldsymbol{k}, \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \middle| \psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \right\rangle = \left\langle \boldsymbol{k}, \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \middle| \boldsymbol{q}, \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \right\rangle \\ - \frac{\left\langle \boldsymbol{k}, \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \middle| U^\dagger V U \middle| \psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \right\rangle}{\dfrac{\hbar^2 (k^2 - q^2)}{2M} + \sum_{\alpha=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} \hbar\Omega_\alpha \left(m_\alpha^j - n_\alpha^j \right) + i\epsilon} \end{aligned} \tag{3.18}$$

Agora vamos tomar proveito de termos dependência nas variáveis dos osciladores apenas em U e $U^\dagger$ para reescrever o numerador do último termo do lado direito da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\left\langle \boldsymbol{k}, \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \left| U^\dagger V U \right| \psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \right\rangle &= \sum_{\{\boldsymbol{m}'_\alpha\}} \int d^3k' \left\langle \boldsymbol{k}, \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \right| U^\dagger V U \left| \boldsymbol{k}', \{\boldsymbol{m}'_\alpha\} \right\rangle \\
&\quad \times \left\langle \boldsymbol{k}', \{\boldsymbol{m}'_\alpha\} \right| \psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \Big\rangle \\
&= \sum_{\{\boldsymbol{m}'_\alpha\}} \int d^3k' \left\langle \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \right| U^\dagger(\boldsymbol{k}) U(\boldsymbol{k}') \left| \{\boldsymbol{m}'_\alpha\} \right\rangle \\
&\quad \times \left\langle \boldsymbol{k} \right| V \left| \boldsymbol{k}' \right\rangle \left\langle \boldsymbol{k}', \{\boldsymbol{m}'_\alpha\} \right| \psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \Big\rangle \\
&= \sum_{\{\boldsymbol{m}'_\alpha\}} \int d^3k' \left\langle \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \right| U^\dagger(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \left| \{\boldsymbol{m}'_\alpha\} \right\rangle \\
&\quad \times \overline{V}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \left\langle \boldsymbol{k}', \{\boldsymbol{m}'_\alpha\} \right| \psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \Big\rangle \qquad (3.19)
\end{aligned}$$

onde $\overline{V}(\boldsymbol{k})$ é a transformada de Fourier do potencial. Substituindo então na equação (3.18) temos:

$$\begin{aligned}
\left\langle \boldsymbol{k}, \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \right| \psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \Big\rangle &= \left\langle \boldsymbol{k}, \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \right| \boldsymbol{q}, \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \Big\rangle - \int d^3k' \, \overline{V}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \\
&\quad \times \sum_{\{\boldsymbol{m}'_\alpha\}} \frac{\left\langle \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \right| U^\dagger(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \left| \{\boldsymbol{m}'_\alpha\} \right\rangle \left\langle \boldsymbol{k}', \{\boldsymbol{m}'_\alpha\} \right| \psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \Big\rangle}{\dfrac{\hbar^2 (k^2 - q^2)}{2M} + \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} \hbar\Omega_\alpha \left(m_\alpha^j - n_\alpha^j \right) + i\epsilon} \qquad (3.20)
\end{aligned}$$

Esta é a equação geral para a função de onda de uma partícula linearmente acoplada a um banho de osciladores. A solução dessa equação pode ser muito difícil dependendo do potencial e ainda mais pela presença do banho. No próximo capítulo utilizaremos algumas aproximações para simplificar esta equação e então resolvê-la.

Capítulo 4

Algumas Aproximações

4.1 Aproximação de Born

A equação (3.20) é, em geral, muito difícil de ser resolvida de forma exata. Ao invés disso, vamos lançar mão de algumas aproximações para tentar simplificar o problema. Em primeiro lugar vamos supor que o potencial é fraco o suficiente para que possamos usar a aproximação de Born em primeira ordem. Assim substituiremos a função de onda no integrando da equação (3.20) pela solução homogênea. Temos então:

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{k},\{\boldsymbol{m}_\alpha\}\left|\psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}}\right.\right\rangle &\approx \left\langle \boldsymbol{k},\{\boldsymbol{m}_\alpha\}\left|\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\right.\right\rangle - \int d^3k'\,\overline{V}\left(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'\right)\\ &\times\sum_{\{\boldsymbol{m}'_\alpha\}}\frac{\left\langle\{\boldsymbol{m}_\alpha\}\left|U^\dagger\left(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'\right)\right|\{\boldsymbol{m}'_\alpha\}\right\rangle\left\langle\boldsymbol{k}',\{\boldsymbol{m}'_\alpha\}\left|\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\right.\right\rangle}{\dfrac{\hbar^2\left(k^2-q^2\right)}{2M}+\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\hbar\Omega_\alpha\left(m_\alpha^j-n_\alpha^j\right)+i\epsilon}\\ &=\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})\,\delta_{\{\boldsymbol{m_\alpha}\},\{\boldsymbol{n_\alpha}\}}-\frac{\left\langle\{\boldsymbol{m}_\alpha\}\left|U^\dagger\left(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}\right)\right|\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\right\rangle\overline{V}\left(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}\right)}{\dfrac{\hbar^2\left(k^2-q^2\right)}{2M}+\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\hbar\Omega_\alpha\left(m_\alpha^j-n_\alpha^j\right)+i\epsilon}\end{aligned}\tag{4.1}$$

A partir de agora ignoraremos o termo homogêneo da função de onda. Esse termo representa o campo incidente não espalhado e, na prática, seria nulo fora da direção de incidência considerando um feixe colimado. Além disso, podemos usar o princípio de Babinet [22] e utilizar um potencial complementar a uma fenda dupla. O princípio de Babinet diz que o campo difratado por um obstáculo se relaciona ao campo difratado por um obstáculo complementar da seguinte forma:

$$\psi_a + \psi_b = \psi_0 \tag{4.2}$$

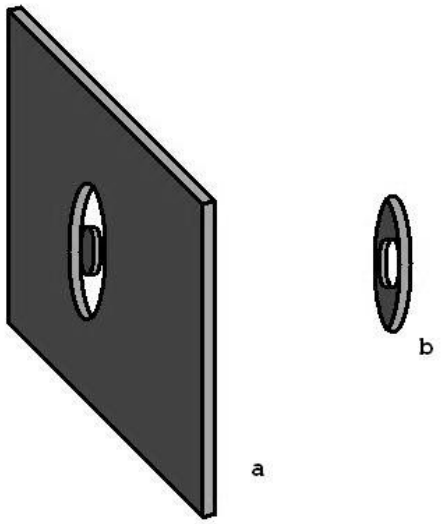

Figura 4.1: Obstáculos complementares

onde ψ_a é o campo difratado pelo obstáculo a, ψ_b é o campo difratado pelo obstáculo b, que é complementar a a, e ψ_0 é o campo incidente. Assim, se adotarmos um potencial complementar a uma fenda dupla, podemos retornar ao potencial de fenda dupla simplesmente ignorando o termo homogêneo.

Escrevendo a função de onda aproximada na representação de posição analogamente ao Apêndice A, obtemos:

$$\left\langle \boldsymbol{r}, \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \middle| \psi_{\boldsymbol{q},\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \right\rangle \approx \frac{\sqrt{2\pi}M}{\hbar^2}\frac{e^{i\widetilde{k}r}}{r}\overline{V}\left(\widetilde{k}\hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{q}\right) \times \left\langle \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \middle| U^\dagger\left(\widetilde{k}\hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{q}\right) \middle| \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \right\rangle \tag{4.3}$$

onde $\widetilde{k} = \sqrt{q^2 - \sum_{\alpha,i} \frac{2M\Omega_\alpha}{\hbar}\left(m_\alpha^i - n_\alpha^i\right)}$.

4.2 Ensemble em Equilíbrio Térmico

A seguir, aproximaremos nosso problema supondo que existe um grande número de modos normais de vibração, que eles estão em equilíbrio térmico e que mediremos apenas as coordenadas do centro de massa após o espalhamento. Com efeito, temos o seguinte operador densidade reduzido:

$$\begin{aligned}\rho_R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = &\sum_{\substack{\{n_\alpha\},\\ \{m_\alpha\}}} \frac{1}{Z}\exp\left(-\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\frac{\hbar\omega_\alpha}{k_BT}n_\alpha^j\right) \\ &\times \frac{2\pi M^2}{\hbar^4}\frac{e^{i\widetilde{k}r}}{r}\frac{e^{-i\widetilde{k}r'}}{r'}\overline{V}\left(\widetilde{k}\hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{q}\right)\overline{V}^*\left(\widetilde{k}\hat{\boldsymbol{r}}' - \boldsymbol{q}\right) \\ &\times \left\langle \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \middle| U^\dagger\left(\widetilde{k}\hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{q}\right) \middle| \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \right\rangle \left\langle \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \middle| U\left(\widetilde{k}\hat{\boldsymbol{r}}' - \boldsymbol{q}\right) \middle| \{\boldsymbol{m}_\alpha\} \right\rangle\end{aligned} \tag{4.4}$$

Essa equação ainda é muito difícil de resolver exatamente, pois $\widetilde{k}$ depende de $\boldsymbol{m}_\alpha$ e $\boldsymbol{n}_\alpha$. Contudo, isso não ocorre para os termos que representam o espalhamento elástico, em que não há troca de energia entre o centro de massa e os graus de liberdade internos. Nesse caso $\boldsymbol{m}_\alpha = \boldsymbol{n}_\alpha$, portanto $\widetilde{k} = q$ e temos:

$$\rho_R^{el}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{2\pi M^2}{\hbar^4}\frac{e^{iqr}}{r}\frac{e^{-iqr'}}{r'}\overline{V}\left(q\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{q}\right)\overline{V}^*\left(q\hat{\boldsymbol{r}}'-\boldsymbol{q}\right) \times \sum_{\{n_\alpha\}}\frac{1}{Z}\exp\left(-\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\frac{\hbar\omega_\alpha}{k_BT}n_\alpha^j\right) \times \left\langle\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\left|U^\dagger\left(q\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{q}\right)\right|\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\right\rangle\left\langle\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\left|U\left(q\hat{\boldsymbol{r}}'-\boldsymbol{q}\right)\right|\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\right\rangle \quad (4.5)$$

Resolver essas somatórias ainda é uma tarefa razoavelmente árdua, porém muito mais simples que o caso inelástico. Essa resolução está feita no Apêndice B e o resultado final é:

$$\rho_R^{el}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \approx \frac{2\pi M^2}{\hbar^4}\frac{e^{iqr}}{r}\frac{e^{-iqr'}}{r'}\overline{V}\left(q\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{q}\right)\overline{V}^*\left(q\hat{\boldsymbol{r}}'-\boldsymbol{q}\right) \times \exp\left[-\frac{1}{2}\left(q\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{q}\right)^2\Gamma^2(T)\right]\exp\left[-\frac{1}{2}\left(q\hat{\boldsymbol{r}}'-\boldsymbol{q}\right)^2\Gamma^2(T)\right] \times \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{j=1}^{3} I_0\left[\frac{\hbar^2K_\alpha^2\left(q\hat{r}^j-q^j\right)\left(q\hat{r}'^j-q^j\right)}{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{2k_BT}\right)}\right] \quad (4.6)$$

onde $\Gamma^2(T) = \sum_{\alpha=1}^{N}\hbar^2K_\alpha^2\coth\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{k_BT}\right)$ e $I_0(x) = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(m!)^2}\left(\frac{x}{2}\right)^{2m}$, que é a função de bessel modificada de ordem 0.

Esse operador densidade é fortemente suprimido a menos que $|q\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{q}|\,\Gamma(T)\lesssim 1$ e $\left|q\hat{\boldsymbol{r}}'-\boldsymbol{q}\right|\Gamma(T)\lesssim 1$. Com efeito, temos que:

$$\frac{\hbar^2K_\alpha^2\left(q\hat{r}^j-q^j\right)\left(q\hat{r}'^j-q^j\right)}{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{2k_BT}\right)} \lesssim \frac{\hbar^2K_\alpha^2}{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{2k_BT}\right)\Gamma^2(T)} \leq \frac{K_\alpha^2}{\sum_{\beta=1}^{N}K_\beta^2} \ll 1 \quad (4.7)$$

onde assumimos, na última desigualdade, que não existem grandes "gaps" no espectro de frequências dos osciladores. Podemos então aproximar a função de Bessel até primeira ordem:

$$\prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{j=1}^{3} I_0\left[\frac{\hbar^2 K_\alpha^2\left(k^j-q^j\right)\left(k'^j-q^j\right)}{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{2k_BT}\right)}\right] \lesssim 1+\frac{\sum_{\alpha=1}^{N} K_\alpha^4}{\left(\sum_{\beta=1}^{N} K_\beta^2\right)^2} \sim 1+\frac{1}{N} \quad (4.8)$$

Portanto, se considerarmos um grande número de modos normais, obtemos o seguinte operador densidade:

$$\begin{aligned}\rho_R^{el}\left(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'\right) \approx\ & \frac{\sqrt{2\pi}M}{\hbar^2}\frac{e^{iqr}}{r}\overline{V}\left(q\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{q}\right)\exp\left[-\frac{1}{2}\left(q\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{q}\right)^2\Gamma^2\left(T\right)\right] \\ & \times\ \frac{\sqrt{2\pi}M}{\hbar^2}\frac{e^{-iqr'}}{r'}\overline{V}^*\left(q\hat{\boldsymbol{r}}'-\boldsymbol{q}\right)\exp\left[-\frac{1}{2}\left(q\hat{\boldsymbol{r}}'-\boldsymbol{q}\right)^2\Gamma^2\left(T\right)\right] \quad (4.9)\end{aligned}$$

É evidente que este operador densidade representa um estado puro, pois ele pode ser escrito como:

$$\rho_R^{el}\left(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'\right) \approx \psi_{\boldsymbol{q}}\left(\boldsymbol{r}\right)\psi_{\boldsymbol{q}}^*\left(\boldsymbol{r}'\right) \quad (4.10)$$

Portanto, não há descoerência. Isso ocorre porque os termos que gerariam descoerência na equação (4.6) foram desprezados por serem da ordem de $1/N$. Se fossem levados em conta, o traço de $\rho_R^{el\,2}$ seria da ordem de $\left[\mathrm{tr}\left(\rho_R^{el}\right)\right]^2\left(1-1/N\right)$ e a descoerência seria muito pequena, apesar de não nula. Concluímos que, no caso elástico, para todos os efeitos práticos, o centro de massa se comporta como uma partícula quântica desprovida de estrutura interna espalhada por um potencial efetivo.

Aparentemente, a análise dos termos elásticos não nos deu informação sobre efeitos de descoerência devido à interação entre centro de massa e graus de liberdade internos, porém, se olharmos com cuidado veremos que esse não é exatamente o caso. A equação (4.4) pode ser escrita como $\rho_R = \rho_R^{el} + \rho_R^{in}$. Os termos inelásticos estão contidos em ρ_R^{in} e sabemos que $\mathrm{tr}(\rho_R) = \mathrm{tr}\left(\rho_R^{el}\right) + \mathrm{tr}(\rho_R^{in}) = 1$ [1], portanto, o traço de ρ_R^{el} nos dá informação sobre a proporção entre espalhamento elástico e inelástico no sistema. Analisemos então o efeito dos graus de liberdade internos no espalhamento elástico do sistema.

4.3 Função de Onda Efetiva

Como vimos, a dinâmica do centro de massa é descrita, no espalhamento elástico, de forma efetiva pela seguinte função de onda:

$$\psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r}) = \frac{\sqrt{2\pi}M}{\hbar^2}\frac{e^{iqr}}{r}\overline{V}(q\hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{q})\exp\left[-\frac{1}{2}(q\hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{q})^2\Gamma^2(T)\right] \tag{4.11}$$

que representa uma única partícula espalhada por um potencial corrigido por um fator análogo ao fator de Debye-Waller [23], onde $\Gamma^2(T)$ funciona como o desvio quadrático médio na posição do potencial. Concluímos que o centro de massa enxerga um potencial efetivo cuja transformada de Fourier é dada por:

$$\overline{V}_{eff}(\mathbf{k}, T) = \exp\left[-\frac{1}{2}k^2\Gamma^2(T)\right]\overline{V}(\boldsymbol{k}) \tag{4.12}$$

[1] Estamos lidando com ondas esféricas monocromáticas, que não são quadraticamente integráveis, portanto o traço do operador densidade irá divergir. Para contornar essa situação definiremos o traço do operador densidade como: $\mathrm{tr}(\rho_R) = \lim_{r_c\to\infty}\frac{A}{r_c}\int_0^{r_c} dr \int d\Omega\, \rho_R\, r^2 = 1$ onde $d\Omega$ é um elemento infinitesimal de ângulo sólido. Como $\rho_R\, r^2$ não depende de r nesse caso, obtemos $\mathrm{tr}(\rho_R) = A\int d\Omega\, \rho_R\, r^2 = 1$.

Efetuando a transformada inversa do potencial efetivo, podemos escrevê-lo em termos do potencial real como:

$$\begin{aligned} V_{eff}\left(\boldsymbol{r},T\right) &= \int \frac{d^3k}{\left(2\pi\right)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \exp\left[-\frac{1}{2}k^2\Gamma^2\left(T\right)\right] \int \frac{d^3r'}{\left(2\pi\right)^{3/2}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'} V\left(\boldsymbol{r}'\right) \\ &= \frac{1}{\left[2\pi\Gamma^2\left(T\right)\right]^{3/2}} \int d^3r' \exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\right)^2}{2\Gamma^2\left(T\right)}\right] V\left(\boldsymbol{r}'\right) \end{aligned} \tag{4.13}$$

que é a convolução de uma gaussiana com o potencial, ou, mais especificamente, a média móvel ponderada do potencial.

Note que o valor de V_{eff} em cada ponto $\boldsymbol{r}$ é dado pela média ponderada dos valores de V com peso dado por uma gaussiana, de largura $\Gamma\left(T\right)$, centrada nesse ponto. Com efeito, o potencial efetivo é uma versão suavizada e alargada do potencial real. Além disso, é trivial mostrar que a integral do potencial em todo o espaço, ou seja, seu volume, é invariante neste processo. Assim, $\Gamma\left(T\right)$ redistribui o volume do potencial e funciona como uma largura térmica.

Para ilustrar esse comportamento, suponhamos um potencial do tipo:

$$\begin{aligned} V\left(\mathbf{r}\right) = V_0 \{1 - \Theta\left[\left(x+3a/2\right)\left(x+a/2\right)\left(3a/2-x\right)\left(a/2-x\right)\right] \\ \times\Theta\left[\left(a/2+y\right)\left(a/2-y\right)\right]\} \Theta\left[\left(a/2+z\right)\left(a/2-z\right)\right] \end{aligned} \tag{4.14}$$

onde $\Theta\left(x\right)$ é 0 para $x < 0$ e 1 para $x \geq 0$. Este potencial representa uma barreira de altura V_0 com duas fendas quadradas centradas em $x = \pm a$ de largura e espessura a. Se calcularmos o potencial efetivo teremos:

$$V_{eff}(\mathbf{r},T) = V_0 \left\{ 1 + \left[\frac{1}{2} Erf\left(\frac{a/2 - x}{\sqrt{2}\Gamma(T)} \right) + \frac{1}{2} Erf\left(\frac{a/2 + x}{\sqrt{2}\Gamma(T)} \right) \right.\right.$$
$$\left. - \frac{1}{2} Erf\left(\frac{3a/2 - x}{\sqrt{2}\Gamma(T)} \right) - \frac{1}{2} Erf\left(\frac{3a/2 + x}{\sqrt{2}\Gamma(T)} \right) \right]$$
$$\times \left. \left[\frac{1}{2} Erf\left(\frac{a/2 - y}{\sqrt{2}\Gamma(T)} \right) + \frac{1}{2} Erf\left(\frac{a/2 + y}{\sqrt{2}\Gamma(T)} \right) \right] \right\}$$
$$\times \left[\frac{1}{2} Erf\left(\frac{a/2 - z}{\sqrt{2}\Gamma(T)} \right) + \frac{1}{2} Erf\left(\frac{a/2 + z}{\sqrt{2}\Gamma(T)} \right) \right] \quad (4.15)$$

Onde $Erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x'^2} dx'$. Para ver o efeito dos graus de liberdade internos analisemos o gráfico da Figura 4.2.

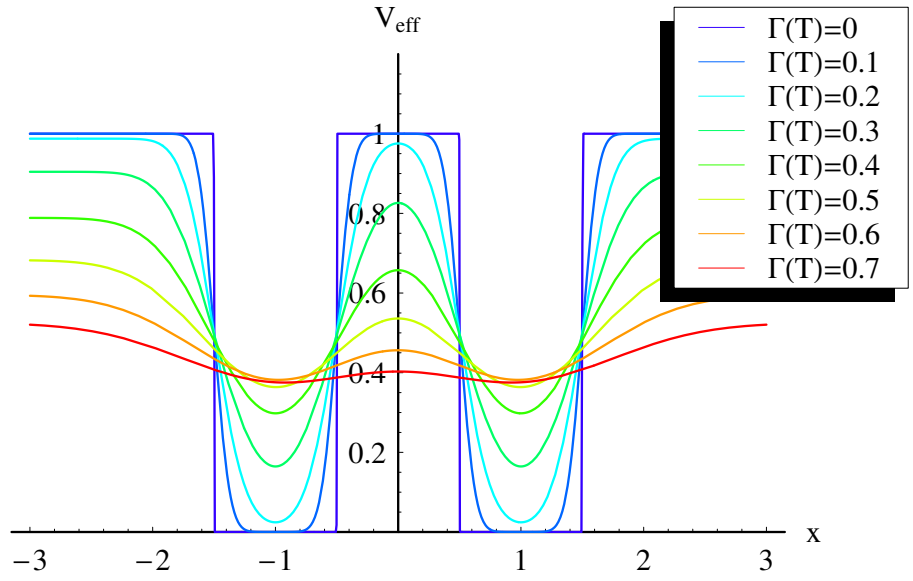

Figura 4.2: Potencial de fenda dupla em $y = z = 0$ com $a = V_0 = 1$ para vários valores de $\Gamma(T)$

Como podemos ver, à medida que $\Gamma(T)$ aumenta, o potencial fica mais suave e começa a alargar ao mesmo tempo em que reduz sua altura, até que

as fendas deixam de existir. Isso ocorre, pois o valor médio do potencial em todo o espaço é nulo. A média móvel então tende a distribuir o volume do potencial por todo o espaço.

O efeito relevante aqui é a existência de um parâmetro que estabelece um limite inferior para a largura efetiva do potencial espalhador. Reduzimos assim o problema à determinação desse parâmetro que carrega toda a informação sobre os graus internos de liberdade acessível a nós. Sua estimativa será o objeto de estudo do próximo capítulo.

Capítulo 5

Largura Térmica

5.1 Somatórias e Integrais

No Capítulo 4 conseguimos aproximar um problema de espalhamento de um sistema de muitos corpos por um problema de espalhamento de um único corpo, que é o centro de massa do sistema. Toda a informação sobre os graus de liberdade internos foi absorvida num parâmetro que identificamos como uma largura térmica para o potencial espalhador. Vamos começar relembrando a equação que define esse parâmetro:

$$\Gamma^2(T) = \sum_{\alpha=1}^{N} \hbar^2 K_\alpha^2 \coth\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{2k_B T}\right) \tag{5.1}$$

lembrando que K_α é definido na equação (3.15) como:

$$K_\alpha = \sum_{\beta=1}^{N} \frac{\mu_\beta \sqrt{\Omega_\alpha}}{\sqrt{2\hbar} M \left(\Omega_\alpha^2 - \omega_\beta^2\right)} \left[\sum_{\gamma=1}^{N} \frac{\mu_\gamma \omega_\gamma^2}{\left(\Omega_\alpha^2 - \omega_\gamma^2\right)^2}\right]^{-1/2} \tag{5.2}$$

Substituindo (5.2) em (5.1) temos:

$$\Gamma^2(T) = \sum_{\alpha=1}^{N} \hbar^2 \frac{\left[\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\mu_\beta \sqrt{\Omega_\alpha}}{\sqrt{2\hbar} M\left(\Omega_\alpha^2 - \omega_\beta^2\right)}\right]^2}{\sum_{\gamma=1}^{N} \frac{\mu_\gamma \omega_\gamma^2}{\left(\Omega_\alpha^2 - \omega_\gamma^2\right)^2}} \coth\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{2k_B T}\right) \tag{5.3}$$

Muitas vezes a informação que temos dos objetos não nos permite conhecer os parâmetros μ_α e ω_α presentes nessa equação. Sem esses parâmetros também não podemos saber os valores de Ω_α. Podemos contornar esse problema explorando a relação que define Ω_α, dada por (ver equação (3.12)):

$$\sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\mu_\alpha \omega_\alpha^2}{M\left(\Omega_\beta^2 - \omega_\alpha^2\right)} = 1 \tag{5.4}$$

Analisemos a seguinte expressão:

$$G(T) = \frac{2\hbar^2}{M} \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \frac{\left[\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\mu_\beta z}{\sqrt{2\hbar} M\left(z^2 - \omega_\beta^2\right)}\right]^2}{1 - \sum_{\gamma=1}^{N} \frac{\mu_\gamma \omega_\gamma^2}{M\left(z^2 - \omega_\gamma^2\right)}} \coth\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right) \tag{5.5}$$

onde o caminho de integração engloba o eixo real positivo como na Figura 5.1.

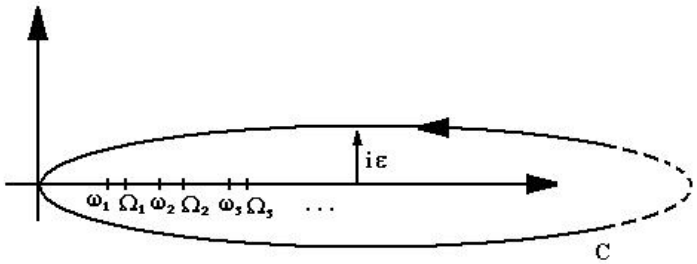

Figura 5.1: Caminho de integração

Esse caminho engloba $2N$ pólos de primeira ordem do integrando, quando $z = \omega_\alpha$ ou $z = \Omega_\alpha$, portanto podemos usar o teorema de resíduos para escrever:

$$G(T) = \sum_{\alpha=1}^{N} \hbar^2 \frac{\left[\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\mu_\beta \sqrt{\Omega_\alpha}}{\sqrt{2\hbar} M \left(\Omega_\alpha^2 - \omega_\beta^2\right)}\right]^2}{\sum_{\gamma=1}^{N} \frac{\mu_\gamma \omega_\gamma^2}{\left(\Omega_\alpha^2 - \omega_\gamma^2\right)^2}} \coth\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{2k_B T}\right) - \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\hbar\mu_\alpha}{2M^2\omega_\alpha} \coth\left(\frac{\hbar\omega_\alpha}{2k_B T}\right) \tag{5.6}$$

O primeiro termo do lado direito é exatamente $\Gamma^2(T)$, então podemos escrever:

$$\begin{aligned} \Gamma^2(T) &= G(T) + \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\hbar\mu_\alpha}{2M^2\omega_\alpha} \coth\left(\frac{\hbar\omega_\alpha}{2k_B T}\right) \\ &= \frac{2\hbar^2}{M} \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \frac{\left[\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\mu_\beta z}{\sqrt{2\hbar} M \left(z^2 - \omega_\beta^2\right)}\right]^2}{1 - \sum_{\gamma=1}^{N} \frac{\mu_\gamma \omega_\gamma^2}{M\left(z^2 - \omega_\gamma^2\right)}} \coth\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right) \\ &\quad + \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\hbar\mu_\alpha}{2M^2\omega_\alpha} \coth\left(\frac{\hbar\omega_\alpha}{2k_B T}\right) \end{aligned} \tag{5.7}$$

Com efeito, eliminamos a dependência em Ω_α e substituímos uma somatória por uma integral. Agora lembramos a definição da densidade espectral dada na equação (3.2):

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2}\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{C_\alpha^2}{m_\alpha\omega_\alpha}\delta(\omega-\omega_\alpha) = \frac{\pi}{2}\sum_{\alpha=1}^{N}\mu_\alpha\omega_\alpha^3\delta(\omega-\omega_\alpha) \tag{5.8}$$

onde a segunda igualdade segue da definição de μ_α, e a usamos para transformar as somatórias restantes em integrais. Obtemos assim:

$$\Gamma^2(T) = \frac{\hbar}{M}\frac{1}{2\pi i}\oint_C dz \frac{z^2\left[\frac{2}{\pi}\int d\omega \frac{J(\omega)}{M\omega^3(z^2-\omega^2)}\right]^2}{1-\frac{2}{\pi}\int d\omega\frac{J(\omega)}{M\omega(z^2-\omega^2)}}\coth\left(\frac{\hbar z}{2k_BT}\right) + \int d\omega\frac{\hbar J(\omega)}{\pi M^2\omega^4}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right) \tag{5.9}$$

Com isso, toda a informação sobre os graus de liberdade internos está contida em $J(\omega)$, e nosso trabalho passa a ser descobrir uma aproximação contínua para o mesmo. Desde já podemos perceber que esta aproximação deve ser altamente não linear, pois o último termo do lado direito da equação (5.9) diverge se $J(\omega)$ crescer mais lentamente que ω^5. Esse comportamento reflete a presença de um limite inferior para as frequências do banho e garante que qualquer função não singular de K_α será finita desde que $J(\omega)$ não seja singular e tenha um caráter suficientemente não linear para baixas frequências.

5.2 Aproximação de Fônons

A aproximação mais simples que podemos pensar neste caso é simplesmente proporcional a ω^5. Essa é justamente a densidade espectral de fônons acústicos em três dimensões, como mostraremos a seguir, portanto consideraremos essa distribuição daqui em diante.

Utilizando condições periódicas de contorno, quantizamos os momentos e utilizamos a aproximação de fônons acústicos para fazer:

$$J(\omega) \approx \frac{\pi}{2} \sum_{\substack{n_x,n_y,\\ n_z=1}}^{\sqrt[3]{N}} \mu \left(\frac{\pi c}{L}\sqrt{n_x^2+n_y^2+n_z^2}\right)^3 \delta\left(\omega - \frac{\pi c}{L}\sqrt{n_x^2+n_y^2+n_z^2}\right) \quad (5.10)$$

onde μ é a massa média das partículas do banho, c é a velocidade dos fônons e L é o diâmetro aproximado do objeto. Aproximamos as somatórias por integrais, assumindo que os termos somados variam quase continuamente, e aproximamos o volume integrado por um oitavo de esfera. Definimos aqui o momento dos fônons como $\boldsymbol{k} = \pi\boldsymbol{n}/L$, onde $\boldsymbol{n}$ é um vetor de componentes (n_x, n_y, n_z). Temos então:

$$J(\omega) \approx \frac{3\pi N\mu}{2\omega_c^3} \int_0^{\omega_c/c} cdk\,(ck)^5\,\delta(\omega - ck), \quad \omega_c \equiv \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}c}{a} \quad (5.11)$$

onde $a = L/\sqrt[3]{N}$ é a separação média entre as partículas que compõem o objeto. Resolvendo a integral obtemos:

$$J(\omega) \approx \frac{3\pi N\mu}{2\omega_c^3}\omega^5\theta(\omega_c - \omega) \quad (5.12)$$

Substituindo em (5.9) obtemos após alguma álgebra:

$$\Gamma^2(T) = \frac{3\hbar N\mu}{2M^2\omega_c^3}\frac{1}{2\pi i}\oint_C dz \frac{2z^2\left[\int_0^{\omega_c} d\omega \frac{\omega^2}{(z^2-\omega^2)}\right]^2}{\frac{\omega_c^3 M}{3N\mu} - \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{\omega^4}{(z^2-\omega^2)}} \coth\left(\frac{\hbar z}{2k_BT}\right) + \frac{3\hbar N\mu}{2M^2\omega_c^3}\int_0^{\omega_c} d\omega\,\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right) \quad (5.13)$$

Vamos nos concentrar um pouco na integral de caminho. Façamos o caminho de integração tender ao eixo real positivo, ou seja, $\epsilon \to 0$ na Figura 5.1. O caminho acima do eixo real é simplesmente o complexo conjugado do caminho abaixo do mesmo, então obtemos:

$$\begin{aligned} I &= \oint_C dz \frac{2z^2 \left[\int_0^{\omega_c} d\omega \frac{\omega^2}{(z^2-\omega^2)}\right]^2}{\frac{\omega_c^3 M}{3N\mu} - \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{\omega^4}{(z^2-\omega^2)}} \coth\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right) \\ &= 4i \int_0^{\infty} dz Im \left\{ \lim_{\epsilon\to 0} \frac{(z-i\epsilon)^2 \left[\int_0^{\omega_c} d\omega \frac{\omega^2}{(z-i\epsilon)^2-\omega^2}\right]^2}{\frac{\omega_c^3 M}{3N\mu} - \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{\omega^4}{(z-i\epsilon)^2-\omega^2}} \coth\left[\frac{\hbar\,(z-i\epsilon)}{2k_B T}\right] \right\} \end{aligned} \tag{5.14}$$

Resolvendo as integrais em ω obtemos:

$$\lim_{\epsilon\to 0} \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{\omega^2}{(z-i\epsilon)^2 - \omega^2} = \frac{i\pi}{2} z\theta\,(\omega_c - z) - \omega_c - \frac{z}{2} \ln\left|\frac{\omega_c - z}{\omega_c + z}\right| \tag{5.15}$$

$$\lim_{\epsilon\to 0} \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{\omega^4}{(z-i\epsilon)^2 - \omega^2} = \frac{i\pi}{2} z^3\theta\,(\omega_c - z) - \frac{\omega_c^3}{3} - \omega_c z^2 - \frac{z^3}{2} \ln\left|\frac{\omega_c - z}{\omega_c + z}\right| \tag{5.16}$$

Substituindo temos:

$$I = 4i \int_0^{\omega_c} dz Im \left\{ \frac{\left[\frac{i\pi}{2} z - \omega_c - \frac{z}{2} \ln\left(\frac{\omega_c - z}{\omega_c + z}\right)\right]^2 \coth\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right)}{\frac{\omega_c^3 M}{3N\mu z^2} - \frac{i\pi}{2} z + \frac{\omega_c^3}{3z^2} + \omega_c + \frac{z}{2} \ln\left(\frac{\omega_c - z}{\omega_c + z}\right)} \right\} \tag{5.17}$$

onde o limite de integração passa a ser ω_c pois as equações (5.15) e (5.16) são reais para $z > \omega_c$. Resolvendo a parte imaginária do integrando temos, após alguma álgebra:

$$\frac{I}{2\pi i} = \int_0^{\omega_c} dz\ z \coth\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right) \times \left\{ \frac{\left(\frac{\omega_c^3 M}{3N\mu z^3} + \frac{\omega_c^3}{3z^3}\right)^2}{\left[\frac{\omega_c^3 M}{3N\mu z^3} + \frac{\omega_c^3}{3z^3} + \frac{\omega_c}{z} + \frac{1}{2}\ln\left(\frac{\omega_c - z}{\omega_c + z}\right)\right]^2 + \frac{\pi^2}{4}} - 1 \right\} \tag{5.18}$$

Substituindo de volta em $\Gamma^2(T)$ e trocando a variável de integração do segundo termo obtemos:

$$\Gamma^2(T) = \frac{3\hbar N\mu}{2M^2\omega_c^3} \int_0^{\omega_c} dz\ z \coth\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right) \times \frac{\left(\frac{\omega_c^3 M}{3N\mu z^3} + \frac{\omega_c^3}{3z^3}\right)^2}{\left[\frac{\omega_c^3 M}{3N\mu z^3} + \frac{\omega_c^3}{3z^3} + \frac{\omega_c}{z} + \frac{1}{2}\ln\left(\frac{\omega_c - z}{\omega_c + z}\right)\right]^2 + \frac{\pi^2}{4}} \tag{5.19}$$

5.3 Estimativas

Exceto quando $\frac{\omega_c - z}{\omega_c + z} \ll 1$, o termo que multiplica $z \coth\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right)$ no integrando é aproximadamente uma razão de polinômios de mesma ordem, portanto, não varia rapidamente com z. Para termos uma idéia do resultado desta integral, vamos aproximar esse termo por seu valor quando $z = \omega_c/2$. Obtemos assim:

$$\Gamma^2(T) \approx A \frac{3\hbar N\mu}{2M^2\omega_c^3} \int_0^{\omega_c} dz\ z \coth\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right) \tag{5.20}$$

onde $A = \dfrac{\left(\frac{8M}{3N\mu} + \frac{8}{3}\right)^2}{\left[\frac{8M}{3N\mu} + \frac{14}{3} - \frac{1}{2}\ln(3)\right]^2 + \frac{\pi^2}{4}}$ é um número da ordem de 1.

Resolvendo essa integral nos limites de baixas e altas temperaturas obtemos:

$$\Gamma^2(T) \approx \begin{cases} A\dfrac{3\hbar N\mu}{4M^2\omega_c}\left[1+\dfrac{2\pi^2}{3}\left(\dfrac{k_BT}{\hbar\omega_c}\right)^2\right], & k_BT \ll \hbar\omega_c \\ A\dfrac{3\hbar N\mu}{M^2\omega_c}\dfrac{k_BT}{\hbar\omega_c}, & k_BT \gg \hbar\omega_c \end{cases} \tag{5.21}$$

Temos assim um limite inferior para o parâmetro $\Gamma(T)$, dado por seu valor a temperatura nula. À medida que a energia térmica aumenta, mais graus de liberdade internos vão sendo excitados e a largura térmica cresce com o quadrado da temperatura. Quando a energia térmica é alta o suficiente para excitar a maioria dos graus de liberdade internos $\Gamma^2(T)$ começa a crescer mais lentamente com a temperatura até atingir um comportamento linear.

O efeito da largura térmica será importante se ele for maior ou da ordem do comprimento de onda do centro de massa do objeto dado por $\lambda = \dfrac{2\pi\hbar}{\sqrt{2ME}}$, onde E é a energia cinética do objeto. A razão entre eles é dada por:

$$\frac{\Gamma^2(T)}{\lambda^2} \approx \begin{cases} \dfrac{6A}{(4\pi)^2}\dfrac{N\mu}{M}\dfrac{E}{k_BT_D}\left[1+\dfrac{2\pi^2}{3}\left(\dfrac{T}{T_D}\right)^2\right], & T \ll T_D \\ \dfrac{6A}{(2\pi)^2}\dfrac{N\mu}{M}\dfrac{E}{k_BT_D}\dfrac{T}{T_D}, & T \gg T_D \end{cases} \tag{5.22}$$

onde $T_D = \hbar\omega_c/k_B$ é a temperatura de Debye do objeto. Vemos que os graus de liberdade internos desempenharão um papel importante apenas para energias altas comparadas com essa temperatura.

Pela definição da frequência de corte ω_c, sabemos que $T_D \propto c/a$, o que implica que a temperatura de Debye será maior para objetos rígidos e com-

pactos. Como era de se esperar, é necessário alcançar energias mais altas para revelar a estrutura interna de tais objetos. Além disso, quanto mais massa for atribuída às partículas do banho, que não sentem o potencial, maior será a razão entre a largura térmica e o comprimento de onda. Isso simplesmente reflete o grau de contribuição dos osciladores em relação ao potencial espalhador para a dinâmica do centro de massa. A razão $N\mu/M$ é um parâmetro livre deste modelo e representa o fato de termos assumido que apenas parte do objeto é sensível ao potencial espalhador. Podemos escrevê-la em termos de m e M da seguinte forma:

$$M - m = \sum_{\alpha=1}^{N} \mu_\alpha = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^3} = N\mu \Rightarrow \frac{N\mu}{M} = 1 - \frac{m}{M} \qquad (5.23)$$

Para fins ilustrativos, calculemos valores numéricos para $\Gamma(T)$ usando a equação (5.19). Para uma molécula de C_{60} temos $M \approx 1.2\times10^{-21}$g e $L \approx 7$ Å. Estimamos $c \sim 8$km/s e supusemos uma temperatura interna de 900K. Obtemos assim $\Gamma(T) \approx 0.5$pm que é menor que o comprimento de onda das moléculas no experimento de Arndt et al. [24], que era de aproximadamente 2.5pm. Isso significa que neste nível, os graus de liberdade internos influem pouco na dinâmica do centro de massa. Porém, se pensarmos num objeto macroscópico, digamos um grão de sal grosso de 1mm de diâmetro a uma velocidade de 1m/s, temos um comprimento de onda da ordem de 10^{-26}cm e $\Gamma(T)$ é da ordem de 10^{-20}cm. Temos uma diferença de 6 ordens de grandeza aqui. Isso ocorre porque, devido às massas relativamente elevadas dos objetos macroscópicos, mesmo pequenas velocidades correspondem a energias cinéticas muito grandes comparadas com temperaturas de Debye típicas.

Por outro lado, os comprimentos de onda de objetos macroscópicos se encontram em escalas muitas ordens de grandeza menores que o tamanho do próprio objeto. Portanto, a comparação da largura térmica com o comprimento de onda perde o sentido, já que seria difícil imaginar algum tipo

de potencial espalhador de largura menor que a escala nuclear. Além disso, a geometria do objeto desempenharia um papel importante para potenciais mais estreitos que o diâmetro do objeto e a abordagem focada no centro de massa adotada nesta dissertação deixaria de ser razoável. Percebemos que precisamos considerar a relação entre a largura térmica e as dimensões do potencial espalhador. Para tanto, analisaremos um exemplo de potencial espalhador no próximo capítulo.

Capítulo 6

Um exemplo de interferência

6.1 Fendas Gaussianas

Neste capítulo, utilizaremos o formalismo desenvolvido até aqui para simular um experimento de fenda dupla. Por simplicidade, vamos supor um potencial do tipo:

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{V_0}{(2\pi\sigma^2)^{3/2}} \left\{ \exp\left[-\frac{(\boldsymbol{r} - a\hat{\boldsymbol{x}})^2}{2\sigma^2} \right] + \exp\left[-\frac{(\boldsymbol{r} + a\hat{\boldsymbol{x}})^2}{2\sigma^2} \right] \right\} \quad (6.1)$$

Este potencial representa duas gaussianas, de largura σ, centradas em $x = \pm a$. Ele é complementar à duas fendas gaussianas e, como já foi discutido anteriormente, as funções de onda resultantes do espalhamento por potenciais complementares diferem apenas pelo termo homogêneo que, por sua vez, pode ser ignorado fora da direção de incidência. O potencial efetivo é dado então por:

$$V_{eff}\left(\mathbf{r},T\right)=\frac{V_0}{\left[2\pi\left(\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2\right)\right]^{3/2}}\times\left\{\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{r}-a\hat{\boldsymbol{x}}\right)^2}{2\left(\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2\right)}\right]+\exp\left[-\frac{\left(\boldsymbol{r}+a\hat{\boldsymbol{x}}\right)^2}{2\left(\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2\right)}\right]\right\} \quad (6.2)$$

Fica claro que o efeito dos graus de liberdade internos é simplesmente aumentar a largura das gaussianas diminuindo suas alturas correspondentemente.

6.2 Função de Onda

Como o potencial total é a soma de dois potenciais e vamos trabalhar na aproximação de Born, a função de onda resultante será a soma das funções de onda espalhadas por cada um dos potenciais. Os potenciais têm a mesma forma e diferem apenas quanto a sua posição, por isso podemos escrever a função de onda de uma partícula de massa M e momento $\hbar\boldsymbol{q}$ do seguinte modo:

$$\psi_{\boldsymbol{q}}\left(\boldsymbol{r}\right)\approx\frac{e^{iq\left|\boldsymbol{r}-a\hat{\boldsymbol{x}}\right|}}{\left|\boldsymbol{r}-a\hat{\boldsymbol{x}}\right|}f\left(\boldsymbol{r}-a\hat{\boldsymbol{x}}\right)+\frac{e^{iq\left|\boldsymbol{r}+a\hat{\boldsymbol{x}}\right|}}{\left|\boldsymbol{r}+a\hat{\boldsymbol{x}}\right|}f\left(\boldsymbol{r}+a\hat{\boldsymbol{x}}\right) \quad (6.3)$$

onde $f\left(\boldsymbol{r}\right)$ é a amplitude de espalhamento e é dada por:

$$\begin{aligned}f\left(\boldsymbol{r}\right)&=\frac{\sqrt{2\pi}M}{\hbar^2}\overline{V}\left(q\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{q}\right)\exp\left[-\frac{1}{2}\left(q\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{q}\right)\Gamma^2\left(T\right)\right]\\&=\frac{MV_0}{2\pi\hbar^2}\exp\left[-q^2\left(\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2\right)\left(1-\frac{z}{r}\right)\right]\\&=\frac{MV_0}{2\pi\hbar^2}\exp\left[-2q^2\left(\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2\right)\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right]\end{aligned} \quad (6.4)$$

sendo que na segunda igualdade escolhemos $\boldsymbol{q}$ na direção $\hat{z}$. A aproximação é válida para $r \gg \sqrt{\Gamma^2(T)+\sigma^2}$ e $\frac{\hbar^2 q^2}{2M} \gg \frac{V_0}{[2\pi(\Gamma^2(T)+\sigma^2)]^{3/2}}$.

Essa função de onda representa duas ondas esféricas centradas em $x = \pm a$ com uma envoltória dada por $f(\boldsymbol{r})$ que as suprime fora da direção de incidência. A probabilidade de encontrarmos o centro de massa na posição $\boldsymbol{r}$ é dada por:

$$\left|\psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r})\right|^2 \approx \frac{f^2(\boldsymbol{r}-a\hat{\boldsymbol{x}})}{\left|\boldsymbol{r}-a\hat{\boldsymbol{x}}\right|^2} + \frac{f^2(\boldsymbol{r}+a\hat{\boldsymbol{x}})}{\left|\boldsymbol{r}+a\hat{\boldsymbol{x}}\right|^2} + \frac{2f(\boldsymbol{r}-a\hat{\boldsymbol{x}})\,f(\boldsymbol{r}+a\hat{\boldsymbol{x}})}{\left|\boldsymbol{r}-a\hat{\boldsymbol{x}}\right|\left|\boldsymbol{r}+a\hat{\boldsymbol{x}}\right|}\cos\left(q\left|\boldsymbol{r}+a\hat{\boldsymbol{x}}\right| - q\left|\boldsymbol{r}-a\hat{\boldsymbol{x}}\right|\right) \quad (6.5)$$

Os dois primeiros termos representam a intensidade espalhada por cada fenda separadamente e o último termo obedece a um padrão periódico e é o chamado termo de interferência. Ele será não nulo apenas na região em que as amplitudes de espalhamento se sobrepõem.

Note que, se $q\sqrt{\Gamma^2(T)+\sigma^2} \ll 1$, a supressão das amplitudes de espalhamento é fraca mesmo para grandes ângulos. Logo, como havíamos antecipado, o efeito dos graus de liberdade internos pode aparecer apenas quando a largura térmica do potencial for maior ou da ordem do comprimento de onda do objeto. Nessas condições, as ondas esféricas são fortemente atenuadas para ângulos de deflexão maiores que $\theta_{max} = 2\arcsin\left(\frac{\sqrt{2}}{2q\sqrt{\Gamma^2(T)+\sigma^2}}\right)$.

A Figura 6.1 mostra a redução do ângulo de deflexão máximo com o aumento de $\Gamma(T)$. Vê-se claramente como o padrão de interferência vai sendo destruído até que apenas o máximo central sobrevive. Entretanto, esse é um efeito essencialmente geométrico e não é relacionado com descoerência. Note, por exemplo, que não há atenuação do termo de interferência na região de sobreposição das ondas, mesmo no caso extremo em que apenas uma franja sobrevive. O único efeito aqui é a redução do ângulo de deflexão máximo das partículas, que culmina no estreitamento da região de sobreposição das ondas espalhadas.

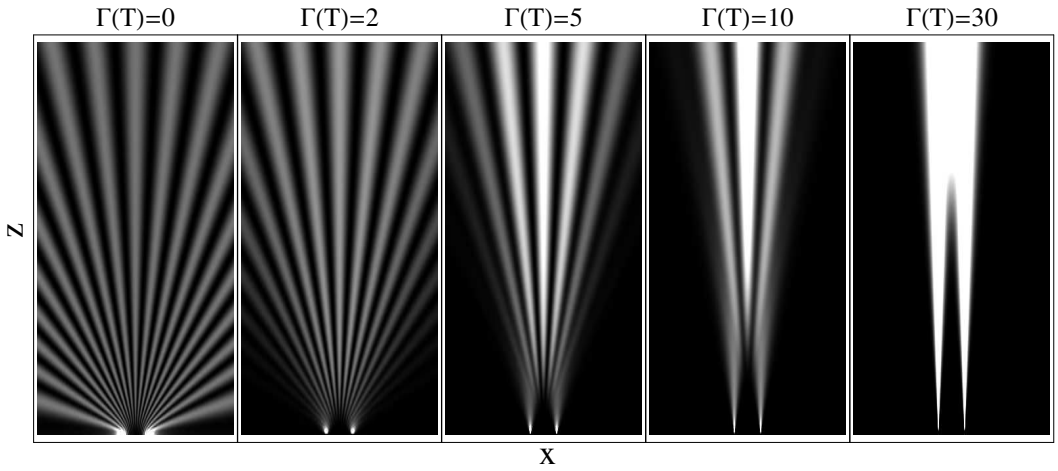

Figura 6.1: $r^2 \left|\psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r})\right|^2$ no plano $y = 0$, com $q = 1$, $a = 30$ e $\sigma = 0.1$, para diversos valores de $\Gamma(T)$.

Outra evidência do caráter geométrico desse efeito é que a equação de θ_{max} é simétrica em relação a $\Gamma(T)$ e σ. O mesmo fenômeno seria observado se houvéssemos simplesmente aumentado a largura do potencial. Para todos os efeitos, a única grandeza relevante é a largura efetiva total, dada por $\sqrt{\Gamma^2(T) + \sigma^2}$, e se $\Gamma(T) \ll \sigma$ haverá uma variação desprezível desse termo e o objeto se comportará como se não possuísse estrutura interna.

Esses dois fatores impõem fortes limitações sobre a influência dos graus de liberdade internos na dinâmica do centro de massa. Por um lado, para objetos microscópicos, a escala de energia dada pela temperatura de Debye é bastante alta e os comprimentos de onda costumam ser grandes em comparação com a largura térmica do objeto. Em compensação, a escala de comprimentos em que fenômenos quânticos de objetos macroscópicos ocorrem é extremamente pequena se comparada ao tamanho típico desses objetos e a largura térmica irá contribuir muito pouco para a largura efetiva do potencial.

6.3 Quão Inelástico?

Agora vamos analisar a situação num anteparo posicionado no plano $z = D$, onde $D \gg a\cot\theta_{max}$, ou seja, onde há uma grande área de sobreposição das ondas esféricas. O módulo quadrado da função de onda tem aproximadamente a seguinte forma:

$$\left|\psi_{\boldsymbol{q}}\left(\boldsymbol{r}\right)\right|^2 \approx \frac{4f^2\left(\boldsymbol{r}\right)}{r^2}\cos^2\left(\frac{qax}{r}\right) \tag{6.6}$$

Aqui fica explícito o resultado bem conhecido do experimento de fenda dupla em que temos um padrão periódico de intensidade modulado pelo termo de difração de uma fenda simples. Essa função de onda deve ser comparada ao que teríamos obtido no caso de uma partícula sem estrutura interna. A probabilidade de ocorrer espalhamento elástico é dada então por:

$$P_{el} = \frac{\int d\Omega \exp\left[-4q^2\left(\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2\right)\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right]\cos^2\left(qa\sin\theta\cos\varphi\right)}{\int d\Omega \exp\left[-4q^2\sigma^2\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right]\cos^2\left(qa\sin\theta\cos\varphi\right)} \tag{6.7}$$

Essa expressão será significativamente diferente de 1 somente quando $\Gamma\left(T\right) \gtrsim \sigma$ e $\Gamma\left(T\right) \gtrsim \lambda$, que são, obviamente, as mesmas condições para que os graus de liberdade internos desempenhem um papel não desprezível no espalhamento elástico. Suponha, por exemplo, que $a \gg \lambda$ e $a \gg \sqrt{\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2}$. Nesse caso, as exponenciais dos integrandos variam lentamente em relação ao período do cosseno e podemos substituir este último por seu valor médio. Com efeito, temos:

$$\begin{aligned} P_{el} &= \frac{\int d\Omega \exp\left[-4q^2\left(\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2\right)\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right]}{\int d\Omega \exp\left[-4q^2\sigma^2\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right]} \\ &= \frac{\sigma^2}{\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2}\frac{1-\exp\left[-4q^2\left(\Gamma^2\left(T\right)+\sigma^2\right)\right]}{1-\exp\left[-4q^2\sigma^2\right]} \end{aligned} \tag{6.8}$$

Se $\Gamma(T) \ll \sigma$, podemos mostrar que $P_{in} = 1 - P_{el} \lesssim \frac{\Gamma^2(T)}{\sigma^2}$, enquanto que, se $\Gamma(T) \ll \lambda$, então $P_{in} \lesssim 8\pi^2 \frac{\Gamma^2(T)}{\lambda^2}$. Fica claro que os processos inelásticos serão relevantes apenas quando os efeitos dos graus de liberdade internos sobre o espalhamento elástico também o forem.

Capítulo 7

Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação, analisamos o efeito dos graus de liberdade internos de um objeto na dinâmica do seu centro de massa visando a determinar sua relevância para processos de descoerência em experimentos de fenda dupla. Mostramos que esses graus de liberdade se acoplam ao centro de massa na presença de um potencial que quebra a invariância translacional do sistema, e assim fazendo, funcionam como um ambiente que deve ser evoluído em conjunto com o centro de massa do objeto.

Analisamos esse sistema no caso de um potencial de alcance finito onde podemos limitar o acoplamento à região do potencial e assim obter um estado assintótico separável. Uma análise geral nos deu indícios dos efeitos de descoerência para processos inelásticos, porém esses efeitos dependem da intensidade dos processos.

Utilizando um modelo fenomenológico fomos capazes de calcular explicitamente apenas os processos elásticos, que apesar de também contribuírem para a descoerência em altas temperaturas, o fazem de maneira insignificante, especialmente para objetos macroscópicos, e portanto não são responsáveis por seu comportamento clássico. Entretanto, todos os processos que ocorrem devem ser elásticos ou inelásticos, portanto, a probabilidade de ocorrência de processos elásticos deve ser complementar à probabilidade de ocorrência de

processos inelásticos. Com efeito, os processos elásticos nos dão informação sobre a intensidade dos processos inelásticos.

Assumindo uma condição inicial de equilíbrio térmico interno, os cálculos de espalhamento elástico revelam um termo análogo ao fator de Debye-Waller que reduz a intensidade das franjas de interferência exponencialmente para grandes ângulos de deflexão. Esse fator funciona como um aumento efetivo na largura do potencial devido à vibração térmica do objeto. Seus efeitos são relevantes quando a largura do potencial é aumentada significativamente e a largura efetiva total é maior ou da ordem do comprimento de onda do objeto. Como está diretamente ligado à intensidade total espalhada elasticamente, é esse fator que nos dá informação sobre a probabilidade de ocorrência de processos inelásticos.

Supondo que os graus de liberdade internos possam ser bem descritos por fônons acústicos, concluímos que esses efeitos serão relevantes para energias altas em comparação com as frequências características do objeto, que no caso de fônons acústicos estão relacionadas com a temperatura de Debye. As frequências mais baixas contribuem muito pouco neste caso devido ao caráter altamente super-ôhmico da densidade espectral. A temperatura de Debye é proporcional à razão entre a velocidade dos fônons e o parâmetro de rede, portanto, objetos mais rígidos e compactos tendem a preservar sua coerência, pois seus graus de liberdade internos são mais difíceis de excitar.

Estimativas para os valores típicos da largura térmica adicionada ao potencial nos levaram, por fim, a uma limitação puramente geométrica para esses efeitos. As dimensões ridiculamente pequenas dos comprimentos de onda de objetos macroscópicos não são comparáveis a nenhum potencial fisicamente plausível. Esse fator faz com que a largura térmica tenha efeito desprezível sobre o potencial e assim não há processos inelásticos ou descoerência relevante devido aos graus de liberdade internos para objetos macroscópicos.

Um problema na análise feita aqui é a escolha da aproximação de Born para tratar o espalhamento. Essa aproximação é válida apenas para poten-

ciais fracos em comparação com a energia do objeto e esta condição limita a intensidade de processos inelásticos. Quando jogamos uma bola de futebol na parede, é óbvio que seus graus de liberdade internos são excitados e esse tipo de fenômeno não está contemplado na aproximação de Born. Apesar de o efeito principal de experimentos de fenda dupla ocorrer devido à diferença de caminho percorrido pela partícula e desse fenômeno depender pouco da forma exata do potencial considerado, quando processos inelásticos são levados em conta, a intensidade do potencial é relevante.

A análise de espalhamentos inelásticos, tanto dentro da aproximação de Born, quanto em aproximações de baixa energia, é uma possibilidade clara para futuros estudos. Outra questão que pode se mostrar interessante é a investigação aprofundada da analogia entre a largura térmica obtida aqui e o fator de Debye-Waller, já que experimentos de difração de raios-X poderiam nos dar informação sobre o espalhamento de moléculas complexas caso esses fenômenos tenham a mesma origem.

Apêndice A

Função de Onda na Representação de Posição

Neste apêndice vamos calcular a função de onda da equação (2.15) na representação de posição. Inicialmente temos a seguinte função de onda na representação de momento:

$$\left\langle \boldsymbol{k}, \{m_\alpha\} \left| \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \right\rangle = \left\langle \boldsymbol{k}, \{m_\alpha\} \left| \boldsymbol{q}, \{n_\alpha\} \right\rangle \right. \right. \\ - \frac{\left\langle \boldsymbol{k}, \{m_\alpha\} \left| V\left(\boldsymbol{R}, \left\{a_\alpha, a_\alpha^\dagger\right\}\right) \right| \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \right\rangle}{\dfrac{\hbar^2\left(k^2 - q^2\right)}{2M} + \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{3N-6} \hbar\omega_\alpha \left(m_\alpha - n_\alpha\right) + i\epsilon} \tag{A.1}$$

Sua transformada de Fourier é dada por:

$$\left\langle \boldsymbol{r}, \{m_\alpha\} \left| \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \right\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \delta_{\{n_\alpha\},\{m_\alpha\}} \right. \\ - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \frac{\left\langle \boldsymbol{k}, \{m_\alpha\} \left| V\left(\boldsymbol{R}, \left\{a_\alpha, a_\alpha^\dagger\right\}\right) \right| \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \right\rangle}{\dfrac{\hbar^2\left(k^2 - q^2\right)}{2M} + \displaystyle\sum_{\alpha=1}^{3N-6} \hbar\omega_\alpha \left(m_\alpha - n_\alpha\right) + i\epsilon} \tag{A.2}$$

Inserindo a identidade $\int d^3k' \int d^3r' \left|\boldsymbol{r}'\right\rangle \left\langle \boldsymbol{r}'|\boldsymbol{k}'\right\rangle \left\langle \boldsymbol{k}'\right|$ obtemos:

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{r},\{m_\alpha\}\left|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right.\right\rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\delta_{\{n_\alpha\},\{m_\alpha\}} \\ &- \int d^3k' \int d^3r' \left\langle \boldsymbol{r}'\middle|\boldsymbol{k}'\right\rangle \left\langle \boldsymbol{k}',\{m_\alpha\}\left|V\left(\boldsymbol{R},\left\{a_\alpha,a_\alpha^\dagger\right\}\right)\right|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right\rangle \\ &\times \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}}{\dfrac{\hbar^2\left(k^2-q^2\right)}{2M}+\sum_{\alpha=1}^{3N-6}\hbar\omega_\alpha\left(m_\alpha-n_\alpha\right)+i\epsilon}\end{aligned} \tag{A.3}$$

Resolvendo a integral em $\boldsymbol{k}$ obtemos:

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{r},\{m_\alpha\}\left|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right.\right\rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\delta_{\{n_\alpha\},\{m_\alpha\}} \\ &-\frac{M}{2\pi\hbar^2}\int d^3k' \int d^3r' \frac{e^{i\tilde{k}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\left\langle \boldsymbol{r}'\middle|\boldsymbol{k}'\right\rangle \\ &\times\left\langle \boldsymbol{k}',\{m_\alpha\}\left|V\left(\boldsymbol{R},\left\{a_\alpha,a_\alpha^\dagger\right\}\right)\right|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right\rangle\end{aligned} \tag{A.4}$$

onde $\tilde{k}=\sqrt{q^2-\sum_{\alpha=1}^{3N-6}\frac{2M\omega_\alpha}{\hbar}\left(m_\alpha-n_\alpha\right)}$. Para $\boldsymbol{r}$ muito maior que o alcance do potencial, $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\approx r-\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'$, portanto:

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{r},\{m_\alpha\}\left|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right.\right\rangle &\approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\delta_{\{n_\alpha\},\{m_\alpha\}} \\ &-\frac{M}{(2\pi)^{5/2}\hbar^2}\frac{e^{i\tilde{k}r}}{r}\int d^3k' \int d^3r' e^{-i\left(\tilde{k}\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{k}'\right)\cdot\boldsymbol{r}'} \\ &\times\left\langle \boldsymbol{k}',\{m_\alpha\}\left|V\left(\boldsymbol{R},\left\{a_\alpha,a_\alpha^\dagger\right\}\right)\right|\psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}}\right\rangle\end{aligned} \tag{A.5}$$

As integrais são resolvidas trivialmente e obtemos:

$$\left\langle \boldsymbol{r}, \{m_\alpha\} \left| \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \right\rangle \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \delta_{\{n_\alpha\},\{m_\alpha\}} \right.$$
$$- \frac{\sqrt{2\pi}M}{\hbar^2} \frac{e^{i\tilde{k}r}}{r} \left\langle \widetilde{k}\hat{\boldsymbol{r}}, \{m_\alpha\} \left| V\left(\boldsymbol{R}, \left\{a_\alpha, a_\alpha^\dagger\right\}\right) \right| \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \right\rangle \qquad \text{(A.6)}$$

Expandindo até primeira ordem no potencial temos:

$$\left\langle \boldsymbol{r}, \{m_\alpha\} \left| \psi_{\boldsymbol{q},\{n_\alpha\}} \right\rangle \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \delta_{\{n_\alpha\},\{m_\alpha\}} \right.$$
$$- \frac{\sqrt{2\pi}M}{\hbar^2} \frac{e^{i\tilde{k}r}}{r} \left\langle \widetilde{k}\hat{\boldsymbol{r}}, \{m_\alpha\} \left| V\left(\boldsymbol{R}, \left\{a_\alpha, a_\alpha^\dagger\right\}\right) \right| \boldsymbol{q}, \{n_\alpha\} \right\rangle \qquad \text{(A.7)}$$

Q.E.D.

Apêndice B

Média Térmica

Neste apêndice resolveremos as somatórias da equação (4.5) e mostraremos que o resultado é o indicado na equação (4.6). Primeiro vamos resolver a função de partição Z:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\boldsymbol{n}_\alpha\}} \exp\left(-\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{i=1}^{3}\frac{\hbar\Omega_\alpha}{k_BT}n_\alpha^i\right) \\ &= \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3}\sum_{n_\alpha^i=0}^{\infty}\left[\exp\left(-\frac{\hbar\Omega_\alpha}{k_BT}\right)\right]^{n_\alpha^i} \\ &= \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3}\frac{1}{1-\exp\left(-\frac{\hbar\Omega_\alpha}{k_BT}\right)} \end{aligned} \tag{B.1}$$

As somatórias podem ser escritas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} S = \sum_{\{\boldsymbol{n}_\alpha\}}\frac{1}{Z}\exp\left(-\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{i=1}^{3}\frac{\hbar\Omega_\alpha}{k_BT}n_\alpha^i\right) \\ \times\left\langle\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\middle|U^\dagger(\boldsymbol{k})\middle|\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\right\rangle\left\langle\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\middle|U(\boldsymbol{k}')\middle|\{\boldsymbol{n}_\alpha\}\right\rangle \end{aligned} \tag{B.2}$$

Agora usamos a fórmula $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \Leftrightarrow [[B,A],A] = 0$ para escrever $U^\dagger$ da seguinte forma:

$$U^\dagger(\boldsymbol{k}) = \exp\left(-\sum_{\alpha=1}^{N} \hbar K_\alpha \boldsymbol{k} \cdot \left(\boldsymbol{a}_\alpha^\dagger - \boldsymbol{a}_\alpha\right)\right) = \exp\left(-\sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{\lambda}_\alpha \cdot \left(\boldsymbol{a}_\alpha^\dagger - \boldsymbol{a}_\alpha\right)\right)$$
$$= \prod_{\alpha=1}^{N} \exp\left(\boldsymbol{\lambda}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\alpha\right) \exp\left(-\boldsymbol{\lambda}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\alpha^\dagger\right) \exp\left(\frac{\lambda_\alpha^2}{2}\left[\boldsymbol{a}_\alpha, \boldsymbol{a}_\alpha^\dagger\right]\right) \tag{B.3}$$

onde $\boldsymbol{\lambda}_\alpha = \hbar K_\alpha \boldsymbol{k}$. Usamos $\left[\boldsymbol{a}_\alpha, \boldsymbol{a}_\alpha^\dagger\right] = 1$ e obtemos a seguinte expressão:

$$U^\dagger(\boldsymbol{k}) = \prod_{\alpha=1}^{N} \exp\left(\boldsymbol{\lambda}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\alpha\right) \exp\left(-\boldsymbol{\lambda}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\alpha^\dagger\right) \exp\left(\frac{\lambda_\alpha^2}{2}\right) \tag{B.4}$$

Os elementos diagonais são dados por:

$$\left\langle \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \middle| U^\dagger(\boldsymbol{k}) \middle| \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \right\rangle = \prod_{\alpha=1}^{N} \exp\left(\frac{\lambda_\alpha^2}{2}\right) \left\langle \boldsymbol{n}_\alpha \middle| e^{\boldsymbol{\lambda}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\alpha} e^{-\boldsymbol{\lambda}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\alpha^\dagger} \middle| \boldsymbol{n}_\alpha \right\rangle \tag{B.5}$$

Expandindo os termos que dependem de $\boldsymbol{n}_\alpha$ temos:

$$\begin{aligned}
&\left\langle \boldsymbol{n}_\alpha \middle| \exp\left(\boldsymbol{\lambda}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\alpha\right) \exp\left(-\boldsymbol{\lambda}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\alpha^\dagger\right) \middle| \boldsymbol{n}_\alpha \right\rangle \\
&= \prod_{i=1}^{3} \left\langle n_\alpha^i \middle| \exp\left(\lambda_\alpha^i a_\alpha^i\right) \exp\left(-\lambda_\alpha^i {a_\alpha^i}^\dagger\right) \middle| n_\alpha^i \right\rangle \\
&= \prod_{i=1}^{3} \sum_{j,k=0}^{\infty} \left\langle n_\alpha^i \middle| \frac{\left(\lambda_\alpha^i a_\alpha^i\right)^j}{j!} \frac{\left(-\lambda_\alpha^i {a_\alpha^i}^\dagger\right)^k}{k!} \middle| n_\alpha^i \right\rangle \\
&= \prod_{i=1}^{3} \sum_{j,k=0}^{\infty} \frac{\left(\lambda_\alpha^i\right)^j}{j!} \frac{\left(-\lambda_\alpha^i\right)^k}{k!} \left\langle n_\alpha^i \middle| \left(a_\alpha^i\right)^j \left({a_\alpha^i}^\dagger\right)^k \middle| n_\alpha^i \right\rangle \\
&= \prod_{i=1}^{3} \sum_{j,k=0}^{\infty} \frac{\left(\lambda_\alpha^i\right)^j}{j!} \frac{\left(-\lambda_\alpha^i\right)^k}{k!} \sqrt{\frac{(n_\alpha^i + j)!}{n_\alpha^i!}} \sqrt{\frac{(n_\alpha^i + k)!}{n_\alpha^i!}} \left\langle n_\alpha^i + j \middle| n_\alpha^i + k \right\rangle \\
&= \prod_{i=1}^{3} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(-{\lambda_\alpha^i}^2\right)^j}{\left(j!\right)^2} \frac{(n_\alpha^i + j)!}{n_\alpha^i!}
\end{aligned} \tag{B.6}$$

onde usamos a expansão em série de potência da exponencial e a ortogonalidade dos autoestados dos osciladores. Substituindo na equação (B.5) temos:

$$\left\langle \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \middle| U^\dagger(\boldsymbol{k}) \middle| \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \right\rangle = \prod_{\alpha=1}^{N} \prod_{i=1}^{3} \sum_{j=0}^{\infty} \exp\left(\frac{{\lambda_\alpha^i}^2}{2}\right) \frac{\left(-{\lambda_\alpha^i}^2\right)^j}{(j!)^2} \frac{(n_\alpha^i + j)!}{n_\alpha^i!} \quad \text{(B.7)}$$

Notamos, a partir da equação (B.7) que os elementos diagonais de $U^\dagger$ são reais, portanto:

$$\left\langle \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \middle| U^\dagger(\boldsymbol{k}) \middle| \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \right\rangle = \left\langle \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \middle| U(\boldsymbol{k}) \middle| \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \right\rangle^* = \left\langle \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \middle| U(\boldsymbol{k}) \middle| \{\boldsymbol{n}_\alpha\} \right\rangle \text{(B.8)}$$

Substituímos (B.7) em (B.2) e obtemos:

$$\begin{aligned} S &= \prod_{\alpha=1}^{N} \prod_{i=1}^{3} \frac{\exp\left(-\frac{\hbar\Omega_\alpha}{k_B T} n_\alpha^i\right)}{Z} \exp\left(\frac{{\lambda_\alpha^i}^2 + {\lambda'_\alpha}^2}{2}\right) \\ &\times \sum_{j,k=0}^{\infty} \sum_{n_\alpha^i=0}^{\infty} \frac{\left(-{\lambda_\alpha^i}^2\right)^j \left(-{\lambda'_\alpha}^2\right)^k}{(j!)^2 (k!)^2} \frac{(n_\alpha^i + j)!}{n_\alpha^i!} \frac{(n_\alpha^i + k)!}{n_\alpha^i!} \end{aligned} \quad \text{(B.9)}$$

onde $\boldsymbol{\lambda}'_\alpha = \hbar K_\alpha \boldsymbol{k}'$. Definindo $x_\alpha = \exp(-\hbar\Omega_\alpha / k_B T)$, podemos escrever a equação (B.9) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} S = \prod_{\alpha=1}^{N} \prod_{i=1}^{3} (1 - x_\alpha) \exp\left(\frac{{\lambda_\alpha^i}^2 + {\lambda'_\alpha}^2}{2}\right) \sum_{j,k=0}^{\infty} \frac{\left(-{\lambda_\alpha^i}^2\right)^j \left(-{\lambda'_\alpha}^2\right)^k}{(j!)^2 (k!)^2} \\ \times \sum_{n_\alpha^i=0}^{\infty} \frac{(n_\alpha^i + j)!}{n_\alpha^i!} \frac{(n_\alpha^i + k)!}{n_\alpha^i!} x_\alpha^{n_\alpha^i} \end{aligned} \quad \text{(B.10)}$$

Resolvendo a somatória em n_α^i temos:

$$\sum_{n_\alpha^i=0}^{\infty} \frac{(n_\alpha^i+j)!}{n_\alpha^i!}\frac{(n_\alpha^i+k)!}{n_\alpha^i!}x_\alpha^{n_\alpha^i} = \sum_{n_\alpha^i=0}^{\infty}\left(\frac{d}{dx_\alpha}\right)^j x_\alpha^j \left(\frac{d}{dx_\alpha}\right)^k x_\alpha^{n_\alpha^i+k}$$
$$= \left(\frac{d}{dx_\alpha}\right)^j x_\alpha^j \left(\frac{d}{dx_\alpha}\right)^k x_\alpha^k \sum_{n_\alpha^i=0}^{\infty} x_\alpha^{n_\alpha^i} = \left(\frac{d}{dx_\alpha}\right)^j x_\alpha^j \left(\frac{d}{dx_\alpha}\right)^k \frac{x_\alpha^k}{1-x_\alpha} \quad \text{(B.11)}$$

Usaremos a seguinte fórmula generalizada para a regra da cadeia:

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^n f(x)\, g(x) = \sum_{m=0}^{n} \frac{n!}{m!\,(n-m)!} f^{(m)}(x)\, g^{(n-m)}(x),$$
$$\text{onde } f^{(m)}(x) = \left(\frac{d}{dx}\right)^m f(x) \quad \text{(B.12)}$$

É simples mostrar as seguintes derivadas:

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^m x^j = \frac{j!}{(j-m)!}x^{j-m}, \ \left(\frac{d}{dx}\right)^m \frac{k!}{(1-x)^k} = \frac{(k+m)!}{(1-x)^{k+m+1}} \quad \text{(B.13)}$$

onde $m \leq j$. A partir da equação (B.12) temos:

$$\begin{aligned}\left(\frac{d}{dx_\alpha}\right)^k \frac{x_\alpha^k}{1-x_\alpha} &= \sum_{m=0}^{k} \frac{k!}{m!\,(k-m)!}\frac{k!}{(k-m)!}x_\alpha^{k-m}\frac{(k-m)!}{(1-x_\alpha)^{k-m+1}} \\ &= \frac{k!}{1-x_\alpha}\sum_{m=0}^{k}\frac{k!}{m!\,(k-m)!}\left(\frac{x_\alpha}{1-x_\alpha}\right)^{k-m} \\ &= \frac{k!}{1-x_\alpha}\left(1+\frac{x_\alpha}{1-x_\alpha}\right)^k = \frac{k!}{(1-x_\alpha)^{k+1}} \quad \text{(B.14)}\end{aligned}$$

Substituindo de volta na equação (B.11) temos:

$$\left(\frac{d}{dx_\alpha}\right)^j \frac{k!x_\alpha^j}{(1-x_\alpha)^{k+1}} = \sum_{m=0}^{j} \frac{j!}{m!\,(j-m)!}\frac{j!}{(j-m)!}x_\alpha^{j-m}\frac{(j-m+k)!}{(1-x_\alpha)^{j-m+k+1}}$$
$$= \frac{j!}{(1-x_\alpha)^{k+1}}\sum_{m=0}^{j}\frac{j!\,(j-m+k)!}{m!\,[(j-m)!]^2}\left(\frac{x_\alpha}{1-x_\alpha}\right)^{j-m}$$
$$= \frac{j!}{(1-x_\alpha)^{k+1}}\left(\frac{d}{dy_\alpha}\right)^k y_\alpha^k \sum_{m=0}^{j}\frac{j!}{m!\,(j-m)!}y_\alpha^{j-m}$$
$$= \frac{j!}{(1-x_\alpha)^{k+1}}\left(\frac{d}{dy_\alpha}\right)^k y_\alpha^k\,(1+y_\alpha)^j \qquad \text{(B.15)}$$

onde definimos $y_\alpha \equiv \left(\frac{x_\alpha}{1-x_\alpha}\right)$. Substituindo na equação (B.10) temos:

$$S = \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3}\exp\left(\frac{{\lambda_\alpha^i}^2 + {\lambda'^i_\alpha}^2}{2}\right)\sum_{j,k=0}^{\infty}\frac{\left(-{\lambda_\alpha^i}^2\right)^j\left(-{\lambda'^i_\alpha}^2\right)^k}{(j!)^2\,(k!)^2}$$
$$\times\frac{j!}{(1-x_\alpha)^k}\left(\frac{d}{dy_\alpha}\right)^k y_\alpha^k\,(1+y_\alpha)^j$$
$$= \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3}\exp\left(\frac{{\lambda_\alpha^i}^2 + {\lambda'^i_\alpha}^2}{2}\right)\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\left(-{\lambda'^i_\alpha}^2\right)^k}{(k!)^2}\frac{1}{(1-x_\alpha)^k}$$
$$\times\left(\frac{d}{dy_\alpha}\right)^k y_\alpha^k\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{j!}\left[-{\lambda_\alpha^i}^2\,(1+y_\alpha)\right]^j$$
$$= \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3}\exp\left(\frac{{\lambda_\alpha^i}^2 + {\lambda'^i_\alpha}^2}{2}\right)\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\left(-{\lambda'^i_\alpha}^2\right)^k}{(k!)^2}\frac{1}{(1-x_\alpha)^k}$$
$$\times\left(\frac{d}{dy_\alpha}\right)^k y_\alpha^k\exp\left[-{\lambda_\alpha^i}^2\,(1+y_\alpha)\right] \qquad \text{(B.16)}$$

Efetuando a derivada temos:

$$\left(\frac{d}{dy_\alpha}\right)^k y_\alpha^k \exp\left[-{\lambda_\alpha^i}^2 (1+y_\alpha)\right] = \sum_{m=0}^{k} \frac{k!}{m!\,(k-m)!}\frac{k!}{m!} y_\alpha^m \left(-{\lambda_\alpha^i}^2\right)^m \exp\left[-{\lambda_\alpha^i}^2 (1+y_\alpha)\right] \quad \text{(B.17)}$$

Com efeito:

$$\begin{aligned}
S =& \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3} \exp\left(\frac{{\lambda_\alpha^i}^2 + {\lambda'_\alpha}^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{{\lambda_\alpha^i}^2}{1-x_\alpha}\right) \\
&\times \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{k} \left(\frac{-{\lambda'_\alpha}^2}{1-x_\alpha}\right)^k \frac{\left(-{\lambda_\alpha^i}^2 y_\alpha\right)^m}{(m!)^2\,(k-m)!} \\
=& \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3} \exp\left(-\frac{{\lambda_\alpha^i}^2}{2}\frac{1+x_\alpha}{1-x_\alpha}\right) \exp\left(\frac{{\lambda'_\alpha}^2}{2}\right) \\
&\times \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{-{\lambda'_\alpha}^2}{1-x_\alpha}\right)^m \frac{\left(-{\lambda_\alpha^i}^2 y_\alpha\right)^m}{(m!)^2} \sum_{k=m}^{\infty} \frac{1}{(k-m)!} \left(\frac{-{\lambda'_\alpha}^2}{1-x_\alpha}\right)^{k-m} \\
=& \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3} \exp\left(-\frac{{\lambda_\alpha^i}^2}{2}\frac{1+x_\alpha}{1-x_\alpha}\right) \exp\left(\frac{{\lambda'_\alpha}^2}{2}\right) \\
&\times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(m!)^2} \left[\frac{\left(\lambda_\alpha^i \lambda'^i_\alpha\right)^2 x_\alpha}{(1-x_\alpha)^2}\right]^m \exp\left(\frac{-{\lambda'_\alpha}^2}{1-x_\alpha}\right) \\
=& \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N}\left(\lambda_\alpha^2 + {\lambda'_\alpha}^2\right)\frac{1+x_\alpha}{1-x_\alpha}\right] \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3}\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(m!)^2}\left[\frac{\left(\lambda_\alpha^i \lambda'^i_\alpha\right)^2 x_\alpha}{(1-x_\alpha)^2}\right]^m \\
=& \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N}\left(\lambda_\alpha^2 + {\lambda'_\alpha}^2\right)\frac{1+x_\alpha}{1-x_\alpha}\right] \prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3} I_0\left[\frac{2\lambda_\alpha^i \lambda'^i_\alpha}{x_\alpha^{-1/2} - x_\alpha^{1/2}}\right] \qquad \text{(B.18)}
\end{aligned}$$

onde $I_0(x)$ é a função de Bessel modificada de ordem 0. Finalmente, a partir da definição de $\boldsymbol{\lambda}_\alpha$, $\boldsymbol{\lambda}'_\alpha$ e x_α, obtemos a seguinte expressão:

$$S = \exp\left[-\frac{1}{2}k^2\Gamma^2(T)\right]\exp\left[-\frac{1}{2}k'^2\Gamma^2(T)\right]\prod_{\alpha=1}^{N}\prod_{i=1}^{3} I_0\left[\frac{\hbar^2 K_\alpha^2 k^i k'^i}{\sinh\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{2k_BT}\right)}\right] \quad \text{(B.19)}$$

onde $\Gamma^2(T) = \sum_{\alpha=1}^{N}\hbar^2 K_\alpha^2 \coth\left(\frac{\hbar\Omega_\alpha}{2k_BT}\right)$.

Referências Bibliográficas

[1] P. A. Schilpp, (Ed.). *Albert Einstein: Philosopher-Scientist*, Evanston: The Library of Living Philosophers (1949).

[2] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?*, Physical Review 47 (1935) 777.

[3] J.S. Bell, *On the Einstein-Poldolsky-Rosen paradox*, Physics 1 (1964) 195.

[4] J. von Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Berlin: Springer (1932). Traduzido como *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton: Princeton University Press (1955).

[5] M. Schlosshauer, *Decoherence, the Measurement Problem, and Interpretations of Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. 76 (2004) 1267.

[6] W. H. Zurek, *Decoherence and the Transition from Quantum to Classical*, Physics Today 44 (1991) 36.

[7] W. H. Zurek, *Decoherence, Einselection, and the Quantum Origin of the Classical* Rev. Mod. Phys. 75 (2003) 715.

[8] E. Joos and J. D. Zeh, *The Emergence of Classical Properties Through Interaction with the Environment*, Z. Phys. B 59 (1985) 223.

[9] G. Bacciagaluppi, *The Role of Decoherence in Quantum Mechanics*, In: E. N. Zalta (org.). The Stanford Encyclopedia of Philosophy. 2005. Versão eletrônica: http://plato.stanford.edu/archives/sum2005/entries/qm-decoherence/.

[10] J.A. Wheeler and W.H. Zurek, *Quantum Theory and Measurement*, Princeton: Princeton University Press (1983).

[11] K. Hornberger et al. *Collisional Decoherence Observed in Matter Wave Interferometry*, Phys. Rev. Lett 90 (2003) 160401.

[12] M.S. Chapman, C.R. Ekstrom, T.D. Hammond, R.A. Rubenstein, J. Schmiedmayer, S.Wehinger, D.E. Pritchard, *Optics and Interferometry with Na_2 Molecules*, Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 4783.

[13] C.J. Myatt, B.E. King, Q.A. Turchette, C.A. Sackett, D. Kielpinski, W.M. Itano, C. Monroe, D.J.Wineland, *Decoherence of quantum superpositions through coupling to engineered reservoirs*, Nature 403 (2000) 269.

[14] L. Hackermüller, K. Hornberger, B. Brezger, A. Zeilinger, M. Arndt, *Decoherence of matter waves by thermal emission of radiation*, Nature 427 (2004) 711.

[15] M. Hillery, L. Mlodinow and V. Bužek, *Quantum interference with molecules - The role of internal states*, Phys. Rev. A 71 (2005) 062103.

[16] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Quantum tunnelling in a dissipative system*, Ann. Phys. (NY) 149 (1983) 374.

[17] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Path Integral Approach to Quantum Brownian Motion*, Physica 121A (1983) 587.

[18] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Influence of damping on quantum interference: An exactly soluble model*, Phys. Rev. A 31 (1985) 1059.

[19] C. Eckart, *Some Studies Concerning Rotation Axes and Polyatomic Molecules*, Phys. Rev. 47 (1935) 552.

[20] A. H. Castro Neto and A. O. Caldeira, *On quantum transmission of a system with internal degrees of freedom*, Phys. Lett. A 209 (1995) 290.

[21] V. Hakim and V. Ambegaokar, *Quantum theory of a free particle interacting with a linearly dissipative environment*, Phys. Rev. A 32 (1985) 423.

[22] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, New York: Wiley (1963).

[23] C. Kittel. *Quantum Theory of Solids*, Revised Printing, New York: J. Willey & Sons (1963).

[24] M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andrae, C. Keller, G. van der Zouw and A. Zeilinger, *Wave-particle duality of C_{60} molecules*, Nature 401 (1999) 680.