Universidade Estadual de Campinas Instituto de Física Gleb Wataghin

Partículas Brownianas Emaranhadas

Daniel Mendonça Valente

Este exemption corresponde redoção final da Disserbação de Mestrado defer Dissertação de mestrado duno Daniel Mendera e aporada pela carrissão Julgadora Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira Campinas 2009

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP





Secretaria de Pós-Graduação - Tel: (19) 3521-5305 FAX: (19) 3521-4142 MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE DANIEL MENDONÇA VALENTE - RA 032003, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN" DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 16 DE OUTUBRO DE 2009

COMISSÃO JULGADORA: Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira – DFMC/IFGW/UNICAMP (Orientador do Candidato)

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar – DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa – IF/USP-São Carlos

Agradecimentos

Há poucos dias eu estava em um ambiente informal, conversando amenidades, com amigos estudantes de áreas distantes de física. Em algum momento, um deles me perguntou sobre o que era o meu mestrado e como era a atividade de um físico. Quando isso acontece, a minha resposta normalmente tende a sustentar-se na idéia de que a procura por soluções de problemas envolvendo fenômenos naturais é que legitima a profissão. A reação desse amigo, como poucas vezes acontece, não se encerrou no tradicional e desestimulante "uhm... interessante". Ao contrário, o rumo da conversa acabou sendo a reflexão de que qualquer atividade humana só ganha sentido e relevância quando a percebemos dependente das outras atividades.

Do mesmo modo acontece com as pessoas. Em algum grau e de alguma forma dependemos uns dos outros. É por isso que tenho muito a agradecer. Vários contribuíram de forma direta e decisiva para o meu desenvolvimento. Outros tantos contribuíram de forma indireta, desde os funcionários da universidade até os contribuintes dos impostos que possibilitam o financiamento à pesquisa. Como os últimos são demasiado numerosos, limito-me aqui a agradecer aos primeiros.

Aos meus pais, Adriano e Rosa Maria, agradeço a confiança depositada e o esforço para que o caminho traçado fosse o mais agradável e digno possível. A cada palavra de motivação, a cada sugestão, a cada "muito bom" ou "não é bem por aí", muito obrigado. Kitty, minha irmãzinha amada, obrigado pela alegria de tantos momentos.

À minha esposa Lívia, agradeço o companheirismo e o carinho. Obrigado por contribuir para a minha estabilidade emocional, por tornar meu sonho parte dos seus, ainda que isso tivesse dependido da dolorida distância, pelas palavras ora de entusiasmo ora de conforto e pelo amor que faz tudo valer a pena.

Ao Amir, agradeço a indispensável orientação. Muito obrigado por me ajudar a enxergar a física escrita nas extensas equações. Agradeço também aos meus outros professores da graduação e pós-graduação, que contribuíram muito para o meu aprendizado.

Aos grandes amigos de convívio frequente, Danilo, Edu e Piá, obrigado por proporcionarem momentos tão divertidos e estimulantes intelectualmente. Agradeço todas as boas conversas das madrugadas, as trocas de idéia, tão engrandecedoras. Todas as noites viradas juntos nos momentos de estudo e todas as risadas nos momentos descontraídos muito me ajudaram a completar essa tarefa. Ao amigo Rickson, muito obrigado por todas as dicas e por ser tão solícito. Ao meu grande amigo Leco, agradeço a confiança, a atenção e o bom humor de sempre.

Finalmente, agradeço à Fapesp pelo financiamento dos estudos nesses últimos dois anos.

Resumo

Este trabalho consiste em um estudo do emaranhamento em sistemas quânticos abertos, modelados como partículas brownianas. O interesse surge da possibilidade de entender como o meio pode criar ou manter emaranhamento entre sistemas quânticos, em vez de somente ocasionar perda de coerência e energia.

Primeiramente, revisamos os significados do emaranhamento em mecânica quântica e algumas formas de quantificá-lo. Em seguida, estudamos a literatura de sistemas quânticos abertos para uma partícula, em especial o movimento browniano quântico. Com isso, foi possível calcular o emaranhamento entre uma partícula quântica browniana e seu reservatório.

Numa segunda etapa, estudamos o modelo de duas partículas brownianas em um banho comum. Esse modelo permite a introdução não só de uma escala de tempo característica como também uma de comprimento. Um potencial efetivo entre as partículas surge no modelo como consequência das hipóteses assumidas. Na ausência de potencial externo, é preservada a invariância translacional do sistema. Por fim, pudemos alcançar nosso principal resultado, que foi calcular a matriz densidade das duas partículas em equilíbrio térmico e, com ela, o emaranhamento entre as partículas.

Abstract

This work consists in a study of entanglement in open quantum systems, within the brownian particles model. The interest comes from the possibility of understanding the mechanisms that lead the environment to create or to keep entanglement between quantum systems and not only make them lose energy or coherence.

We start by making a review of the meaning of entanglement to quantum mechanics and some ways to quantify it. Then, we study the literature of open quantum systems for one particle, specially the quantum brownian motion. Moreover, it has been possible to calculate the entanglement between the quantum brownian particle and its reservoir.

At a second stage, we studied the model of two brownian particles in a common bath. This model permits not only the introduction of a time scale but also of a lenth one. An effective potential between the particles emerges in the model as a consequence of our assumptions. In the absence of an external potential, the system's translational invariance is preserved. The last step was to achieve what became our main result. We have calculated the equilibrium density matrix for the two brownian particles and the entanglement between them.

Conteúdo

1	Introdução ao emaranhamento		1
	1.1	Fundamentos	1
	1.2	Medidas	6
		1.2.1 Entropia de von Neunmann e EoF	7
		1.2.2 Negatividade e Negatividade Logarítimica	10
2	Mo	vimento Browniano de uma partícula	14
	2.1	Dinâmica Clássica	15
	2.2	Dinâmica Quântica	18
3	Em	aranhamento dinâmico entre uma partícula e o banho	23
	3.1	Oscilador Harmônico Amortecido $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	24
		3.1.1 Evolução temporal para um pacote gaussiano $\ldots \ldots \ldots \ldots$	26
		3.1.2 Evolução temporal para superposição de dois pacotes $\ . \ . \ .$	27
	3.2	Evolução temporal da concorrência generalizada	33
4	Mo	vimento Browniano de duas partículas	37
	4.1	Equação de movimento para uma partícula	38
	4.2	Equação de movimento para duas partículas	41
5	Emaranhamento de duas partículas em equilíbrio térmico		46
	5.1	Matriz densidade de duas partículas no equilíbrio térmico	46
	5.2	Negatividade Logarítimica em função da temperatura	59
\mathbf{A}	\mathbf{Res}	ultados dos cálculos do $Tr[ho_s^2]$	66

Capítulo 1 Introdução ao emaranhamento

O emaranhamento quântico e suas implicações constituem um dos principais focos de uma área relativamente nova em física chamada de Informação Quântica. Esse campo de estudo dedica-se a entender a quantidade e o tipo de informação que pode estar contida em um estado quântico e como ela afeta o funcionamento dos sistemas descritos por esses estados.

Entretanto, estados quânticos emaranhados não são tão recentes quanto a teoria de Informação Quântica. Ao contrário, eles surgem já nas primeiras discussões sobre os fundamentos da mecânica quântica, muitas vezes associados aos nomes de Albert Einstein e Erwin Schrödinger. Nessas ocasiões, tais estados eram usados para criticar o formalismo quântico, na tentativa de indicar suas imperfeições.

Por ter sido protagonista das críticas à mecânica quântica no início de sua construção e ser hoje visto como fonte legítima de novos fenômenos, o emaranhamento merece ser retratado com todas as suas sutilezas, a partir das visões dos principais colaboradores da teoria quântica da matéria. É com esse intuito que discutiremos um pouco dos fundamentos antes de seguir para o estudo das medidas dessa propriedade.

1.1 Fundamentos

No ano de 1935, Albert Einstein e colaboradores lançaram um trabalho [1] que é conhecido na literatura pela sigla EPR, associada ao nome de seus autores. Nele é apresentado um argumento que defende a incompleteza da mecânica quântica. Percorreremos sinteticamente as principais linhas desse artigo de modo a dar uma visão geral das idéias nele contidas.

Os autores afirmam que para qualificar uma teoria é necessário analisar nela dois aspectos: se ela é correta e se ela completa. É o segundo critério que torna-se alvo da crítica para o caso específico da teoria quântica.

Uma *teoria completa* é *definida* como aquela na qual "todo elemento de realidade possui uma representação".

Por *elemento de realidade* entende-se "toda variável que medimos com 100% de probabilidade *se não perturbamos o sistema*."

Em seguida, o artigo analisa a teoria quântica. Nela, o sistema é descrito pelo estado ψ . Além disso, podemos tomar dois operadores que não comutam, $A \in B$ com $[A, B] \neq 0$. A não comutatividade implica que se ψ é autoestado de A ele não será de B e vice-versa. Em termos do postulado da medida em mecânica quântica (MQ), isso se traduz da seguinte forma:

$$p(A) = 1 \Rightarrow p(B) \neq 1 \qquad e \qquad p(B) = 1 \Rightarrow p(A) \neq 1, \tag{1.1}$$

sendo p(A) a probabilidade de o sistema descrito por ψ ser algum autoestado do operador A.

Partindo-se dessas premissas, conclui-se que somente uma dentre as duas proposições a seguir devem ser satisfeitas pela MQ:

(i) A teoria, que descreve a natureza usando ψ , não é completa;

(ii) As grandezas representadas pelos operadores $A \in B$ não são simultaneamente reais.

Em outras palavras, a lógica dos autores nesse ponto é: ou a teoria está incompleta e portanto não retrata todos os valores do sistema na sua descrição ou então esses valores simplesmente não coexistem.

Se, usando alguma hipótese arbitrária, for mostrado que tanto (i) quanto (ii) são falsas, como logicamente não existe uma terceira opção, a hipótese é que será falsa.

O que EPR fez foi usar a hipótese "(i) é falso" e mostrar que isso implica "(ii) falso". De acordo com a idéia do parágrafo acima, quem está incorreta, portanto, é a hipótese. Logo, (i) prova-se verdadeiro e, dessa forma, *a MQ mostra-se incompleta*.

Vejamos como isso pode ser feito. Tomemos um sistema de duas partículas. Elas

interagem por um intervalo de tempo T e cessam a interação. Assumindo (i) falso, ou seja, que MQ é completa, então tudo o que se pode afirmar sobre o sistema está contido em Ψ , que resulta da equação de Schrödinger.

Faremos medidas na partícula 1 após o tempo T, a partir do qual elas não mais interagem. Inicialmente, medimos o observável A. O resultado é a_k , tal que $Au_k = a_k u_k$ e o sistema vai de $\Psi(x_1, x_2) = \sum_n \psi_n(x_2) u_n(x_1)$ para

$$1: u_k(x_1) \quad e \quad 2: \psi_k(x_2). \tag{1.2}$$

Igualmente, poderíamos medir B. Isso resulta em b_k , com $Bv_k = b_k v_k$. O sistema vai de $\Psi(x_1, x_2) = \sum_n \phi_n(x_2) v_n(x_1)$ para

$$1: v_k(x_1) \quad e \quad 2: \phi_k(x_2). \tag{1.3}$$

Se $\Psi(x_1, x_2) \neq \Psi(x_1)\Psi(x_2)$, então $\psi_k(x_2) \neq \phi_k(x_2)$. Na visão dos autores, isso significa que existem duas funções de onda para uma mesma realidade no subsistema 2.

A expressão "mesma realidade" admite que medir a partícula 1 não afeta a 2, já que, por hipótese, elas são não-interagentes a partir do tempo T.

Se, em especial, $A\psi_k = \lambda_k \psi_k$ e $B\phi_k = \mu_k \phi_k$, lembrando que $[A, B] \neq 0$, teremos A e B como sendo elementos simultâneos da realidade para uma mesma configuração da partícula 2, pois ambos podem ter seus autovalores medidos com precisão 100%, a priori.

Com isso, os autores acreditam ter mostrado que (i) falso implica (ii) falso. Dessa forma, a conclusão do artigo é que (i) é verdadeiro. Ou seja, *MQ é incompleta*!

Ilustramos as idéias comentadas com um exemplo original do artigo:

$$\Psi(x_1, x_2) = \langle x_1 | x_2 | \sum_p e^{\frac{i}{\hbar} x_0 p} | p \rangle \otimes | -p \rangle =$$
(1.4)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \frac{i}{\hbar} (x_1 - x_2 + x_0) p \ dp = \langle x_1 \ x_2 | \sum_x | x \rangle \otimes | x + x_0 \rangle. \tag{1.5}$$

Medindo o momento da partícula 1, P_1 , resulta em p'. Então, P_2 resulta em -p'.

Medindo a posição da partícula 1, X_1 , resulta em x'. Assim, X_2 resulta $x' + x_0$. Apesar de $[X_2, P_2] = i\hbar \neq 0$, fica parecendo que somos capazes de conhecer tanto a posição quanto o momento da segunda partícula.

Por embasar-se em um estado não normalizável, esse exemplo é criticado na literatura e convém mostrar um caso ainda mais simples:

$$|\psi\rangle \equiv |++\rangle_z + |--\rangle_z = |++\rangle_x + |--\rangle_x. \tag{1.6}$$

Medindo o spin da partícula 1 na direção z, S_{1z} , obtém-se $s_{1z} = \pm$. Então, S_{2z} implica $s_{2z} = \pm$.

Medindo em x, temos $s_{1x} = \pm$ implicando em $s_{2x} = \pm$, ainda que $[S_z, S_x] = i\hbar S_y \neq 0$. Novamente, temos a impressão de que é possível saber o spin em z e em x para a mesma partícula.

Na argumentação dos autores, fica nítido o papel fundamental da condição assumida por eles. Tal condição pode ser resumida como: não-interação significa que medir 1, ou conhecer uma informação clássica de 1, *não afeta* a informação sobre 2. Cabe notar que a aplicação da referida condição só pôde ser efetuada devido a uma escolha de estados não-separáveis, ou emaranhados, entre os dois subsistemas. Dito de outra forma, um estado não emaranhado nunca serviria de exemplo à interpretação da teoria quântica feita por EPR.

Reconhecemos, portanto, a idéia de não-localidade em MQ, a partir da qual a informação clássica, macroscópica, sobre um subsistema interfere sobre a informação clássica, gerada por experimento, de outro subsistema. Podemos ainda identificar na definição de "elemento de realidade" a idéia de realismo em MQ, em que o valor de uma grandeza existe mesmo antes de ser medido.

A discussão sobre a não-localidade ou não-realidade da MQ remete-nos naturalmente às desigualdades de Bell, para teorias de variáveis ocultas locais, de Leggett, com desigualdades para teoria de variáveis ocultas não-locais [2] e Bohm, cuja teoria de variáveis ocultas não-locais não pode ser refutada por Leggett. Entretanto, a compreensão dessas abordagens encontra-se fora de nosso escopo.

No contexto da MQ padrão, a existência de estados emaranhados é mera consequência da possibilidade da superposição de estados. Na verdade, a idéia de emaranhamento só nos parece exótica quando a confrontamos com o postulado da redução do pacote. Em primeira instância, nos deparamos com algo que parece uma "ação fantasmagórica à distância", que evidentemente nos surpreende.

Com respeito a isso, Lalöe [3] observa que "dois postulados diferentes para a evolução do mesmo objeto matemático não é usual em física". E a pergunta natural é "por que os dois postulados são necessários?". "Onde exatamente a aplicabilidade de um cessa em detrimento do segundo? Mais precisamente, dentre todas as interações - ou perturbações - a que um sistema físico pode sujeitar-se, quais devem ser consideradas evoluções normais, unitárias, e quais devem ser as medidas, com a devida redução do pacote de onda?"

Dentro desse contexto de medida, emaranhamento e classicalidade emergente da MQ, faremos uma breve revisão sobre o que pensavam Wigner e Schrödinger [3].

O AMIGO DE WIGNER

Wigner propõe que um amigo faça um experimento com estados quânticos, por exemplo tipo Stern-Gerlach, em um laboratório fechado.

O que acontece quando o analisador fornece o resultado, mas ainda não é conhecido do lado de fora?

Para o observador externo, é natural considerar o laboratório como um todo como possuidor de uma função de onda, que será uma superposição de resultados até que se abra a porta do laboratório.

Para o amigo de Wigner, isso é absurdo, uma vez que, para ele, a função de onda colapsou assim que ele obteve a medida.

O que Wigner discute nesse problema é o caráter absoluto/relativo da função de onda [3] dentro da premissa de redução do pacote. Parece que os dois observadores descreverão o mesmo evento com duas funções de onda diferentes.

O GATO DE SCHRÖDINGER

Mais que bem conhecido, esse experimento mental trata da correlação, ou emaranhamento, entre dois níveis atômicos e o estado de vida ou morte de um gato.

O que fica enfatizado é que um gato é um objeto responsável por quebrar superposições, sejam elas estatísticas ou coerentes. A decoerência, ou seja, a existência de uma probabilidade p_v de o gato estar vivo e p_m de estar morto, ainda que sem "termos de interferência", não é suficiente para prever em qual estado exato o gato estará.

Nas palavras de Lalöe, "seria um insulto a Schrödinger acreditar que decoerência possa ser invocada para solucionar seu aparente paradoxo do gato".

A questão principal, portanto, fica sendo explicar o motivo de os eventos individuais acontecerem, dentre as tantas possibilidades permitidas pela função de onda.

Por outro lado, temos a visão mais moderna e pragmática da MQ muito bem representada pela postura adotada por Peres [3]: "um vetor de estado não é uma propriedade de um sistema físico, mas sim uma representação de um procedimento experimental para preparar e testar um ou mais sistemas físicos".

Tendo em vista esse paradigma, podemos entender que, apesar de constituir um objeto atípico para tratar a natureza, o vetor de estado é capaz de implicar importantes consequências para os experimentos. O emaranhamento contribui para que essas consequências tragam uma nova gama de fenômenos a serem estudados e bem entendidos.

1.2 Medidas

Define-se, como já comentado, um vetor de estado $|\psi\rangle$ emaranhado como sendo aquele que obedece à relação

$$|\psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle. \tag{1.7}$$

Vamos mostrar adiante quais são possíveis critérios de separabilidade e medidas de emaranhamento geradas pelos critérios. Daqui em diante somente o caso de dois subsistemas, ou seja, bipartite, será considerado. Esta revisão será a mais breve possível, suficiente para atender estritamente as nossas aplicações futuras.

Na primeira seção, mostraremos a entropia de von Neumann e o emaranhamento de formação (EoF). Também veremos que esse último pode ser parametrizado pela grandeza denominada concorrência, cujo significado será brevemente discutido. Uma tentativa de generalização de concorrência também será estudada.

Na segunda seção apresentaremos o critério de separabilidade conhecido como transposição parcial de Peres, da sigla inglesa PPT. Com isso, somos levados à medida chamada de negatividade e à negatividade logarítimica. É mostrado como essa última pode ser usada em estados gaussianos.

1.2.1 Entropia de von Neunmann e EoF

Uma descrição mais geral que o vetor de estado é conhecida e dela precisamos para o que veremos adiante. Tal descrição é aquela fornecida pelo operador densidade do sistema, ρ . Quando sabemos somente a probabilidade p_i de o sistema estar no estado $|\phi_i\rangle$, temos uma mistura estatística dada por

$$\rho \equiv \sum_{i} p_{i} |\phi_{i}\rangle \langle \phi_{i}|.$$
(1.8)

Note que, quando $p_i = \delta_{ij}$, o sistema é puro novamente. A normalização das probabilidades é garantida por $\sum_i p_i = 1$.

As principais propriedades de ρ são

$$Tr[\rho] = 1, \quad Tr[\rho^2] \le 1 \quad e \quad Tr[\rho A] = \langle A \rangle,$$

$$(1.9)$$

em que a primeira é a normalização, a segunda é a pureza e a terceira a definição da média dos observáveis.

Sabe-se da física estatística que o grau de falta de informação que temos sobre os diferentes microestados de um sistema, com probabilidades p_k , é dado pela entropia S,

$$S = -\sum_{k} p_k \ln p_k. \tag{1.10}$$

Para estados quânticos, a mesma propriedade pode ser obtida através de

$$S(\rho) = -Tr[\rho \ln \rho] = -\sum_{i} \lambda_{i} \ln \lambda_{i}, \qquad (1.11)$$

sendo λ_i os autovalores de ρ . Estados puros possuem entropia nula.

Se um estado puro é separável, então podemos associar a cada subsistema um estado.

Por outro lado, se o estado puro é emaranhado, então é impossível associar um estado puro a cada subsistema, pela definição de não-separabilidade. Nesse caso, o máximo de informação que podemos associar a um subsistema A(B) é o operador $\rho_A(\rho_B)$, dado por

$$\rho_A = Tr_B[\rho_{AB}] \qquad (\rho_B = Tr_A[\rho_{AB}]). \qquad (1.12)$$

A referida operação é chamada de traço parcial e tem a seguinte propriedade, a qual garante que ela de fato signifique toda informação estatística sobre o subsistema:

$$Tr_A[M_n^{\dagger}M_n\rho_A] = Tr[(M_n \otimes I_B)^{\dagger}(M_n \otimes I_B)\rho_{AB}], \qquad (1.13)$$

sendo $\mathcal{P}(a_n) = Tr[M_n^{\dagger}M_n\rho_A]$ a probabilidade de medir o autovalor a_n e sendo $M_n = \sum_m |a_{n,m}\rangle\langle a_{n,m}|$ o projetor no autoestado cujo autovalor é a_n . Verifica-se tal propriedade usando-se $Tr = Tr_A Tr_B = Tr_B Tr_A$.

Basicamente, o que essa propriedade nos informa é que, se $\rho_A \equiv Tr_B[\rho_{AB}]$, então a probabilidade de medir o subsistema A e encontrar o valor a_n é a mesma, existindo ou não o subsistema B.

Mais explicitamente, o traço parcial é o mapa escrito abaixo

$$\rho_A = Tr_B \rho_{AB} = \sum_i \langle i|_B \ \rho_{AB} |i\rangle_B. \tag{1.14}$$

Sistemas maximamente emaranhados possuem subsistemas maximamente mistos. Isso equivale a dizer que estados emaranhados são aqueles em que quanto mais se tem informação sobre o todo, menos informação se tem sobre as partes. Fica clara a sugestão de que a entropia do subsistema quantifique o emaranhamento do sistema completo. Assim define-se a entropia de von Neumann como medida de emaranhamento:

$$E_{vN} = S(\rho_A) = S(\rho_B), \quad \rho_A = Tr_B[\rho_{AB}],$$
 (1.15)

para ρ_{AB} puro.

Para estados mistos ρ_{AB} , a situação complica-se um pouco. Existem várias maneiras de expandir ρ_{AB} como uma soma de estados puros. Dada uma expansão, poderíamos sugerir que o emaranhamento estivesse relacionado à entropia de von Neuman de cada estado da soma. A forma de aplicar essa idéia sem levar em conta as correlações clássicas é tomando o valor mínimo sobre todas as possibilidades de expansão. Assim surge o emaranhamento de formação, denotado por EoF,

$$EoF(\rho_{AB}) \equiv \min \sum_{i} p_i E_{vN}(\rho_{AB}^{(i)}), \qquad (1.16)$$

 $\cos \rho_{AB}^{(i)}$ puro.

O caso especial em que cada subsistema tem dois níveis, ou *qubits*, possui solução analítica para a minimização, dada por

$$EoF = h\left(\frac{1+\sqrt{1-C^2}}{2}\right),\tag{1.17}$$

em que

$$h(x) \equiv -[x \log_2(x) + (1 - x) \log_2(1 - x)]$$
(1.18)

e C é a chamada concorrência, definida a seguir. A própria concorrência muitas vezes é vista como uma medida de emaranhamento, dado que o emaranhamento é monotonicamente parametrizado por ela.

Para um estado geral ρ , a concorrência é dada por

$$C = max \left\{ 0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4} \right\}, \qquad (1.19)$$

com λ_i sendo em ordem decrescente os autovalores de $R\equiv\rho\rho^k,$ em que

$$\rho_k \equiv (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B) \rho^* (\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B).$$
(1.20)

Para o caso ainda mais restrito de estado puro, pode-se escrever $C = [2(1 - Tr[\rho_A^2])]^{(1/2)}$. Em termos de coeficientes de Schmidt, podemos escrever um estado

puro geral como $|\psi\rangle = c_1|10\rangle + c_2|01\rangle$ e concluir que $C = 2c_1c_2$, de onde fica sugerida uma motivação para o nome; quanto mais próximos são os valores de c_1 e c_2 , maior é a "concorrência" entre eles e, portanto, maior será C.

Existe um trabalho feito por Albeverio e Fei [4] que nos é de especial interesse. É apresentada uma argumentação a favor de uma possível medida de emaranhamento baseada no que eles denominam de *concorrência generalizada*, tentando tratar estados de dimensão $N \otimes M$, $N \in M$ inteiros.

O trabalho afirma que, para um estado puro $|\psi\rangle$ de dimensão arbitrária N, existem invariantes sob operações locais unitárias na forma $U \otimes U$ atuantes em $|\psi\rangle$ na forma

$$I_{\alpha} \equiv Tr[\rho_0^{\alpha+1}],\tag{1.21}$$

com $\alpha = 0, 1, ..., N - 1, \rho_0 \equiv Tr_B[\rho_{AB}] e \rho_{AB} = |\psi\rangle\langle\psi|.$

Obviamente, polinômios em I_{α} também são invariantes, em especial: $\frac{N}{N-1}(I_0 - I_1^2)$.

Como uma medida de emaranhamento precisa ser invariante sob operações locais, vem a sugestão:

$$C_N \equiv \sqrt{\frac{N}{N-1}(I_0 - I_1^2)} = \sqrt{\frac{N}{N-1}(1 - Tr[\rho_0^2])}.$$
 (1.22)

Os pontos positivos a favor dessa definição são destacados no artigo:

- para todo estado não-separável, $C_N \neq 0$;
- C_2 coincide com a concorrência para dois *qubits*;
- $0 \leq C_N \leq 1$, como se espera para que EoF fique bem definido;
- $C_N = 0$ implica EoF = 0;
- $C_N = 1$ implica EoF = 1.

Como desvantagem, temos que existe N para o qual EoF(C) não é uma função monótona. A conclusão do trabalho, contudo, é que a *concorrência generalizada* C_N é um critério razoável de medida de não-separabilidade.

1.2.2 Negatividade e Negatividade Logarítimica

Para um operador densidade ρ pertencente a um espaço de Hilbert de dimensão finita podemos aplicar um critério de separabilidade conhecido como transposição parcial de Peres. Ele nos diz que, se fizermos a transposição da matriz ρ somente nas variáveis de um dos subsistemas, ρ^{Γ} , e ρ^{Γ} possuir autovalor negativo, então ρ é não-separável. Isso vale independentemente da pureza do operador densidade.

Podemos compreender esse resultado, intuitivamente, da forma seguinte. Temos que $\rho \geq 0$, já que é matriz densidade. Assim, se existir ρ_i^A tal que $\rho = \sum_i p_i \rho_i^A \otimes \rho_i^B$, logo separável, então $\rho^{\Gamma} = \sum_i p_i \rho_i^{(A)T} \otimes \rho_i^B$.

Como ρ_i^A é, por hipótese, matriz densidade, $\rho_i^A \ge 0$, logo $\rho_i^{(A)T} \ge 0$ e assim, $\rho^{\Gamma} \ge 0$.

Portanto, $\rho^{\Gamma} < 0$ quer dizer que não existe ρ_i^A que satisfaça a condição de separabilidade, ou seja, o estado é emaranhado.

Parece natural propor que quanto mais negativos forem os autovalores, menos separável é ρ , portanto mais emaranhado. É assim que surge a negatividade, \mathcal{N} , que pode ser escrita como [5]

$$\mathcal{N} \equiv \sum_{k} \frac{|\lambda_k| - \lambda_k}{2},\tag{1.23}$$

os autovalores de ρ^{Γ} sendo λ_k .

Como $Tr[\rho] = Tr[\rho^{\Gamma}] = \sum_k \lambda_k = 1$, então

$$\mathcal{N} = \frac{(\sum_{k} |\lambda_{k}|) - 1}{2} = \frac{||\rho^{\Gamma}|| - 1}{2}, \qquad (1.24)$$

em que $||A|| \equiv Tr[|A|].$

Intimamente relacionada à negatividade, uma outra medida de emaranhamento é a negatividade logarítimica, definida por

$$E_{\mathcal{N}}(\rho) = \ln ||\rho^{\Gamma}|| = \ln \left[\sum_{k} |\lambda_{k}|\right].$$
(1.25)

A negatividade logarítimica pode ser nula para estados não-separáveis e é aditiva em produtos tensoriais, $E_{\mathcal{N}}(\rho \otimes \sigma) = E_{\mathcal{N}}(\rho)E_{\mathcal{N}}(\sigma)$.

Todos os resultados já mencionados referem-se somente a sistemas de níveis discretos. Porém, existe uma classe de estados de variáveis contínuas que é de especial interesse por permitir o uso generalizado da análise feita.

Esses são os estados gaussianos, pertencentes a um espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \bigotimes_{i=1}^{n} \mathcal{H}_i$. Para cada \mathcal{H}_i podemos associar operadores $\hat{p}_i \in \hat{q}_i$. Se $\hat{X} \equiv (\hat{q}_1, \hat{p}_1, ..., \hat{q}_n, \hat{p}_n)$, então a relação obedecida por tais operadores é

$$[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 2i\Omega_{ij} \quad e \quad \Omega = \bigoplus_{i=1}^n \omega, \tag{1.26}$$

em que

$$\omega = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{1.27}$$

Estados gaussianos podem ser descritos em termos da função característica W(X),

$$\tilde{W}(X) = \exp\left\{-\frac{1}{2}X \ \sigma \ X^T\right\}.$$
(1.28)

Para dois modos, podemos escrever

$$\tilde{W}(\vec{q},\vec{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\vec{p}.\vec{x}} \left\langle \vec{x} - \frac{\vec{q}}{2} \right| \rho \left| \vec{x} + \frac{\vec{q}}{2} \right\rangle d^2x, \qquad (1.29)$$

em que $\vec{q} \equiv (q_1, q_2)$ e $\vec{p} \equiv (p_1, p_2)$.

A matriz σ em (1.28) é chamada de *matriz de covariância*. Ela carrega toda a informação contida no estado. Por ser finita e conter toda a informação sobre o estado, ela possibilita o estudo de separabilidade usando negatividade. O artigo [5] mostra como isso pode ser feito.

A propriedade mais importante para que a tarefa seja possível é o fato de que transformações unitárias em \mathcal{H} , as quais não afetam as informações contidas em ρ , implicarem uma certa transformação em $\sigma, \sigma \mapsto S^T \sigma S$. Em especial, podemos sempre encontrar $\sigma = S^T \nu S$, em que $\nu = diag(\nu_1, \nu_1, ..., \nu_n, \nu_n)$. Esse é o chamado espectro simplético de σ e possui a propriedade $\nu_i \geq 1$.

Para o caso de dois modos, podemos escrever

$$\sigma = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \gamma^T & \beta \end{pmatrix}, \tag{1.30}$$

em que $\alpha,\,\beta$ e γ são matrizes 2 × 2.

Temos dois autovalores distintos ν_i , que definiremos como $\nu_- e \nu_+, \nu_- \leq \nu_+$. Logo, $\nu_- \geq 1$ é suficiente para garantir a consistência de σ como matriz de covariância. Pode-se mostrar que $2\nu_{\pm}^2 = \Delta \pm \sqrt{\Delta^2 - 4 \det \sigma}$, em que $\Delta \equiv \det \alpha + \det \beta + 2 \det \gamma$. Aplicamos o critério PPT em ρ e obtemos $\rho^{\Gamma} \equiv \tilde{\rho}$. De acordo com o critério, $\tilde{\rho} > 0$ implica separabilidade. Mas essa condição pode ser traduzida como

$$\tilde{\nu}_{-} > 1 \Rightarrow \rho^{S}, \tag{1.31}$$

em que denominamos por ρ^S a matriz densidade separável. Acima, $\tilde{\nu}_-$ é dado por $2\tilde{\nu}_-^2 = \tilde{\Delta} - \sqrt{\tilde{\Delta}^2 - 4 \det \sigma} e \tilde{\Delta}(\sigma) = \Delta(\tilde{\sigma}) = \det \alpha + \det \beta - 2 \det \gamma.$

Como, de acordo com [5], $||\tilde{\rho}||=1/\tilde{\nu}_-,$ então

$$E_{\mathcal{N}}(\rho) = max[0, -\ln\tilde{\nu}_{-}]. \tag{1.32}$$

O "max" aparece porque se $\tilde{\nu}_{-} > 1$, então $-\ln(\tilde{\nu}_{-}) < 0$ e, obviamente, emaranhamento negativo carece de significado.

Temos a base necessária e suficiente para estudar o emaranhamento em estados de partículas brownianas.

Capítulo 2

Movimento Browniano de uma partícula

No primeiro capítulo discutimos aspectos intrigantes da teoria quântica da matéria. Tais aspectos são ainda discutidos e explorados cientificamente com o intuito de alcançar um melhor compreendimento das leis naturais. Dentre eles, podemos destacar o postulado da medida, comentado de acordo com a visão de Wigner, Schrödinger e Lalöe [3].

Naquele contexto, comentamos que é mais seguro tomar uma postura cética com respeito a evocar a decoerência para solucionar o paradoxo do gato de Schrödinger. Dizendo de outra forma, parece não fazer pleno sentido entender que a teoria quântica de um ambiente atuando sobre um sistema faça com que tal sistema tenda a se tornar mais clássico. Afinal, sistemas representados por misturas estatísticas de estados quânticos devem, sob essa óptica, continuar sendo chamados de "sistemas quânticos".

Todavia, a existência de sistemas cujo comportamento está de acordo com as teorias de sistemas quânticos abertos é um fato. Sendo ainda mais preciso, não se conhece, experimentalmente, sistemas que possam ser considerados completamente isolados do seu ambiente. Logo, fenômenos como dissipação em mecânica quântica e decoerência têm um papel fundamental em física e merecem um estudo profundo e criterioso, como o que vem sendo feito ao longo das últimas décadas na literatura [18], [6].

Os estudos mais bem sucedidos nesse campo são aqueles que apoiam-se na abordagem conhecida como sistema-mais-reservatório. Em especial pode-se fazer uma modelagem de osciladores harmônicos para as excitações do banho e escolher um acoplamento com o mesmo que reproduza a dinâmica do sistema em alguma circunstância. Por exemplo, o limite de tempos longos e altas temperaturas deve coincidir com um movimento tipo browniano, descrito classicamente pela tradicional equação de Langevin:

$$m\ddot{x} + \eta\dot{x} + U'(x) = F(t),$$
 (2.1)

 com

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

$$\langle F(t)F(t')\rangle = 2\eta k_B T \delta(t-t').$$
 (2.3)

O coeficiente de dissipação é η , a massa é dada por m, U(x) é um potencial e F(t) é um ruído. No espaço de fases, usa-se a equação de Fokker-Planck para tratar sistemas clássicos fora do equilíbrio termodinâmico.

2.1 Dinâmica Clássica

Nesta seção veremos como é construído o modelo do banho de osciladores na abordagem sistema-mais-reservatório [6] e como ele pode ser usado para reproduzir a equação de Langevin [7].

Vamos supor que o sistema composto possa ser descrito pela lagrangeana

$$L = L_s + L_I + L_R + L_{CT}, (2.4)$$

em que

$$L_s = \frac{1}{2}M\dot{q}^2 - V(q), \qquad (2.5)$$

$$L_I = \sum_k C_k q_k q, \tag{2.6}$$

$$L_R = \sum_k \left(\frac{1}{2} m_k \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right)$$
(2.7)

е

$$L_{CT} = \sum_{k} \frac{1}{2} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2,$$
(2.8)

são respectivamente as lagrangeanas do sistema, da interação, do reservatório e do contratermo [18].

As equações clássicas do movimento são obtidas de (2.4) a partir das equações de Euler-Lagrange para o sistema e para o k-ésimo oscilador, assim,

$$M\ddot{q} = -V'(q) + \sum_{k} C_{k}q_{k} - \sum_{k} \frac{C_{k}^{2}}{m_{k}\omega_{k}^{2}}q \qquad (2.9)$$

е

$$m_k \ddot{q}_k = -m_k \omega_k^2 q_k + C_k q. \tag{2.10}$$

Tomando a transformada de Laplace de (2.10), obtemos

$$\tilde{q}_k(s) = \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{sq_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{C_k\tilde{q}(s)}{m_k(s^2 + \omega_k^2)},$$
(2.11)

cuja transformação inversa pode ser substituída em (2.9), resultando em

$$M\ddot{q} + V'(q) + \sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q = \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon - i\infty}^{\epsilon + i\infty} \sum_{k} C_k \left\{ \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{sq_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} \right\} e^{st} ds + \quad (2.12)$$

$$+\sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \frac{\tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds.$$
(2.13)

Podemos agora usar a identidade

$$\frac{1}{s^2 + \omega_k^2} = \frac{1}{m_k} \left\{ 1 - \frac{s^2}{s^2 + \omega_k^2} \right\}$$
(2.14)

e mostrar que o último termo da direita em (2.13) gera dois outros termos, um dos quais cancela exatamente o último termo do lado esquerdo. A equação resultante é

$$M\ddot{q} + V'(q) + \sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon - i\infty}^{\epsilon + i\infty} \frac{s^2 \tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds \qquad (2.15)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} \sum_{k} C_k \left\{ \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{sq_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} \right\} e^{st} ds.$$
(2.16)

Desse modo, vemos que a inclusão de L_{CT} no modelo serve somente para cancelar uma outra contribuição harmônica que apareceria do acoplamento com os osciladores do ambiente. O último termo da esquerda em (2.16) pode ser escrito como

$$\frac{d}{dt} \left\{ \sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon - i\infty}^{\epsilon + i\infty} \frac{s\tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds \right\},\tag{2.17}$$

que, com o teorema da convolução, resulta em

$$\frac{d}{dt} \left\{ \sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos[\omega_k (t - t')] q(t') dt' \right\}.$$
(2.18)

Um reservatório precisa ter dimensão infinita, de tal modo que a energia perdida pelo sistema não retorne em um período de tempo finito. Equivalentemente, precisamos de um contínuo de freqüências permitidas aos osciladores do banho. Substituímos, assim, \sum_k por $\int d\omega$ introduzindo a função espectral $J(\omega)$,

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k).$$
(2.19)

Isso permite escrever

$$\sum_{k} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos[\omega_k(t-t')] = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega(t-t')].$$
(2.20)

A função $J(\omega)$ possui uma interpretação significativa, que nos ajuda a fazer a conexão entre o modelo e a constante fenomenológica de dissipação. Essa função é a parte imaginária da transformada de Fourier da susceptibilidade dinâmica do banho de osciladores, ou seja,

$$J(\omega) = Im\mathcal{F}\left\{-\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\left\langle \left[\sum_{k}C_{k}q_{k}(t),\sum_{k'}C_{k'}q_{k'}(t')\right]\right\rangle\right\}.$$
(2.21)

Se assumirmos que o banho é fracamente perturbado pelo sistema, poderemos tomar a resposta linear do banho, ou seja, $J(\omega)$, como sendo

$$J(\omega) = \eta \omega \theta(\Omega - \omega), \qquad (2.22)$$

em que Ω é uma alta freqüência de corte que fixa a escala de tempo do sistema. Substituindo (2.22) em (2.20), podemos escrever (2.18) como

$$\frac{d}{dt} \int_0^t 2\eta \delta(t - t') q(t') dt' = \eta \dot{q} + 2\eta \delta(t) q(0), \qquad (2.23)$$

em que tomamos o limite $\Omega \to \infty$.

A hipótese de um banho inicialmente em equilíbrio térmico pode ser aplicada ao lado direito da equação (2.16) e, substituindo (2.23) em (2.16), temos, a partir de $t_0 = 0^+$,

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + V'(q) = F(t),$$
 (2.24)

 com

$$\langle F(t) \rangle = 0 \tag{2.25}$$

е

$$\langle F(t)F(t')\rangle = 2\eta k_B T \delta(t-t').$$
 (2.26)

Essa é exatamente a equação de Langevin para o movimento browniano clássico, como escrito em (2.1).

É possível mostrar que um acoplamento com as velocidades dos osciladores do banho, juntamente com uma transformação canônica e uma redefinição dos coeficientes C_k , é capaz de suprimir a necessidade de um contra-termo no modelo [6].

2.2 Dinâmica Quântica

O modelo apresentado na seção anterior baseia-se em uma lagrangeana total do sistema. A partir dela, podemos construir um modelo hamiltoniano equivalente e tornar aplicável o método canônico de quantização. A referência [6] contém detalhes do que aqui será apresentado.

A seguir veremos como descrever sistemas quânticos abertos na prescrição desse modelo usando o formalismo de integração funcional de Feynman [8]. Em seguida, comentaremos como o resultado pode retomar o limite clássico, descrito pela equação de Fokker-Planck. Isso significa que a modelagem quântica preserva as características de um movimento browniano.

O hamiltoniano do sistema composto é dado por

$$H = H_s + H_r + H_{int}, (2.27)$$

em que

$$H_s = \frac{p^2}{2m} + V(q),$$
 (2.28)

$$H_R = \sum_k \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2}{2} q_k^2$$
(2.29)

е

$$H_{i} = \sum_{k} C_{k} q_{k} q + \sum_{k} \frac{C_{k}^{2} q^{2}}{2m_{k} \omega_{k}}.$$
 (2.30)

A partícula browniana quântica tem sua evolução descrita pela matriz densidade $\rho_s(t)$, dada por $\rho_s(t) = Tr_R[\rho(t)]$, sendo $\rho(t)$ a matriz do sistema completo, governada pela equação de Schrödinger para o hamiltoniano completo, H.

A equação de Schrödinger diz que $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$, onde $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$. Assim, como $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$, conclui-se que

$$\rho(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}\rho(0)e^{\frac{iHt}{\hbar}},\tag{2.31}$$

que na representação de coordenadas fica

$$\langle x, R | \rho(t) | y, Q \rangle = \int \int \int \int dx' dy' dR' dQ' K(x, R, t; x', R', 0) \langle x', R' | \rho(0) | y', Q' \rangle K^*(y, Q, t; y', Q', 0),$$
(2.32)

sendo

$$K(x, R, t; x', R', 0) = \langle x, R | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | x', R' \rangle.$$

$$(2.33)$$

É para calcular o propagador acima que será necessária a integração funcional [8], uma vez que

$$K(x, R, t; x', R', 0) = \int \int \mathcal{D}[x] \mathcal{D}[R] \exp(\frac{i}{\hbar} S[x, R]), \qquad (2.34)$$

com S[x, R] sendo a ação calculada com o Lagrangeano que gera o hamiltoniano total.

O operador densidade reduzido é

$$\rho_s(x, y, t) = \int dR \langle x, R | \rho | y, R \rangle, \qquad (2.35)$$

que pode ser colocado em termos das integrais da equação (2.32) e fornece o resultado abaixo, dada a condição inicial separável $\rho(0) = \rho_s(0)\rho_R(0)$,

$$\rho_s(x, y, t) = \int \int dx' dy' J(x, y, t; x', y', 0) \rho_s(x', y', 0).$$
(2.36)

O termo J(x, y, t; x', y', 0) é chamado de superpropagador e governa a dinâmica do operador densidade reduzido.

Explicitamente, o superpropagador pode ser escrito na representação das integrais de caminho como

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^{x} \mathcal{D}x(t') \int_{y'}^{y} \mathcal{D}y(t') \ e^{\frac{i}{\hbar} \left\{ S_0[x(t')] - S_0[y(t')] \right\}} F[x(t'), y(t')],$$
(2.37)

sendo S_0 a ação de partícula isolada e F[x(t'), y(t')] o funcional de influência do banho sobre a partícula.

Dado um reservatório inicialmente em equilíbrio térmico, pode-se mostrar [8] que

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^{x} \mathcal{D}x(t') \int_{y'}^{y} \mathcal{D}y(t') \exp \frac{i}{\hbar} (S_0[x(t')] - S_0[y(t')] - \int_0^t \int_0^\tau [x(\tau) - y(\tau)]$$
(2.38)

$$\times \alpha_I(\tau - s)[x(s) + y(s)]d\tau ds)$$
(2.39)

$$\times \exp{-\frac{1}{\hbar} \int_0^t \int_0^\tau [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_R(\tau - s) [x(s) - y(s)] d\tau ds},$$
 (2.40)

 $\operatorname{com} \alpha_I \in \alpha_R$ dados por

$$\alpha_R(\tau - s) = \sum_k \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \coth \frac{\hbar \omega_k}{2k_B T} \cos \omega_k (\tau - s)$$
(2.41)

е

$$\alpha_I(\tau - s) = \sum_k \frac{C_k^2}{2m_k\omega_k} \sin \omega_k(\tau - s).$$
(2.42)

O artigo [6] apresenta uma argumentação que sugere a introdução da função espectral da seção anterior (2.19) de uma forma bem mais natural. Simplificaremos tal argumentação de forma a deixar claro suas principais idéias.

Suponha que em vez de acoplar o sistema a um reservatório nós postulássemos a ação de uma força clássica externa $F(\tau)$. Se, além disso, considerássemos que $F(\tau)$ não é precisamente conhecida mas sim a distribuição de probabilidades de diferentes trajetórias, $P[F(\tau)]$, teríamos então

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int \mathcal{D}x(t') \int \mathcal{D}y(t') \int \mathcal{D}F \ P[F(\tau)] \times$$
(2.43)

$$\exp\frac{i}{\hbar}\left\{S_0[x] - S_0[y] + \int_0^t [x(\tau) - y(\tau)]F(\tau)d\tau\right\}.$$
 (2.44)

Em especial, se $P[F(\tau)]$ for gaussiana, teremos

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int \mathcal{D}x(t') \int \mathcal{D}y(t') \exp \frac{i}{\hbar} \{S_0[x] - S_0[y]\}$$
(2.45)

$$\times \exp{-\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \int_0^\tau [x(\tau) - y(\tau)] A(\tau - s) [x(s) - y(s)] d\tau ds},$$
(2.46)

em que $A(\tau - s) = \langle F(\tau)F(s) \rangle$.

Comparando (2.46) e (2.40), vemos que $\hbar \alpha_R(\tau - s)$ e $A(\tau - s)$ devem cumprir a mesma tarefa: representar a correlação das forças no regime clássico. Logo, o regime de altas temperaturas em (2.41) deve satisfazer a correlação de forças que atuam numa partícula browniana clássica (2.26). Tomado no limite do contínuo, o limite de altas temperaturas em $\hbar \alpha_R(\tau - s)$ leva em

$$\hbar \alpha_R(\tau - s) \approx \frac{k_B T}{M} \int_0^\infty \rho_D(\omega) \frac{C^2(\omega)}{\omega^2} \cos \omega (\tau - s) d\omega, \qquad (2.47)$$

em que $\rho_D(\omega)$ é uma densidade de freqüência. Ao modelarmos

$$\rho_D(\omega)C^2(\omega) = \frac{2m\eta\omega^2}{\pi}\theta(\Omega-\omega), \qquad (2.48)$$

conseguimos mostrar que

$$\hbar\alpha_R(\tau - s) = \langle F(\tau)F(s) \rangle = 2\eta k_B T \frac{1}{\pi} \frac{\sin\Omega(\tau - s)}{(\tau - s)}, \qquad (2.49)$$

que retoma (2.26) com $\Omega \to \infty$.

Uma generalização é então apresentada, a qual estabelece que

$$\hbar \alpha_R(\tau - s) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega \ \chi_{FF}''(\omega) \coth \frac{\hbar \omega}{2k_B T} \cos \omega(\tau - s), \qquad (2.50)$$

sendo

$$\chi_{FF}''(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{k} \frac{C_k^2}{m\omega_k} \delta(\omega - \omega_k).$$
(2.51)

Reconhecemos esse resultado na função $J(\omega)$, dada por (2.19).

Conhecida a soma existente em $\alpha_R(\tau - s)$ fica fácil resolver a soma em $\alpha_I(\tau - s)$. Com isso, o superpropagador fica completamente definido em termos dos parâmetros fenomenológicos do banho. O cálculo das integrais de Feynman no superpropagador é feito no próximo capítulo.

O limite clássico é retomado no mesmo trabalho [6], considerando-se $2k_BT >$ $\hbar\Omega >> \hbar\omega_R$. Em seguida, é calculada uma equação diferencial para a matriz densidade do sistema de interesse sem a necessidade de resolver o superpropagador. Em termos da transformada de Wigner W e para $\hbar \to 0$, essa equação é escrita como [6]

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{\partial (pW)}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial p} \left[\left(2\gamma p + V'(q) \right) W \right] + D \frac{\partial^2 W}{\partial p^2}, \qquad (2.52)$$

com $D=\eta k_BT.$ A função W(x,p,t) é definida por

$$W(x,p,t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{ipy}{\hbar}\right) \left\langle x - \frac{y}{2}|\rho_s|x + \frac{y}{2}\right\rangle dy.$$
(2.53)

O relação (2.52) é a equação de Fokker-Planck, que, como dissemos, governa densidades de probabilidades do espaço de fases para sistemas clássicos com movimento tipo browniano. A capacidade do modelo de responder às questões a que se propõe fica, portanto, evidenciada.

Capítulo 3

Emaranhamento dinâmico entre uma partícula e o banho

As revisões apresentadas nos dois capítulos anteriores servem de base para atacarmos nosso primeiro problema. Neste capítulo, estaremos interessados em saber como comporta-se o emaranhamento entre o estado de uma partícula browniana e o estado do seu reservatório.

Antes de trabalhar no problema, convém deixar claro o contexto em que ele surge e o motivo de nosso interesse por ele.

Quando estudamos a evolução temporal de um subsistema quântico como aquele modelado na seção anterior, novos fenômenos físicos aparecem. Um deles é a dissipação de energia, ou relaxação de um sistema quântico. O segundo é a perda da superposição coerente entre estados quânticos, conhecida como decoerência. Um estado puro pode evoluir para uma mistura estatística de modo previsível pelo modelo.

Um estudo qualitativo do fenômeno da decoerência é capaz de indicar que a chave desse processo é o surgimento de um estado não-separável entre partícula e banho. Pensamos então que seria válido confirmar tal análise mostrando que de fato o valor de uma medida de emaranhamento entre o sistema e o reservatório cresce com a mesma taxa em que a coerência do sistema é perdida.

Logo, calculamos a evolução temporal do emaranhamento entre a partícula browniana e o banho, para o caso de temperatura nula e sub-amortecimento. A partícula browniana está confinada em um potencial harmônico e é inicialmente preparada em uma superposição de estados gaussianos. Para que esses cálculos sejam possíveis, é necessário rever o cálculo do superpropagador para o potencial escolhido. Antes de aplicar a condição inicial de interesse, revisaremos uma outra condição inicial mais simples, a qual é capaz de apresentar o fenômeno da relaxação de uma partícula quântica.

3.1 Oscilador Harmônico Amortecido

De acordo com [6], um potencial $V(q)=M\omega_0^2q^2/2$ faz com que o superpropagador seja escrito na forma

$$J(x, x', t; y, y', 0) = \int_{x'}^{x} \mathcal{D}x(t') \int_{y'}^{y} \mathcal{D}y(t') \exp \frac{i}{\hbar} \tilde{S}[x(\tau), y(\tau)] \exp -\frac{1}{\hbar} \phi[x(\tau), y(\tau)],$$
(3.1)

em que

$$\tilde{S}[x(\tau), y(\tau)] = \int_0^t \tilde{L}(x, \dot{x}, y, \dot{y}) d\tau - M\gamma \int_0^t (x\dot{x} - y\dot{y}) dt', \qquad (3.2)$$

$$\tilde{L}(x, \dot{x}, y, \dot{y}) = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 - \frac{1}{2}M\dot{y}^2 - \frac{1}{2}M\omega_0^2 x^2 + \frac{1}{2}M\omega_0^2 y^2 - M\gamma x\dot{y} + M\gamma y\dot{x}$$
(3.3)

e

$$\phi[x(\tau), y(\tau)] = \frac{2M\gamma}{\pi} \int_0^\Omega d\nu \ \nu \coth \frac{\hbar\nu}{2k_B T} \times$$
(3.4)

$$\times \int_0^t \int_0^\tau d\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \cos \nu(\tau - \sigma) [x(\sigma) - y(\sigma)] d\tau d\sigma.$$
(3.5)

Como a integral de caminho é gaussiana, ela pode ser resolvida exatamente. Inicialmente, encontramos os caminhos que extremizam \tilde{S} , dados por

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial x} = M\ddot{x}_c + 2M\gamma \dot{y}_c + M\omega_0^2 x_c = 0, \qquad (3.6)$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial y} = M\ddot{y}_c + 2M\gamma \dot{x}_c + M\omega_0^2 y_c = 0.$$
(3.7)

Definindo as variáveis

$$\chi(\tau) \equiv x(\tau) + y(\tau) \qquad e \qquad \xi(\tau) \equiv x(\tau) - y(\tau), \tag{3.8}$$

podemos escrever (3.7) como

$$\ddot{\chi}_c + 2\gamma \dot{\chi}_c + \omega_0^2 \chi_c = 0 \tag{3.9}$$

$$\ddot{\xi}_c - 2\gamma \dot{\xi}_c + \omega_0^2 \xi_c = 0.$$
(3.10)

Com as condições iniciais $\chi(0) = \chi_i, \chi(t) = \chi_f, \xi(0) = \xi_i \in \xi(t) = \xi_f$, a solução dessas equações podem ser escritas na forma

$$\chi_c(t) = (\sin \omega t)^{-1} [\chi_f e^{\gamma t} \sin \omega \tau + \chi_i \sin \omega (t - \tau)] e^{-\gamma \tau}$$
(3.11)

$$\xi_c(t) = (\sin \omega t)^{-1} [\xi_f e^{-\gamma t} \sin \omega \tau + \xi_i \sin \omega (t-\tau)] e^{\gamma \tau}, \qquad (3.12)$$

com $\omega \equiv \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}$ para $\gamma < \omega_0$.

Pode-se mostrar que, definindo $\tilde{\chi}(\tau) \equiv \chi(\tau) - \chi_c(\tau)$ e $\tilde{\xi}(\tau) \equiv \xi(\tau) - \xi_c(\tau)$, o superpropagador resulta em

$$J(\chi_f, \xi_f, t; \chi_i, \xi_i, 0) = G(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\tilde{S}_c\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar}(A(t)\xi_f^2 + B(t)\xi_f\xi_i + C(t)\xi_i^2)\right).$$
(3.13)

Na equação acima temos

$$\tilde{S}_c = K(t)[\chi_f \xi_f + \chi_i \xi_i] - L(t)\chi_i \xi_f - N(t)\chi_f \xi_i - M\gamma[\chi_f \xi_f - \chi_i \xi_i]$$
(3.14)

em que

$$K(t) = M\omega \cot \omega t, \quad L(t) = \frac{M\omega e^{-\gamma t}}{\sin \omega t} \quad e \quad N(t) = \frac{M\omega e^{\gamma t}}{\sin \omega t}.$$
 (3.15)

As funções A(t), B(t) e C(t) possuem todas a forma

$$\ell(t) = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\Omega d\nu \ \nu \coth \frac{\hbar\nu}{2k_B T} \ell_\nu(t), \qquad (3.16)$$

em que

$$A_{\nu}(t) = \frac{e^{-2\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega \tau \cos \nu (\tau - \sigma) \sin \omega \sigma e^{\gamma(\tau + \sigma)} d\tau d\sigma, \qquad (3.17)$$

$$B_{\nu}(t) = \frac{2e^{-2\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega \tau \cos \nu (\tau - \sigma) \sin \omega (t - \sigma) e^{\gamma (\tau + \sigma)} d\tau d\sigma, \qquad (3.18)$$

$$C_{\nu}(t) = \frac{1}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega (t-\tau) \cos \nu (\tau-\sigma) \sin \omega (t-\sigma) e^{\gamma(\tau+\sigma)} d\tau d\sigma.$$
(3.19)

Conhecido o superpropagador podemos calcular a evolução temporal da matriz densidade para uma condição inicial específica. Teremos adiante uma seção dedicada a cada condição inicial de interesse: um estado gaussiano e uma superposição de dois pacotes gaussianos.

3.1.1 Evolução temporal para um pacote gaussiano

Como mostramos no capítulo anterior, podemos calcular a evolução temporal da matriz densidade do sistema de interesse usando

$$\rho_s(x_f, y_f, t) = \int \int J(x_f, y_f, t; x_i, y_i, 0) \rho_s(x_i, y_i, 0) dx_i dy_i.$$
(3.20)

Alternativamente, podemos expressar (3.20) em função das novas variáveis, usadas na seção anterior. Para fazer tal mudança de variáveis, devemos atentar para o Jacobiano da transformação, dado por

$$\left|\frac{\partial x}{\partial \xi}\frac{\partial y}{\partial \chi} - \frac{\partial x}{\partial \chi}\frac{\partial y}{\partial \xi}\right| = \frac{1}{2}.$$
(3.21)

Logo, teremos

$$\rho_s(\chi_f, \xi_f, t) = \int \int J(\chi_f, \xi_f, t; \chi_i, \xi_i, 0) \rho_s(\chi_i, \xi_i, 0) \frac{1}{2} d\chi_i d\xi_i.$$
(3.22)

Um estado gaussiano puro centrado em $x_0 = 0$ e com momento médio inicial p tem a função de onda

$$\psi(x') = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{(1/4)}} \exp\frac{ipx'}{\hbar} \exp\frac{-x'^2}{4\sigma^2}.$$
(3.23)

A matriz densidade inicial é, portanto, $\rho_s(x,y) = \psi(x)\psi^*(y)$. Em termos das novas variáveis

$$\rho_s(\chi_i, \xi_i, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{(1/2)}} \exp \frac{ip\xi_i}{\hbar} \exp -\frac{\chi_i^2}{2\sigma^2} \exp -\frac{\xi_i^2}{8\sigma^2}.$$
 (3.24)

Substituindo (3.24) em (3.22) e usando (3.13), pode-se mostrar que

$$\rho_s(\chi_f, \xi_f, t) = \frac{G(t)}{2} \sqrt{\frac{\pi\hbar^2}{\sigma^2 K_1(t) + \hbar C_1(t)}} \exp{-\frac{N^2(t)}{2\sigma^2 K_1^2(t) + 4\hbar C_1(t)}} \left(\chi_f - \frac{p}{N(t)}\right)^2 \tag{3.25}$$

$$\times \exp -\left(\frac{A(t)}{\hbar} + \frac{\sigma^2 L^2(t)}{2\hbar^2} - \frac{(\sigma^2 K_1(t)L(t) - \hbar B(t))^2}{\hbar^2 (2\sigma K_1^2(t) + 4\hbar C_1(t))}\right)\xi_f^2$$
(3.26)

$$\times \exp \frac{i}{\hbar} \left(K_2(t) \chi_f \xi_f - \frac{(\sigma^2 K_1(t) L(t) - \hbar B(t)) N(t)}{(\sigma^2 K_1^2(t) + 2\hbar C_1(t))} \left(\chi_f - \frac{p}{N(t)} \right) \xi_f \right), \qquad (3.27)$$

em que

$$C_1(t) \equiv C(t) + \frac{\hbar}{8\sigma^2}, \quad K_1(t) \equiv K(t) + M\gamma \quad e \quad K_2(t) \equiv K(t) - M\gamma.$$
 (3.28)

Os elementos diagonais são encontrados fazendo $\xi_f = 0$ e descrevem a evolução temporal da densidade de probabilidade associada à partícula. Como $\rho_s(\chi_f, 0, t) = \rho_s(x, x, t)$, temos que

$$\rho_s(x, x, t) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2(t)}\right)^{1/2} \exp{-\frac{1}{2\sigma^2(t)}(x - x_0(t))^2},$$
(3.29)

sendo que a evolução temporal do centro do pacote é identificada por $x_0(t)$, dada por

$$x_0(t) = \frac{p}{M\omega} \sin \omega t e^{-\gamma t} \quad com \quad \omega = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}.$$
 (3.30)

Note que essa é a trajetória da partícula clássica equivalente.

3.1.2 Evolução temporal para superposição de dois pacotes

Lidaremos agora com a função de onda inicial assumida em [9]. A superposição de dois pacotes gaussianos pode ser escrita como

$$\rho_s(0) = |\psi\rangle\langle\psi|,\tag{3.31}$$

em que

$$|\psi\rangle = \mathcal{N}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle). \tag{3.32}$$

Na equação acima, estamos supondo o segundo pacote centrado na origem e o primeiro em z:

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

$$\langle x|\psi_2 \rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x)^2}{4\sigma^2}}.$$
 (3.33)

Substituindo (3.33) em (3.31), temos

$$\rho_s(x, y, 0) = \mathcal{N}^2(\rho_1(x, y, 0) + \rho_2(x, y, 0) + \rho_{int}(x, y, 0)), \qquad (3.34)$$

 sendo

$$\rho_1(x, y, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} e^{-\frac{(x-z)^2 + (y-z)^2}{4\sigma^2}},$$

$$\rho_2(x, y, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} e^{-\frac{(x)^2 + (y)^2}{4\sigma^2}},$$

$$\rho_{int}(x, y, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \left(e^{-\frac{(x)^2 + (y-z)^2}{4\sigma^2}} + e^{-\frac{(x-z)^2 + (y)^2}{4\sigma^2}} \right).$$
(3.35)

Observando (3.20), é fácil notar que a evolução de (3.34) é a soma das evoluções temporais de cada termo. A seguir mostramos os principais passos para descobrir $\rho_1(\chi_f, \xi_f, t), \rho_2(\chi_f, \xi_f, t) \in \rho_{int}(\chi_f, \xi_f, t).$

O primeiro passo é escrever as condições iniciais nas novas variáveis, $\chi=x+y$ e $\xi=x-y,$ que são

$$\rho_1(\chi_i, \xi_i, 0) = \frac{e^{-\frac{z^2}{2\sigma^2}}}{(2\pi\sigma^2)^{(1/2)}} e^{-\frac{\chi^2 + \xi^2}{8\sigma^2} + \frac{\chi_i z}{2\sigma^2}},$$
(3.36)

$$\rho_2(\chi_i, \xi_i, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{(1/2)}} e^{-\frac{\chi^2 + \xi^2}{8\sigma^2}}$$
(3.37)

е

$$\rho_{int}(\chi_i,\xi_i,0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\left(\frac{1}{2}\right)}} \left(e^{-\frac{1}{4\sigma^2} \left(\frac{\chi_i^2}{2} + \frac{\xi_i^2}{2} - z(\chi_i - \xi_i) + z^2\right)} + e^{-\frac{1}{4\sigma^2} \left(\frac{\chi_i^2}{2} + \frac{\xi_i^2}{2} - z(\chi_i + \xi_i) + z^2\right)} \right).$$
(3.38)

O passo seguinte é aplicá-las a (3.22), o que deve ser implementado usando-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 + bx + c} dx = e^c \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{b^2}{4a}},$$
(3.39)
dado que somente integrações desse tipo estão envolvidas.

As contas envolvem vários termos e os passos intermediários ocupam espaço excessivo para serem aqui detalhados. O resultado das operações é mostrado abaixo.

$$\rho_1(\chi_f, \xi_f, t) = \frac{\pi \hbar G(t)}{N(t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}} e^{-(\frac{A}{\hbar} + \frac{2\sigma^2 L^2}{\hbar^2})\xi_f^2 + \frac{i}{\hbar}(K_2\chi_f - 2Lz)\xi_f} e^{\frac{1}{2\sigma(t)^2 N(t)^2}((\frac{2\sigma^2 K_1 L}{\hbar} - \frac{B}{2})\xi_f + i(zK_1 - \frac{N}{2}\chi_f))^2};$$
(3.40)

$$\rho_{2}(\chi_{f},\xi_{f},t) = \frac{\pi\hbar G(t)}{N(t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^{2}(t)}} e^{-(\frac{A}{\hbar} + \frac{2\sigma^{2}L^{2}}{\hbar^{2}})\xi_{f}^{2} + \frac{i}{\hbar}(K_{2}\chi_{f})\xi_{f}}}{e^{\frac{1}{2\sigma(t)^{2}N(t)^{2}}((\frac{2\sigma^{2}K_{1}L}{\hbar} - \frac{B}{2})\xi_{f} - i(\frac{N}{2}\chi_{f}))^{2}}};$$
(3.41)

$$\rho_{int}(\chi_f,\xi_f,t) = \frac{\pi\hbar G(t)}{N(t)} e^{-\frac{z^2}{8\sigma^2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}} e^{-\frac{A}{\hbar}\xi_f^2 + \frac{i}{\hbar}K_2\chi_f\xi_f - \frac{2\sigma^2 L^2\xi_f^2}{\hbar^2} - \frac{i}{\hbar}zL\xi_f} \\ \left(e^{\frac{\hbar^2\beta^2(\xi_f)}{4(\hbar C_1 + 2\sigma^2 K_1^2)}} + e^{\frac{\hbar^2\tilde{\beta}^2(\xi_f)}{4(\hbar C_1 + 2\sigma^2 K_1^2)}}\right).$$
(3.42)

Nas equações acima, as funções ainda não definidas são $\sigma^2(t)$, $\beta(\xi_f) \in \tilde{\beta}(\xi_f)$:

$$\sigma^{2}(t) \equiv \frac{1}{2} \frac{2\sigma^{2} K_{1}^{2}(t) + \hbar C_{1}(t)}{N^{2}(t)}, \qquad (3.43)$$

$$\beta(\xi_f) \equiv \left(\frac{4\sigma^2 L(t)K_1(t)}{\hbar^2} - \frac{B(t)}{\hbar}\right)\xi_f + \left(\frac{i}{\hbar}(zK_1(t) - N(t)\chi_f) - \frac{z}{4\sigma^2}\right),$$
$$\tilde{\beta}(\xi_f) \equiv \left(\frac{4\sigma^2 L(t)K_1(t)}{\hbar^2} - \frac{B(t)}{\hbar}\right)\xi_f + \left(\frac{i}{\hbar}(zK_1(t) - N(t)\chi_f) + \frac{z}{4\sigma^2}\right). \quad (3.44)$$

Até aqui, somente a normalização da matriz densidade inicial foi mencionada. Ainda que mencionada, ela não foi calculada. No entanto, com a introdução da função G(t), pertencente ao superpropagador, ficamos sem informação da normalização da matriz densidade completa. Para solucionar esse ponto vamos normalizar a matriz densidade $\rho_s(t)$, encontrando $\tilde{\rho}_s(t)$, em que

$$\tilde{\rho}_s(t) = \frac{1}{Tr[\rho_s(t)]} \rho_s(t). \tag{3.45}$$

Escrito nas variáveis contínuas anteriores, teríamos uma soma dos elementos diagonais, x = y:

$$Tr[\rho(t)] \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, x, t) dx.$$
(3.46)

Nas novas variáveis, a condição x = y implica $\xi = 0$ e $\chi = 2x$. Obviamente, $d\chi = 2dx$. Resolvemos novamente as integrais gaussianas e encontramos

$$Tr[\rho_s(t)] = \mathcal{N}^2(Tr[\rho_1(t)] + Tr[\rho_2(t)] + Tr[\rho_{int}(t)]), \qquad (3.47)$$

 sendo

$$Tr[\rho_1(t)] = Tr[\rho_2(t)] = \frac{\pi\hbar G(t)}{N(t)}$$
 (3.48)

е

$$Tr[\rho_{int}(t)] = \frac{\pi \hbar G(t)}{N(t)} 2e^{-\frac{z^2}{8\sigma^2}}.$$
(3.49)

Logo, os termos desconhecidos G(t) e \mathcal{N}^2 cancelam-se e ficamos com

$$\tilde{\rho}_s(\chi_f, \xi_f, t) = \frac{1}{2 + 2e^{-\frac{z^2}{8\sigma^2}}} (\tilde{\rho}_1(\chi_f, \xi_f, t) + \tilde{\rho}_2(\chi_f, \xi_f, t) + \tilde{\rho}_{int}(\chi_f, \xi_f, t)).$$
(3.50)

Os termos acima são dados por

$$\tilde{\rho}_{1}(\chi_{f},\xi_{f},t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^{2}(t)}} e^{-(\frac{A}{\hbar} + \frac{2\sigma^{2}L^{2}}{\hbar^{2}})\xi_{f}^{2} + \frac{i}{\hbar}(K_{2}\chi_{f} - 2Lz)\xi_{f}} e^{\frac{1}{2\sigma(t)^{2}N(t)^{2}}((\frac{2\sigma^{2}K_{1}L}{\hbar} - \frac{B}{2})\xi_{f} + i(zK_{1} - \frac{N}{2}\chi_{f}))^{2}};$$
(3.51)

$$\tilde{\rho}_{2}(\chi_{f},\xi_{f},t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^{2}(t)}} e^{-(\frac{A}{\hbar} + \frac{2\sigma^{2}L^{2}}{\hbar^{2}})\xi_{f}^{2} + \frac{i}{\hbar}(K_{2}\chi_{f})\xi_{f}}}{e^{\frac{1}{2\sigma(t)^{2}N(t)^{2}}((\frac{2\sigma^{2}K_{1}L}{\hbar} - \frac{B}{2})\xi_{f} - i(\frac{N}{2}\chi_{f}))^{2}}};$$
(3.52)

$$\tilde{\rho}_{int}(\chi_f,\xi_f,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}} e^{-\frac{z^2}{8\sigma^2}} e^{-\frac{A}{\hbar}\xi_f^2 + \frac{i}{\hbar}K_2\chi_f\xi_f - \frac{2\sigma^2 L^2\xi_f^2}{\hbar^2} - \frac{i}{\hbar}zL\xi_f} \\ \left(e^{\frac{\hbar^2\beta^2(\xi_f)}{4(\hbar C_1 + 2\sigma^2 K_1^2)}} + e^{\frac{\hbar^2\tilde{\beta}^2(\xi_f)}{4(\hbar C_1 + 2\sigma^2 K_1^2)}} \right).$$
(3.53)

A partir da matriz densidade que acabamos de calcular, podemos rever o principal resultado do trabalho [9]. O referido resultado é a supressão do termo de interferência, o qual surge da superposição dos dois pacotes gaussianos. Em outras palavras, revisaremos o estudo sobre a decoerência nesse sistema.

Em [9] é mostrado que a densidade de probabilidade $\tilde{\rho}_s(x,t)$ é dada por

$$\tilde{\rho}_s(x,t) = \tilde{\rho}_1(x,t) + \tilde{\rho}_2(x,t) + \tilde{\rho}_{int}(x,t), \qquad (3.54)$$

em que

$$\tilde{\rho}_{int}(x,t) = 2\sqrt{\tilde{\rho}_1(x,t)}\sqrt{\tilde{\rho}_2(x,t)}\cos\phi(x,t)\exp-f(t), \qquad (3.55)$$

sendo $\phi(x,t)$ uma função que determina o padrão de interferência e $\exp -f(t)$ um fator de atenuação para a intensidade desse padrão.

O fator de atenuação fica escrito como

$$f(t) = \frac{z^2}{8\sigma^2} \frac{\alpha I_R(\theta)}{Q(\theta)},\tag{3.56}$$

em que z é a distância inicial entre os centros dos pacotes, $\alpha = \gamma/\omega_0$, $\theta = \omega_0 t$ e

$$I_R(\theta) = \frac{4}{\pi} \int_0^{\lambda_c} d\lambda \ \lambda C_R(\theta, \lambda) \coth(\kappa\lambda); \quad Q(\theta) = 1 + \alpha I_R(\theta) + (\alpha + S \cot S\theta)^2, \ (3.57)$$

$$C_R(\theta,\lambda) = \frac{1}{\sin^2 S\theta} \int_0^\theta \int_0^\theta \sin[S(\theta-\theta_1)] \cos[\lambda(\theta_1-\theta_2)] \sin[S(\theta-\theta_2)]$$
(3.58)

$$\times \exp[\alpha(\theta_1 + \theta_2)]d\theta_1\theta_2. \tag{3.59}$$

Acima temos também $S = \omega/\omega_0$, $\lambda_c = \Omega/\omega_0$ e $\kappa = (\hbar\omega_0)/(2k_BT)$. É interessante perceber que $f(0) \to 0$ e $f(\infty) \to 1$.

Ganhamos uma melhor visualização do efeito de decoerência quando aproximamos

$$\exp -f(t) \approx \exp -\Gamma t \tag{3.60}$$

e, quando a dissipação é fraca $\gamma \ll \omega_0$ e a temperatura é baixa $\kappa >> 1$, a taxa de decoerência Γ toma a forma

$$\Gamma = N\gamma, \tag{3.61}$$

em que $N \equiv z^2/4\sigma^2$.

Com isso, mostra-se que para dissipação fraca e baixas temperaturas, a taxa de decoerência, $N\gamma$, é muito maior que a taxa de relaxação da partícula, γ , se prepararmos os pacotes relativamente afastados N >> 1.

Ainda no mesmo trabalho [9] é feita uma análise do resultado acima como esboçamos a seguir. É suposto que o estado inicial do sistema composto seja

$$|\phi_i\rangle \approx [|\psi_0\rangle + |\psi_z\rangle] \otimes |0\rangle, \qquad (3.62)$$

em que $|\psi_0\rangle + |\psi_z\rangle$ é o estado inicial do sistema e $|0\rangle$ é o estado fundamental do banho, considerado à temperatura nula inicialmente. Além disso, como $|\psi_z\rangle$ é deslocado da origem, o estado inicial da partícula contém uma energia média próxima de N quantas.

Após um tempo $\tau\approx\gamma^{-1}$ o sistema composto estará no estado

$$|\phi_f\rangle \approx |\psi_0\rangle \otimes |N\rangle,\tag{3.63}$$

sendo $|N\rangle$ o estado do reservatório contendo N quantas de energia $\hbar\omega_0$.

Como N quantas são perdidos num tempo τ , cada quanta deve ser perdido num tempo τ/N . Nesse instante, o pacote afastado da origem percorreu uma certa distância e, por atrito, perdeu o quanta para o sistema. Logo, o estado do sistema composto é

$$|\phi_1\rangle \approx |\tilde{\psi}_z\rangle \otimes |1\rangle + |\tilde{\psi}_0\rangle \otimes |0\rangle. \tag{3.64}$$

Pela ortogonalidade de $|0\rangle$ e $|1\rangle$ pode-se calcular o operador densidade reduzido,

$$\tilde{\rho}_s = Tr_R[|\phi_1\rangle\langle\phi_1|] = |\tilde{\psi}_z\rangle\langle\tilde{\psi}_z| + |\tilde{\psi}_0\rangle\langle\tilde{\psi}_0|, \qquad (3.65)$$

que é uma mistura estatística.

Note que a análise conta com o estado (3.64), que é não-separável entre o banho e a partícula. Logo, é natural estudar o emaranhamento bipartite nesse sistema e mostrar que, de fato, ele é criado com uma taxa igual a da decoerência, $\Gamma = N\gamma$. Os resultados desse estudo são apresentados na próxima seção.

3.2 Evolução temporal da concorrência generalizada

No primeiro capítulo tomamos contato com a concorrência generalizada, que mostra-se capaz de parametrizar o grau de não-separabilidade de um estado [4]. No limite de temperatura nula, sob o qual o operador densidade do sistema composto torna-se puro, e para um sistema bipartite de dimensão $N \otimes N$ temos

$$C_N(t) = \sqrt{\frac{N}{N-1} (1 - Tr[\tilde{\rho}_s^2(t)])}.$$
(3.66)

Como tanto o sistema quanto o reservatório são osciladores harmônicos, teremos infinitos níveis de energia para ambos e, assim, $N \to \infty$. Ou seja, $\frac{N}{N-1} \to 1$.

De modo geral, temos $Tr[\rho_s^2]$ na representação de coordenadas dado por

$$Tr[\rho_s^2(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \chi' | \rho_s(t) | \xi' \rangle \langle \xi' | \rho_s(t) | \chi' \rangle d\chi' d\xi'.$$
(3.67)

A partir da expressão da matriz densidade (3.50), podemos efetuar o cálculo do $Tr[\rho_s^2]$ para o nosso sistema de interesse, que terá a forma

$$Tr[\rho^{2}(t)] = \frac{1}{4(1+e^{-z^{2}/8\sigma^{2}})^{2}} [Tr[\rho_{1}^{2}(t)] + Tr[\rho_{2}^{2}(t)] + Tr[\rho_{int}^{2}(t)]$$
(3.68)

$$+2(Tr[\rho_1(t)\rho_2(t)] + Tr[\rho_1(t)\rho_{int}(t)] + Tr[\rho_2(t)\rho_{int}(t)])].$$
(3.69)

Pode-se mostrar que $Tr[\rho_1^2] = Tr[\rho_2^2] e Tr[\rho_1\rho_{int}] = Tr[\rho_2\rho_{int}]$. Com isso simplificase a expressão (3.69) para

$$Tr[\rho^{2}(t)] = C[2Tr[\rho_{1}^{2}] + 2Tr[\rho_{1}\rho_{2}] + 4Tr[\rho_{1}\rho_{int}] + Tr[\rho_{int}^{2}]], \qquad (3.70)$$

com $C^{-1} = (4(1 + \exp{-(z^2/8\sigma^2)})^2).$

Como as expressões envolvem integrações gaussianas, os passos intermediários são demasiado extensos para serem mostrados aqui. Os resultados dessas integrações são apresentados no $ap\hat{e}ndice A$.

Adiante está mostrado o gráfico da concorrência generalizada pelo tempo. Para que tal gráfico fosse construído, assumimos valores experimentais típicos para os parâmetros do nosso modelo. Tais valores são [10]

$$\omega_0 \approx 10^7 Hz \qquad e \qquad M \approx 10^{-25} Kg. \tag{3.71}$$

Além disso escolhemos $\gamma \approx 10^2 Hz$ e $z \approx 12\sigma$, lembrando que $N \equiv z^2/4\sigma^2$.



Figura 3.1: Concorrência Generalizada $C(\theta)$ como função do tempo $\theta = \omega_0 t$.



A figura (3.1) mostra a dinâmica do emaranhamento numa faixa de valores compatível com nossas aproximações [9]: $\alpha \ll 1$, $\theta \gg 1$ e ($\alpha \theta$) $\ll 1$, em que essas constantes foram definidas em (3.56). Note que, de fato, $0 \leq C_N(t) \leq 1$.

A concorrência oscila com a mesma frequência do oscilador harmônico entre o valor máximo e uma função que cresce exponencialmente até o valor assintótico 0.7. Podemos interpretar essa coexistência de um padrão oscilatório com um crescimento monotônico da forma a seguir. No termo de interferência existe uma função " $\cos[\phi(x,t)]$ " multiplicando uma função " $\exp(-f(t))$ ". A primeira função estaria presente ainda que a constante dissipativa fosse nula; a exponencial, não. No entanto, a cada oscilação da partícula, o cosseno passa por um zero, fazendo com que o termo de interferência se anule e é claro que isso nada tem a ver com a atuação do reservatório no sistema quântico. Logo, o único termo que carrega a informação sobre a correlação quântica entre o sistema e o banho é o termo que cresce monotonicamente. Uma medida mais adequada de emaranhamento deve ser capaz de ignorar o efeito oscilatório. Se compararmos a escala de tempo de aumento do emaranhamento com a de queda da coerência da superposição entre os pacotes, encontramos que elas são aproximadamente as mesmas $\omega_0 \tau \approx 2500$. O gráfico (3.2) mostra a pureza \mathcal{P} , ou coerência da superposição, $\mathcal{P}(t) = e^{-\Gamma t}, \tau \approx \Gamma^{-1} = (N\gamma)^{-1}$.

Fica claro, dessa forma, que de fato a presença da decoerência no nosso sistema de interesse está intimamente relacionada a uma não-separabilidade com o reservatório.

Esse resultado nos remete a um trabalho recente [11], em que os autores demonstram duas conclusões. A primeira é que existe uma grande classe de estados iniciais para os quais nenhum emaranhamento é criado entre o sistema e o meio. A segunda é que se o estado inicial é gaussiano puro, emaranhamento é criado imediatamente, independente da temperatura do banho e do acoplamento não-nulo.

O nosso sistema é diferente daqueles estudados em [11], uma vez que ele emaranhase com o meio e não é gaussiano, mas sim uma combinação de estados gaussianos inicialmente puros.

O fato de termos entendido a decoerência do sistema de interesse como reflexo de uma correlação não-separável com o banho nos leva a inferir que a referida classe de estados que não se emaranha com o banho em [11] deve manter sua coerência em todo o tempo. Ou seja, não devemos esperar decoerência em um sistema que não se emaranha com o meio.

Antes de finalizar os estudos com uma partícula browniana, vamos apresentar o gráfico que nos dá indício de que a escala de tempo de decoerência interna de um pacote gaussiano, dada por $\mathcal{P}_1 \equiv Tr[\rho_1^2(t)]$, é da ordem de γ^{-1} .

Esse resultado está aqui apresentado por dois motivos simples. Seu cálculo está contido nos estágios intermediários que levam ao resultado da concorrência. Além disso, ele possui um significado físico de interesse: o processo de decoerência ocorrendo sob outra condição, a de um único pacote gaussiano.

O gráfico mostra que a escala de tempo de queda da pureza do pacote gaussiano $\tau_{\rho_1^2}$ é da ordem de $\tau_{\rho_1^2} \approx 50000 \approx N \tau_{concorrencia}$, dado que $N \approx 20$ e $\tau_{concorrencia} = (N\gamma)^{-1} \approx 2500$. Logo, estimamos graficamente $\tau_{\rho_1^2} \approx \gamma^{-1}$.

O resultado nos parece razoável se pensarmos que os únicos parâmetros que afetariam, em princípio, essa escala de tempo seriam a temperatura T e a frequência do



Figura 3.3: Decoerência interna de um pacote gaussiano

oscilador ω_0 . Como a temperatura é nula e a dissipação é fraca, nem T nem ω_0 devem aparecer nessa escala de tempo que deve ser, portanto, da ordem de γ^{-1} .

Capítulo 4

Movimento Browniano de duas partículas

Entramos agora em um segundo estágio da pesquisa. Diferentemente do capítulo anterior, estaremos interessados em estudar o emaranhamento entre duas partículas brownianas quânticas em um meio dissipativo. Esse era exatamente o objetivo inicial do projeto.

A motivação para essa questão surge da seguinte pergunta: é possível que um reservatório crie ou mantenha emaranhamento entre dois subsistemas ou ele é responsável somente por perda de coerência e de energia? Em caso de resposta positiva para a primeira alternativa, quais as condições necessárias e quanto emaranhamento seria criado?

Antes de apresentar nossos principais resultados para o problema, precisamos apresentar uma revisão da teoria que generaliza o movimento browniano para duas partículas [12, 14]. Ela servirá de base para modelarmos nosso movimento browniano quântico.

Primeiramente, mostraremos neste capítulo a revisão de um novo modelo para uma partícula browniana. Com ele, a generalização para duas partículas, feita em [14], torna-se bem natural. No capítulo seguinte, desenvolveremos o cálculo da matriz densidade para tais partículas e, com ela, mostraremos como comporta-se o emaranhamento nesse sistema.

4.1 Equação de movimento para uma partícula

O novo modelo supõe uma lagrangeana na forma [12, 14]

$$L = L_S + L_R + L_I, \qquad L_S = \frac{1}{2}M\dot{x}^2, \\ L_R = \frac{1}{2}\sum_k m_k (\dot{R}_k \dot{R}_{-k} - \omega_k^2 R_k R_{-k}), \quad L_I = -\sum_k \tilde{C}_k(x)\dot{R}_k.$$
(4.1)

O acoplamento com velocidade deve-se ao fato de que esse procedimento dispensa contratermo [7]. Se encontramos a hamiltoniana equivalente a (4.1), podemos fazer uma transformação canônica [12], $x \to x$, $P \to P$, $p_k \to m_k \omega_k R_k \in R_k \to p_k/(m_k \omega_k)$, e encontrar a hamiltoniana em que o acoplamento é com a coordenada R_k . Essa hamiltoniana permite conhecermos a nova lagrangeana:

$$L = \frac{1}{2}M\dot{x}^{2} + \frac{1}{2}\sum_{k}m_{k}(\dot{R}_{k}\dot{R}_{-k} - \omega_{k}^{2}R_{k}R_{-k}) - \frac{1}{2}\sum_{k}(C_{-k}(x)R_{k} + C_{k}(x)R_{-k}) - \sum_{k}\frac{C_{k}(x)C_{-k}(x)}{2m_{k}\omega_{k}^{2}}.$$
(4.2)

As equações clássicas de movimento para o sistema e para o "(-k)-ésimo" oscilador podem ser obtidas da lagrangeana acima de acordo com a condição de Euler-Lagrange:

$$M\ddot{x} + \frac{1}{2}\sum_{k} \left(\frac{\partial C_{-k}(x)}{\partial x}R_{k} + \frac{\partial C_{k}(x)}{\partial x}R_{-k}\right) + \sum_{k}\frac{1}{2m_{k}\omega_{k}^{2}}\left(\frac{\partial C_{-k}(x)}{\partial x}C_{k}(x) + \frac{\partial C_{k}(x)}{\partial x}C_{-k}(x)\right) = 0$$

$$(4.3)$$

е

$$m_k \ddot{R}_{-k} + C_{-k}(x) + \omega_k^2 R_{-k} = 0.$$
(4.4)

A invariância translacional na ausência de potencial já era uma propriedade do modelo com acoplamento linear. Para que isso se mantenha no presente modelo, podemos definir $C_k(x) = \kappa_k e^{ikx}$. Assim, se a partícula for deslocada de uma distância d, por exemplo, o acoplamento transforma-se em

$$C_{-k}(x+d)R_k = C_{-k}(x)e^{-ikd}R_k,$$
(4.5)

o que permite definir as novas variáveis do reservatório como

$$\tilde{R}_k = e^{-ikd} R_k, \tag{4.6}$$

mantendo a lagrangeana em (4.2) invariante, dada a forma simetrizada em k. Outra propriedade vantajosa proporcionada pelo acoplamento exponencial é que a contribuição do contratermo à equação de movimento é identicamente nula, uma vez que o último termo em (4.2) torna-se uma constante. Assim, o contratermo é desnecessário no modelo.

Ainda seguindo os passos da referência [12], temos que a equação (4.4) pode ser resolvida pela transformada de Laplace e substituída em (4.3). Pode-se mostrar que a equação resultante desse procedimento é

$$\begin{split} M\ddot{x} + \sum_{k} \frac{1}{2m_{k}\omega_{k}^{2}} \int_{0}^{t} \left(\frac{\partial C_{-k}[x(t)]}{\partial x(t)} \frac{\partial C_{k}[x(t')]}{\partial x(t')} + \frac{\partial C_{k}[x(t)]}{\partial x(t)} \frac{\partial C_{-k}[x(t')]}{\partial x(t')} \right) \cos \omega_{k}(t-t')\dot{x}(t')dt' \\ = -\frac{1}{2} \sum_{k} \frac{\partial C_{-k}(x)}{\partial x} \left[\left(R_{k}(0) + \frac{C_{k}(x_{0})}{m_{k}\omega_{k}^{2}} \right) \cos \omega_{k}t + \frac{\dot{R}_{k}(0)}{\omega_{k}} \sin \omega_{k}t \right] + \sum_{k} \frac{C_{k}(x)}{2m_{k}\omega_{k}^{2}} \frac{\partial C_{-k}(x)}{\partial x} \frac{(4.8)}{(4.8)} \\ -\frac{1}{2} \sum_{k} \frac{\partial C_{k}(x)}{\partial x} \left[\left(R_{-k}(0) + \frac{C_{-k}(x_{0})}{m_{k}\omega_{k}^{2}} \right) \cos \omega_{k}t + \frac{\dot{R}_{-k}(0)}{\omega_{k}} \sin \omega_{k}t \right] + \sum_{k} \frac{C_{-k}(x)}{2m_{k}\omega_{k}^{2}} \frac{\partial C_{k}(x)}{\partial x} \frac{(4.9)}{\omega_{k}} \\ \end{split}$$

Substituindo a forma já especificada de $C_k(x)$, temos

$$M\ddot{x} + \sum_{k} \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos k [x(t) - x(t')] \cos \omega_k (t - t') \dot{x}(t') dt' = F(t)$$
(4.10)

em que

$$F(t) = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\sum_{k} \left(C_{-k}(x)\tilde{R}_{k}(0) + C_{k}(x)\tilde{R}_{-k}(0) \right) \cos\omega_{k}t$$

$$(4.11)$$

+
$$\left(C_{-k}(x)\dot{R}_{k}(0) + C_{k}(x)\dot{R}_{-k}(0)\right)\frac{\sin\omega_{k}t}{\omega_{k}}.$$
 (4.12)

e $\tilde{R}_k = R_k + (\kappa_k e^{ikx_0}/m_k \omega_k^2)$. O termo F(t) é uma força flutuante que depende das condições iniciais impostas ao sistema.

O termo dissipativo em (4.10) pode ser encontrado se aplicarmos procedimento análogo ao do caso de acoplamento linear, transformando a soma em uma integral

$$TD \longmapsto \sum_{k} \int_{0}^{\infty} d\omega \ 2k^{2} \kappa_{k} \kappa_{-k} \frac{\chi_{k}^{\prime\prime}(\omega)}{\pi \omega} \cos k[x(t) - x(t^{\prime})] \cos \omega(t - t^{\prime}), \tag{4.13}$$

em que $\chi_k(\omega)$ é transformada de Fourier da susceptibilidade dinâmica (resposta linear) do k-ésimo oscilador e $\chi'' = \text{Im}\chi$. Na teoria com acoplamento linear usávamos a hipótese da não-correlação sobre os osciladores, o que implicava que

$$\chi_k''(\omega) = \frac{\pi}{2m_k\omega_k}\delta(\omega - \omega_k). \tag{4.14}$$

Este é um ponto crucial. Fundamentalmente, a característica mais marcante da teoria para duas partículas brownianas, a saber, a interação entre elas, surge da modificação dessa hipótese de não-correlação. A modificação é feita de tal modo a possibilitar que tanto uma escala de comprimento como uma de tempo entrem no problema. A forma mais geral para se fazer isso seria escolher uma relação de dispersão genérica na forma $\omega(k)$, com ω^{-1} tendo unidade de tempo e k^{-1} de comprimento, consistentemente com o acoplamento do tipo exponencial complexa (4.10). Veremos a seguir uma modelagem mais simples, em que uma hipótese mais fraca é feita a respeito da possível relação de dispersão.

A rigor, pode-se considerar que os osciladores do banho são correlacionados, o que quer dizer que cada oscilador se comporta como se fosse uma partícula browniana, dado que cada oscilador sente a presença dos osciladores vizinhos. Essa idéia pode ser ilustrada por efeitos anarmônicos em fônons numa rede atômica. Logo, cada oscilador do banho é amortecido, de acordo com essa nova abordagem e, portanto, possui uma susceptibilidade dinâmica igual à de um oscilador harmônico amortecido.

Então, para cada um dos osciladores do novo conjunto teremos a susceptibilidade dada por

$$\chi_k''(\omega) = \frac{\gamma_k \omega}{m_k [(\omega^2 - \omega_k^2)^2 + \omega^2 \gamma_k^2]}.$$
(4.15)

A hipótese de osciladores não-correlacionados pode ser trivialmente retomada com o limite $\gamma_k \to 0$, sendo γ_k o coeficiente de amortecimento do k-ésimo oscilador do banho. A forma funcional de (4.15) mostra um comportamento quase linear até a frequência de corte Ω , tal que $\Omega \stackrel{<}{\sim} \omega_k$, depois da qual um pico centrado em ω_k é formado. Mais considerações sobre essa função podem ser encontradas em [12].

A equação (4.15) pode, portanto, ser linearizada com relação a ω para estudarmos o regime de tempos longos, ou seja, de baixas frequências comparadas à de corte Ω . Para essa condição,

$$\chi_k''(\omega) \approx f(k)\omega \ \Theta(\Omega - \omega), \tag{4.16}$$

em que $f(k) \approx \frac{\gamma_k}{m_k \omega_k^4}$. Note que as escalas de tempo e comprimento já encontramse destacadamente separadas. A função (4.16) já foi aplicada a outros problemas, como por exemplo o de uma partícula em um banho fermiônico [13]. Substituindo o resultado acima em (4.13), encontramos

$$TD \longmapsto \sum_{k} 2k^2 \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \cos k [x(t) - x(t')] \delta(t - t'), \qquad (4.17)$$

que substituído em (4.10) e integrado em t' fornece

$$M\ddot{x}(t) + \left(\sum_{k} k^2 \kappa_k \kappa_{-k} f(k)\right) \dot{x}(t) = F(t), \qquad (4.18)$$

em que tomamos o limite $\Omega \to \infty$. A equação (4.18) permite-nos indentificar os parâmetros do modelo com a constante de dissipação da partícula browniana, η , que é um parâmetro fenomenológico:

$$\eta = \sum_{k} k^2 \kappa_k \kappa_{-k} f(k). \tag{4.19}$$

No trabalho original [12] também é mostrado que a força flutuante tem as propriedades de $\langle F(t) \rangle = 0$ e $\langle F(t)F(t') \rangle = 2\eta k_B T \delta(t-t')$, que podem ser obtidas usando as propriedades de equilíbrio dos osciladores $\langle \tilde{R}_k(0) \rangle = 0$, $\langle \tilde{R}_k(0)\tilde{R}_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k \omega_k^2} \delta_{-k',k}$.

Vimos, assim, que o modelo aqui apresentado reproduz os resultados obtidos no caso do acoplamento bilinear entre as coordenadas do sistema e do banho para uma densidade espectral ôhmica, $J(\omega) = \eta \omega$.

Além disso, devido à modificação da hipótese discutida, teremos uma escala de tempo (associada a Ω^{-1}) e uma escala de comprimento (associada k_0^{-1}), como definida mais adiante, que permitirá o estudo do acoplamento efetivo entre as duas partículas.

4.2 Equação de movimento para duas partículas

A lagrangeana (4.2) e o acoplamento $C_k = \kappa_k e^{ikx}$, mostrados na seção anterior, tornam desnecessária a presença do contratermo. Com isso, a generalização do modelo para duas partículas torna-se mais natural:

$$L = \frac{1}{2}M\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}M\dot{x}_2^2 + \frac{1}{2}\sum_k m_k(\dot{R}_k\dot{R}_{-k} - \omega_k^2R_kR_{-k})$$
(4.20)

$$-\frac{1}{2}\sum_{k} \left[(C_{-k}(x_1) + C_{-k}(x_2))R_k + (C_k(x_1) + C_k(x_2))R_{-k} \right].$$
(4.21)

As equações de movimento geradas por essa lagrangeana são

$$M\ddot{x}_1 + \frac{1}{2}\sum_k \left(\frac{\partial C_{-k}(x_1)}{\partial x_1}R_k + \frac{\partial C_k(x_1)}{\partial x_1}R_{-k}\right),\tag{4.22}$$

$$M\ddot{x}_{2} + \frac{1}{2}\sum_{k} \left(\frac{\partial C_{-k}(x_{2})}{\partial x_{2}} R_{k} + \frac{\partial C_{k}(x_{2})}{\partial x_{2}} R_{-k} \right)$$
(4.23)

 \mathbf{e}

$$m_k \ddot{R}_{-k} + (C_{-k}(x_1) + C_{-k}x_2) + \omega_k^2 R_{-k} = 0.$$
(4.24)

Analogamente ao caso de uma partícula, a última equação é resolvida por transformada de Laplace e substituída nas duas primeiras. A referência [12] traz esses cálculos mais detalhadamente, obtendo como resultado:

$$M\ddot{x}_{1} + \sum_{k} \frac{k^{2} \kappa_{k} \kappa_{-k}}{m_{k} \omega_{k}^{2}} \int_{0}^{t} \cos k [x_{1}(t) - x_{1}(t')] \cos \omega_{k} (t - t') \dot{x}_{1}(t') dt'$$
(4.25)

$$+\sum_{k} \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos k [x_1(t) - x_2(t')] \cos \omega_k (t - t') \dot{x}_2(t') dt'$$
(4.26)

$$+\sum_{k} \frac{k\kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \sin k [x_1(t) - x_2(t)] = F_1(t), \qquad (4.27)$$

em que

$$F_{1}(t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_{1}} \sum_{k} \left(C_{-k}(x_{1}) \tilde{R}_{k}(0) + C_{k}(x_{1}) \tilde{R}_{-k}(0) \right) \cos \omega_{k} t$$
(4.28)

$$+ \left(C_{-k}(x_1) \dot{R}_k(0) + C_k(x_1) \dot{R}_{-k}(0) \right) \frac{\sin \omega_k t}{\omega_k}.$$
 (4.29)

A equação para a coordenada $x_2(t)$ pode ser obtida imediatamente substituindo-se 1 por 2 e vice-versa. Usando a susceptibilidade definida em (4.16) podemos resolver a soma em freqüências de modo semelhante ao usado na seção anterior e, então,

$$\sum_{k} \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \cos k[x_i(t) - x_j(t')] \cos \omega_k(t - t') = 2 \sum_{k} k^2 \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \cos k[x_i(t) - x_j(t')] \delta(t - t')$$

$$(4.30)$$

е

$$\sum_{k} \frac{k\kappa_k\kappa_{-k}}{m_k\omega_k^2} \sin k[x_1(t) - x_2(t)] = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \sum_{k} k\kappa_k\kappa_{-k} \frac{\chi_k(\omega)}{\omega} \sin k[x_1(t) - x_2(t)] \quad (4.31)$$

$$= \frac{2\Omega}{\pi} \sum_{k} k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \sin k [x_1(t) - x_2(t)].$$
(4.32)

Na seção anterior definimos o coeficiente de dissipação η como função das propriedades microscópicas do banho do modelo através da soma

$$\eta = \sum_{k} \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k^2.$$
(4.33)

Se seguirmos o procedimento bastante conhecido de transformar a soma em uma integral, podemos substituir $\sum_k \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int dk$, sendo L a dimensão característica do sistema. Desse modo, podemos reescrever (4.33) como

$$\eta = \int_0^\infty \left(\frac{L}{2\pi} \kappa_k \kappa_{-k} f(k)\right) k^2 \, dk. \tag{4.34}$$

Se chamarmos o termo entre parênteses na equação acima de " $\eta \ g(k)$ ", teremos a informação sobre a função g(k) escrita na forma

$$\int_0^\infty g(k)k^2 \, dk = 1. \tag{4.35}$$

Dentre todas as funções que se anulam no infinito obedecendo à relação acima, podemos escolher uma que nos é bem familiar, a saber,

$$g(k) = Ae^{-k/k_0}, (4.36)$$

em que k_0 determina a escala de comprimentos do sistema e $A = 1/(2k_0^3)$ é uma constante de normalização definida por (4.35).

Fazendo uso dessas novas condições, podemos retornar em (4.30) e (4.32) e calcular as somas:

$$\sum_{k} \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \cos kr \cos \omega_k (t - t') = 2\eta \delta(t - t') \left(\frac{1}{(k_0^2 r^2 + 1)^2} - \frac{4r^2 k_0^2}{(k_0^2 r^2 + 1)^3} \right), \quad (4.37)$$

$$\sum_{k} \frac{k\kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \sin kr = \frac{2\Omega \eta}{\pi} \frac{r}{(k_0^2 r^2 + 1))^2}.$$
(4.38)

Finalmente, as equações de movimento tornam-se

$$M\ddot{x}_{1}(t) + \eta \dot{x}_{1}(t) + \eta \left(\frac{1}{(k_{0}^{2}[x_{1}(t) - x_{2}(t)]^{2} + 1)^{2}} - \frac{4[x_{1}(t) - x_{2}(t)]^{2}k_{0}^{2}}{(k_{0}^{2}[x_{1}(t) - x_{2}(t)]^{2} + 1)^{3}}\right)\dot{x}_{2}(t)$$

$$(4.39)$$

$$+\frac{2\Omega\eta}{\pi}\frac{[x_1(t)-x_2(t)]}{(k_0^2[x_1(t)-x_2(t)]^2+1)^2} = F_1(t)$$
(4.40)

 \mathbf{e}

$$M\ddot{x}_{2}(t) + \eta\dot{x}_{2}(t) + \eta \left(\frac{1}{(k_{0}^{2}[x_{1}(t) - x_{2}(t)]^{2} + 1)^{2}} - \frac{4[x_{1}(t) - x_{2}(t)]^{2}k_{0}^{2}}{(k_{0}^{2}[x_{1}(t) - x_{2}(t)]^{2} + 1)^{3}}\right)\dot{x}_{1}(t)$$
(4.41)

$$-\frac{2\Omega\eta}{\pi} \frac{[x_1(t) - x_2(t)]}{(k_0^2 [x_1(t) - x_2(t)]^2 + 1)^2} = F_2(t)$$
(4.42)

 com

$$F_i(t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k \left(C_{-k}(x_i) \tilde{R}_k(0) + C_k(x_i) \tilde{R}_{-k}(0) \right) \cos \omega_k t \tag{4.43}$$

$$+ \left(C_{-k}(x_i)\dot{R}_k(0) + C_k(x_i)\dot{R}_{-k}(0) \right) \frac{\sin\omega_k t}{\omega_k}.$$
 (4.44)

É possível obter uma interpretação mais simples do efeito do reservatório sobre o sistema de duas partículas se usarmos as variáveis do centro de massa e coordenada relativa. Definimos

$$q = \frac{x_1 + x_2}{2} \quad e \quad u = x_1 - x_2 \tag{4.45}$$

e obtemos as equações

$$M\ddot{u}(t) + \eta \dot{u}(t) - \eta [u(t)]\dot{u}(t) + \frac{4\Omega\eta}{\pi} \frac{u(t)}{(k_0^2 u^2(t) + 1)^2} = F_u(t)$$
(4.46)

е

$$M\ddot{q}(t) + \eta \dot{q}(t) + \eta [u(t)]\dot{q} = F_q(t), \qquad (4.47)$$

 com

$$\eta[u(t)] = \eta\left(\frac{1}{(k_0^2 u^2(t) + 1)^2} - \frac{4u^2(t)k_0^2}{(k_0^2 u^2(t) + 1)^3}\right);$$
(4.48)

estamos definindo $F_u(t) = F_1(t) - F_2(t)$ e $F_q(t) = (F_1(t) + F_2(t))/2$.

As equações acima nos mostram um comportamento browniano para o centro de massa, com um coeficiente de dissipação convencional, η , e outro "anômalo", $\eta[u(t)]$, dependente da coordenada relativa.

A coordenada relativa, por sua vez, apresenta um fenômeno novo. Além de sujeita a uma dissipação governada por $\eta \in \eta[u(t)]$, surge um potencial efetivo, induzido pelo banho, cuja derivada aparece na equação de movimento. Mais explicitamente,

$$V_{eff}(k_0 u) = -\frac{2\Omega\eta}{\pi k_0^2} \frac{1}{(k_0^2 u^2(t) + 1)}.$$
(4.49)

O potencial é atrativo e, no limite de curtas distâncias, $k_0 u \ll 1$, reduz-se a um potencial harmônico

$$V_{eff}(k_0 u \ll 1) = -\frac{M\omega_0^2}{2k_0^2} + \frac{M\omega_0^2}{2}u^2(t), \qquad (4.50)$$

em que

$$\omega_0^2 \equiv \frac{4\eta\Omega}{M\pi} \tag{4.51}$$

é a freqüência de oscilação, que depende do coeficiente de dissipação η e da freqüência de corte Ω . Mais detalhes sobre as propriedades das forças flutuantes podem ser encontradas em [12].

Resumidamente, estamos lidando com uma teoria em que as partículas brownianas sofrem uma atração mediada pelo banho bem como uma alteração no coeficiente de dissipação associada à distância entre elas. Cabe salientar que as duas principais modificações aqui apresentadas foram o acoplamento exponencial nas coordenadas das partículas, garantindo invariância translacional, e a interação entre os osciladores do banho, capaz de intermediar uma interação entre as partículas.

Acreditando que esse novo modelo reproduza de fato o comportamento de duas partículas brownianas em um reservatório comum, vamos aplicá-lo a partículas quânticas, descritas pelo operador densidade.

Capítulo 5

Emaranhamento de duas partículas em equilíbrio térmico

Os principais resultados alcançados por nosso trabalho encontram-se neste capítulo. O primeiro deles é o cálculo da matriz densidade de duas partículas brownianas quânticas em um mesmo reservatório. O segundo é o comportamento do emaranhamento entre essas partículas. A motivação para esse estudo foi detalhadamente comentada no início do capítulo anterior.

A descrição da evolução temporal dessas partículas quânticas já foi estabelecida [15]. Nesse mesmo trabalho, é calculada a evolução temporal do emaranhamento entre as duas partículas. Optamos por estudar a matriz densidade das duas partículas no equilíbrio termodinâmico. Veremos que essa abordagem traz algumas modificações com relação ao caso dinâmico apresentado em [15]. O emaranhamento gerado pelo banho foi calculado, portanto, em função da temperatura e do acoplamento das partículas com o reservatório.

5.1 Matriz densidade de duas partículas no equilíbrio térmico

Com o lagrangeano escrito em (4.21), podemos gerar o hamiltoniano total do sistema composto pelas partículas e pelo reservatório, que chamaremos de H. Em

termos desse hamiltoniano, temos a matriz densidade das partículas dada por

$$\rho_s = Tr_R[\rho_{tot}],\tag{5.1}$$

em que

$$\rho_{tot} = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta H},\tag{5.2}$$

sendo \mathcal{Z} a constante de normalização e $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B é a constante de Boltzman e T, a temperatura.

Para estudar esse problema na representação de posição, procedemos de acordo com a referência [8], a qual mostra que

$$\langle x|\rho|y\rangle = \int_{y}^{x} \mathcal{D}[q(\tau)]e^{-\frac{1}{\hbar}S^{E}[q(\tau)]},$$
(5.3)

em que $S^E[q(\tau)]$ é a ação euclideana, dada por

$$S^{E}[q(\tau)] = \int_{0}^{\hbar\beta} (T[q(\tau)] + V[q(\tau)]) d\tau, \qquad (5.4)$$

sendo T a energia cinética e V a potencial do sistema.

Aplicando tais resultados ao nosso caso, encontramos

$$\rho_s(x_1, y_1; x_2, y_2, \beta) = \int_{y_1}^{x_1} \mathcal{D}[q_1(\tau)] \int_{y_2}^{x_2} \mathcal{D}[q_2(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} [S_0^E[q_1] + S_0^E[q_2]]} \times F[q_1(\tau), q_2(\tau)],$$
(5.5)

com $S_0^{{\cal E}}$ sendo a ação sobre o sistema isolado,

$$F[q_1(\tau), q_2(\tau)] = Tr_R \left[e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} H_{IR}(\tau) d\tau} \right]$$
(5.6)

e $H_{IR} = H_R + H_I[q_1(\tau)] + H_I[q_2(\tau)]$, tal que

$$H_{I}[q_{1}(\tau)] = \frac{1}{2} \sum_{k} [C_{-k}(q_{1})R_{k} + C_{k}(q_{1})R_{-k}], \qquad (5.7)$$

$$H_{I}[q_{2}(\tau)] = \frac{1}{2} \sum_{k} [C_{-k}(q_{2})R_{k} + C_{k}(q_{2})R_{-k}]$$
(5.8)

е

$$H_R = \frac{1}{2} \sum_k \left(\frac{P_k P_{-k}}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2}{2} R_k R_{-k} \right).$$
(5.9)

Analisemos a relação (5.6). Definindo por ρ o operador cujo traço parcial resulta em $F[q_1(\tau), q_2(\tau)]$, temos

$$\rho = \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} H_{IR}(\tau)d\tau\right),\tag{5.10}$$

que obedece à equação

$$\frac{d\rho}{d\beta} = -H_{IR}(\beta)\rho. \tag{5.11}$$

Assumindo que o reservatório é somente fracamente perturbado pelo sistema, podemos desenvolver uma teoria de perturbação dependente do tempo para tempo imaginário. Nesse caso, o hamiltoniano H_R sofrerá perturbação de $H_I[q_1, q_2] =$ $H_I[q_1(\tau)] + H_I[q_2(\tau)]$. A seguir mostraremos como a versão de interação pode nos ajudar a resolver esse problema.

Podemos escrever (5.11) como

$$\frac{d\rho}{d\beta} + H_R \rho = -H_I \mathcal{I} \rho, \qquad (5.12)$$

em que \mathcal{I} é a identidade. Multiplicando por $e^{\beta H_R}$ pela esquerda e substituindo $\mathcal{I} = e^{-\beta H_R} e^{\beta H_R}$, temos

$$\frac{d\wp}{d\beta} = -\tilde{H}_I\wp,\tag{5.13}$$

de forma que

$$\varphi \equiv e^{\beta H_R} \rho \tag{5.14}$$

е

$$\tilde{H}_I \equiv e^{\beta H_R} H_I e^{-\beta H_R}.$$
(5.15)

A equação (5.13) pode ser formalmente resolvida com

$$\wp = T \, \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \tilde{H}_I(\tau) d\tau\right),\tag{5.16}$$

em que T representa o ordenamento temporal.

Voltando na equação (5.6) e usando (5.14), percebemos que ela pode ser reescrita como

$$F[q_1(\tau), q_2(\tau)] = Tr_R[\rho] = Tr_R[e^{-\beta H_R}\wp].$$
(5.17)

Chamando de ρ_R o operador densidade do reservatório em equilíbrio, $\rho_R \equiv \exp[-\beta H_R]$, temos

$$F[q_1(\tau), q_2(\tau)] = Tr_R \left[\rho_R \ T \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} (\tilde{H}_I[q_1(\tau)] + \tilde{H}_I[q_2(\tau)]) d\tau\right) \right]$$
(5.18)

que, até segunda ordem na perturbação pode ser escrita como

$$F[q_1(\tau), q_2(\tau)] \approx Tr_R \left[\rho_R \left(1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} Y(\tau) d\tau + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' Z(\tau, \tau') \right) \right], \quad (5.19)$$

em que

$$Y(\tau) \equiv (\tilde{H}_{I}[q_{1}(\tau)] + \tilde{H}_{I}[q_{2}(\tau)]) \quad e \quad Z(\tau, \tau') \equiv Y(\tau)Y(\tau').$$
(5.20)

Vamos simplificar nossa notação definindo $\langle A \rangle = Tr_R[\rho_R A]$. Na equação (5.19), mais especificamente no termo $Y(\tau)$, aparece o termo $\langle \tilde{H}_I \rangle$. Se observarmos as definições (5.7) e (5.8), vemos que

$$\langle \tilde{H}_I \rangle = \frac{1}{2} \sum_k [C_{-k} \langle R_k \rangle + C_k \langle R_{-k} \rangle].$$
(5.21)

Mas, no equilíbrio, $\langle R_k \rangle = 0 \ \forall k$. Logo, temos $\langle \tilde{H}_I \rangle = 0$. Usando esse fato podemos afirmar que $F[q_1(\tau), q_2(\tau)]$ pode ser obtido da expansão da exponencial a seguir

$$F[q_1(\tau), q_2(\tau)] = \exp\left[\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \left(A_{11} + A_{22} + A_{12} + A_{21}\right)\right],$$
(5.22)

em que

$$A_{ij} \equiv \langle \tilde{H}_I[q_i(\tau)]\tilde{H}_I[q_j(\tau')] \rangle.$$
(5.23)

Observe que para que valesse a igualdade (5.21) usamos implicitamente a propriedade cíclica to traço. Isso permite que escrevamos tanto $\langle \tilde{H}_I \rangle = \langle H_I \rangle$, como acabamos de comentar, quanto $\langle \tilde{H}_I[q_i(\tau)]\tilde{H}_I[q_j(\tau')] \rangle = \langle H_I[q_i(\tau)]H_I[q_j(\tau')] \rangle$. Por conseguinte, podemos reescrever os termos definidos em (5.23) como

$$A_{ij} = \langle H_I[q_i(\tau)] H_I[q_j(\tau')] \rangle.$$
(5.24)

De posse novamente das relações (5.7) e (5.8), podemos mostrar que

$$A_{ij} = \frac{1}{4} \sum_{k,k'} C_{-k}[q_i(\tau)] C_{-k'}[q_j(\tau')] \langle R_k(\tau) R_{k'}(\tau') \rangle + C_{-k}[q_i(\tau)] C_{k'}[q_j(\tau')] \langle R_k(\tau) R_{-k'}(\tau') \rangle$$
(5.25)

$$+C_{k}[q_{i}(\tau)]C_{-k'}[q_{j}(\tau')]\langle R_{-k}(\tau)R_{k'}(\tau')\rangle + C_{k}[q_{i}(\tau)]C_{k'}[q_{j}(\tau')]\langle R_{-k}(\tau)R_{-k'}(\tau')\rangle.$$
(5.26)

A condição de invariância translacional do reservatório impõe que

$$R_k(x+d)R_{k'}(x+d) = e^{-i(k+k')d}R_k(x)R_{k'}(x) = R_k(x)R_{k'}(x).$$
 (5.27)

Isso implica que somente termos em que k = -k' devem ser não-nulos na somatória acima. Com isso, reduzimos (5.26) a

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k} (C_{-k}[q_i(\tau)] C_k[q_j(\tau')] + C_k[q_i(\tau)] C_{-k}[q_j(\tau')]) \langle R_k(\tau) R_{-k}(\tau') \rangle, \quad (5.28)$$

em que usamos $\langle R_k(\tau) R_{-k}(\tau') \rangle = \langle R_{-k}(\tau) R_k(\tau') \rangle.$

Na soma acima encontra-se o termo $\langle R_k(\tau)R_{-k}(\tau')\rangle$. Para tratá-lo precisamos recorrer ao teorema de flutuação-dissipação. De acordo com [16],

$$\langle R_k(t)R_{-k}(s)\rangle = \frac{\hbar}{\pi} \int_{\infty}^{\infty} d\omega \ \chi_k''(\omega) \frac{e^{-i\omega(t-s)}}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}},\tag{5.29}$$

com $t \in s$ sendo tempos reais, como ocorre no problema dinâmico.

Consistentemente ao que fizemos na teoria de perturbação para tempo imaginário, podemos estudar o problema de equilíbrio térmico tomando $t = -i\tau$ e $s = -i\tau'$, em que $\tau > \tau'$ e, portanto, $\tau - \tau' = |\tau - \tau'|$.

Uma opção para prosseguir com as contas é seguir os passos de [16]. No livro, a função $\Phi_k(\tau - \tau')$, definida por $\Phi_k(\tau - \tau') = \langle R_k(\tau)R_{-k}(\tau')\rangle$, é estendida no plano complexo periodicamente em $(\tau - \tau')$, com período $\hbar\beta$. Sendo periódica, a função é expandida em série de Fourier e os coeficientes da série ficam definidos em termos de $\chi''_k(\omega)$.

Apesar de padrão na literatura, tal procedimento só dificulta as contas. Em primeiro lugar porque elas se alongam e em segundo porque é necessário voltar da série para a função que a origina para estabelecer a comparação com a teoria de uma partícula browniana.

Frente a isso, escolhemos tomar um outro caminho que prova-se igualmente válido, como veremos. Esse novo caminho depende primordialmente da paridade da função $\chi_k''(\omega)$, a saber, $\chi_k''(\omega) = -\chi_k''(-\omega)$. Essa propriedade é facilmente notada da relação (4.15). Temos que

$$\Phi_k(\tilde{\tau}) = \frac{\hbar}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ \chi_k''(\omega) \frac{e^{-\omega\tilde{\tau}}}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}},\tag{5.30}$$

em que $\tilde{\tau} \equiv |\tau - \tau'|$.

Assim,

$$\Phi_k(\tilde{\tau}) = \frac{\hbar}{\pi} \left[\int_0^\infty d\omega \ \chi_k''(\omega) \frac{e^{-\omega\tilde{\tau}}}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}} + \int_{-\infty}^0 d\omega \ \chi_k''(\omega) \frac{e^{-\omega\tilde{\tau}}}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}} \right].$$
(5.31)

Fazemos uma mudança de variáveis na segunda integral, $\nu = -\omega$. Logo,

$$\Phi_k(\tilde{\tau}) = \frac{\hbar}{\pi} \left[\int_0^\infty d\omega \ \chi_k''(\omega) \frac{e^{-\omega\tilde{\tau}}}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}} + \int_0^\infty d\nu \ \chi_k''(-\nu) \frac{e^{\nu\tilde{\tau}}}{1 - e^{\nu\hbar\beta}} \right].$$
(5.32)

Como a variável de integração é muda, trocamos ν por ω novamente e ficamos com

$$\Phi_k(\tilde{\tau}) = \frac{\hbar}{\pi} \left[\int_0^\infty d\omega \ \chi_k''(\omega) \frac{e^{-\omega\tilde{\tau}}}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}} + \int_0^\infty d\omega \ \left[-\chi_k''(-\omega) \right] \frac{e^{\omega\tilde{\tau}}}{e^{\omega\hbar\beta} - 1} \right].$$
(5.33)

Note que também trocamos a ordem da subtração no denominador.

Evocando o fato de $\chi^{\prime\prime}(\omega)$ ser ímpar, escrevemos

$$\Phi_k(\tilde{\tau}) = \frac{\hbar}{\pi} \left[\int_0^\infty d\omega \ \chi_k''(\omega) \left(\frac{e^{-\omega\tilde{\tau}}}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}} + \frac{e^{\omega\tilde{\tau}}}{e^{\omega\hbar\beta} - 1} \right) \right].$$
(5.34)

Nos parênteses, podemos colocar o termo $e^{-\frac{\omega\hbar\beta}{2}}$ em evidência no denominador da primeira fração e $e^{\frac{\omega\hbar\beta}{2}}$ no da segunda. Passando esses termos para os numeradores, ganhamos um denominador comum e identificamos

$$\left(\frac{e^{-\omega\tilde{\tau}}}{1-e^{-\omega\hbar\beta}} + \frac{e^{\omega\tilde{\tau}}}{e^{\omega\hbar\beta} - 1}\right) = \frac{\cosh\left[\omega\left(\tilde{\tau} - \frac{\hbar\beta}{2}\right)\right]}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)}.$$
(5.35)

De fato, a expansão em Fourier de $\Phi_k(\tilde{\tau})$ com período $\hbar\beta$, sendo

$$\Phi_k(\tilde{\tau}) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega \ \chi_k''(\omega) \frac{\cosh\left[\omega\left(\tilde{\tau} - \frac{\hbar\beta}{2}\right)\right]}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)},\tag{5.36}$$

gera os mesmos coeficientes encontrados em [16].

Com o resultado (5.36), podemos retornar em (5.22), com os A_{ij} definidos por (5.28). Aplicando a definição $C_k[x(\tau)] = \kappa_k e^{ikx(\tau)}$, é fácil mostrar que

$$F[q_1(\tau), q_2(\tau)] = \exp\left[\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} [\Xi_k(\tau, \tau') \Phi_k(\tau - \tau')]\right], \quad (5.37)$$

em que definimos

$$\Xi_k[\tau, \tau'] \equiv \sum_{i,j=1}^2 \cos[k(q_i(\tau) - q_j(\tau'))].$$
 (5.38)

É bastante esclarecedor perceber que $F[q_1(\tau), q_2(\tau)]$ pode ser separado em um produto com três termos, $F[q_1(\tau), q_2(\tau)] = F_1 * F_2 * F_{int}$, definidos por

$$F_{\alpha} \equiv \exp\left[\frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} [\lambda_{\alpha} \ \Phi_k(\tau - \tau')]\right], \tag{5.39}$$

sendo

$$\lambda_1 \equiv \cos[k(q_1(\tau) - q_1(\tau'))],$$
 (5.40)

$$\lambda_2 \equiv \cos[k(q_2(\tau) - q_2(\tau'))] \tag{5.41}$$

e

$$\lambda_{int} \equiv \cos[k(q_1(\tau) - q_2(\tau'))] + \cos[k(q_2(\tau) - q_1(\tau'))].$$
 (5.42)

Dissemos que era esclarecedor porque F_1 e F_2 retomam o resultado de uma partícula browniana com acoplamento bilinear com o banho, como mostraremos.

Vamos supor que, do tempo τ para o tempo τ' , o movimento da partícula foi tal que as flutuações da trajetória estejam restritas a uma região pequena comparada com o comprimento característico do banho, k_0^{-1} . Assim, fazemos $[k(q_1(\tau) - q_1(\tau'))] << 1$. Portanto, expandimos o cosseno até segunda ordem: $\cos(x) \approx 1 - (x)^2/2$. O termo de ordem zero sai da integral de caminho e seu cálculo fica embutido na normalização da matriz densidade.

Podemos, então, escrever (5.39) como

$$F_1 \approx \exp\left[-\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k^2 \Phi_k(\tau - \tau') (q_1(\tau) - q_1(\tau'))^2\right].$$
(5.43)

Substituímos (4.16) em (5.36) e ficamos com

$$F_{1} = \exp\left[-\frac{1}{2\hbar^{2}}\int_{0}^{\hbar\beta} d\tau \int_{0}^{\tau} d\tau' \left(\sum_{k} \kappa_{k}\kappa_{-k}k^{2}f(k)\right)\hbar\frac{K(\tau-\tau')}{\eta}(q_{1}(\tau)-q_{1}(\tau'))^{2}\right],$$
(5.44)

ou seja, lembrando de (4.33),

$$F_1 = \exp\left[-\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \ K(\tau - \tau')(q_1(\tau) - q_1(\tau'))^2\right], \tag{5.45}$$

em que definimos

$$K(\tau - \tau') \equiv \frac{\eta}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \ \omega \frac{\cosh\left[\omega\left(\tilde{\tau} - \frac{\hbar\beta}{2}\right)\right]}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)}.$$
(5.46)

De acordo com [16], o "funcional de influência" de uma partícula no equilíbrio térmico é

$$\mathcal{F}^{E}[q] = \exp\left[-\frac{1}{2\hbar} \int_{0}^{\hbar\beta} d\tau \int_{0}^{\tau} d\tau' \ K_{W}(\tau - \tau')(q(\tau) - q(\tau'))^{2}\right]$$
(5.47)

em que

$$K_W(\tau - \tau') = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{\cosh\left[\omega\left(\tilde{\tau} - \frac{\hbar\beta}{2}\right)\right]}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)}$$
(5.48)

e $J(\omega) = \eta \omega \Theta(\Omega - \omega)$. Logo, $K_W(\tau - \tau') = K(\tau - \tau')$ e $\mathcal{F}^E[q] = F_1$, como comentamos.

Para trabalharmos com F_{int} devemos ser um pouco mais cautelosos. É precisamente no cálculo desse termo que surgem as principais diferenças do caso dinâmico. Retornemos à expressão de F_{int} :

$$F_{int} = \exp\left[\frac{1}{\hbar^2} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' [\lambda_{int}(\tau, \tau')] \Phi_k(\tau - \tau')\right], \quad (5.49)$$

em que $\lambda_{int}(\tau, \tau')$ foi definido em (5.42). Além disso, como em (5.44), usaremos

$$\Phi_k(\tau - \tau') = \hbar f(k) \frac{K(\tau - \tau')}{\eta}.$$
(5.50)

Os termos que aparecem dentro dos cossenos em λ_{int} combinam as coordenadas das partículas em tempos diferentes. Podemos até esperar que, no equilíbrio, q_1 e q_2 fiquem próximos, dada a atração entre elas. No entanto, isso só é verdade para tempos iguais em q_1 e q_2 . Em outras palavras, podemos aproximar $q_1(\tau) \approx q_2(\tau)$ e $q_1(\tau') \approx q_2(\tau')$, mas nunca $q_1(\tau) \approx q_2(\tau')$ ou $q_2(\tau) \approx q_1(\tau')$.

A melhor forma de atacar esse problema é nos inspirarmos na transformação de coordenadas feita no capítulo anterior, usada para facilitar a interpretação das duas partículas brownianas em um reservatório comum. Nessa transformação, passamos a lidar com o centro de massa e a coordenada relativa das partículas.

Faremos aqui a transformação inversa daquela que acabamos de comentar, que nos fornece as coordenadas $q_{1(2)}$ em termos do centro de massa " ζ " e da coordenada relativa " ξ ". Dada a definição (4.45), escrevemos

$$q_1 = \zeta + \frac{\xi}{2} \qquad e \qquad q_2 = \zeta - \frac{\xi}{2}.$$
 (5.51)

Assim, reescrevemos $\lambda_{int}(\tau, \tau')$ como

$$\lambda_{int}(\tau,\tau') = \cos\left[k\left(\zeta(\tau) + \frac{\xi(\tau)}{2} - \zeta(\tau') + \frac{\xi(\tau')}{2}\right)\right]$$
(5.52)

$$+\cos\left[k\left(\zeta(\tau) - \frac{\xi(\tau)}{2} - \zeta(\tau') - \frac{\xi(\tau')}{2}\right)\right],\tag{5.53}$$

que rearranjando termos, pode ser escrita como

$$\lambda_{int}(\tau,\tau') = \cos\left[k\left(\left(\zeta(\tau) - \zeta(\tau')\right) + \left(\frac{\xi(\tau) + \xi(\tau')}{2}\right)\right)\right]$$
(5.54)

$$+\cos\left[k\left(\left(\zeta(\tau)-\zeta(\tau')\right)-\left(\frac{\xi(\tau)+\xi(\tau')}{2}\right)\right)\right].$$
(5.55)

Mas, $\cos(A + B) + \cos(A - B) = 2\cos A\cos B$. Logo,

$$\lambda_{int}(\tau,\tau') = 2\cos\left[k\left(\zeta(\tau) - \zeta(\tau')\right)\right]\cos\left[k\ \theta(\tau,\tau')\right],\tag{5.56}$$

em que definimos

$$\theta(\tau, \tau') \equiv \left(\frac{\xi(\tau) + \xi(\tau')}{2}\right). \tag{5.57}$$

Nesse ponto precisamos proceder analogamente ao que fizemos em F_1 e F_2 . Podemos enxergar $\zeta(\tau)$ como sendo a coordenada de uma partícula, que, por não flutuar muito em relação ao comprimento característico do sistema, obedece a $k|\zeta(\tau) - \zeta(\tau')| << 1$. Observe que a subtração é essencial na aproximação acima, dado que consideramos $\zeta(\tau) \approx \zeta(\tau')$ e não $\zeta(\tau) \approx 0$. Isso justifica a impossibilidade de tomar um caminho semelhante com a variável " $k \ \theta(\tau, \tau')$ ".

Portanto, obtemos

$$\lambda_{int}(\tau, \tau') = 2\left(1 - \frac{k^2}{2}[\zeta(\tau) - \zeta(\tau')]^2\right)\cos[k \ \theta(\tau, \tau')]$$
(5.58)

e, usando (5.50), podemos escrever (5.49) como

$$F_{int} = \exp\left[\frac{1}{\eta\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \left(\sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) [\lambda_{int}(\tau, \tau')]\right) K(\tau - \tau')\right].$$
(5.59)

O termo entre parênteses é tal que

$$\left(\sum_{k} \kappa_k \kappa_{-k} f(k) [\lambda_{int}(\tau, \tau')]\right) = P(\tau, \tau') + Q(\tau, \tau'), \qquad (5.60)$$

definidos por

$$P(\tau, \tau') \equiv 2\sum_{k} \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \cos[k \ \theta(\tau, \tau')]$$
(5.61)

е

$$Q(\tau, \tau') \equiv -\sum_{k} \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k^2 \cos[k \ \theta(\tau, \tau')].$$
(5.62)

Podemos calcular as somas em $P(\tau, \tau')$ e $Q(\tau, \tau')$ transformando-as em integrais, como fizemos no capítulo anterior. Com isso, ganharemos uma interpretação muito clara desses termos.

A soma escrita em $P(\tau, \tau')$ possui a mesma estrutura de (4.37), assumindo que a integral em " ω " já tenho sido resolvida. Portanto, é imediato reescrever

$$\sum_{k} \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \cos[k \ r] = \frac{\eta}{2k_0^2} \left[\frac{1}{(k_0 \ r)^2 + 1} \right]$$
(5.63)

e, portanto,

$$P(\tau, \tau') = -\frac{\pi}{\Omega} V_{eff}(k_0 \theta(\tau, \tau')), \qquad (5.64)$$

dado $V_{eff}(x)$ definido em (4.49).

A soma contida em $Q(\tau, \tau')$ não aparece no caso dinâmico, mas pode ser resolvida com o mesmo método:

$$\sum_{k} \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k^2 \cos[k \ \theta(\tau, \tau')] = \int_0^\infty \left(\frac{L}{2\pi} \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k^2\right) \cos[k \ \theta(\tau, \tau')] = (5.65)$$

$$= \frac{\eta}{2k_0^3} \int_0^\infty dk \ k^2 e^{-\frac{k}{k_0}} \cos[k \ \theta(\tau, \tau')], \tag{5.66}$$

dado g(k) definido em (4.36).

Essa integral pode ser resolvida analiticamente e resulta em

$$\frac{\eta}{2k_0^3} \int_0^\infty dk \ k^2 e^{-\frac{k}{k_0}} \cos[k \ \theta(\tau, \tau')] = \eta \left[\frac{1 - 3(k_0 \ \theta(\tau, \tau'))^2}{(1 + (k_0 \ \theta(\tau, \tau'))^2)^3} \right].$$
(5.67)

Assim temos

$$Q(\tau, \tau') = -\eta \left[\frac{1 - 3(k_0 \ \theta(\tau, \tau'))^2}{(1 + (k_0 \ \theta(\tau, \tau'))^2)^3} \right].$$
 (5.68)

No capítulo anterior definimos uma dissipação "anômala", $\eta[u(t)]$, dada por

$$\eta[u(t)] = \eta \left(\frac{1}{(k_0^2 u^2(t) + 1)^2} - \frac{4u^2(t)k_0^2}{(k_0^2 u^2(t) + 1)^3} \right).$$
(5.69)

Simplificando a equação acima vemos que, surpreendentemente,

$$Q(\tau, \tau') = -\eta[\theta(\tau, \tau')].$$
(5.70)

Dados $P(\tau, \tau')$ em (5.64) e $Q(\tau, \tau')$ em (5.70), voltamos em (5.59) e obtemos

$$F_{int} = \exp\left[-\frac{\pi}{\eta\hbar\Omega}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' K(\tau-\tau') V_{eff}[k_0 \ \theta(\tau,\tau')]\right]$$
(5.71)

$$\times \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \frac{1}{\eta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \eta [\theta(\tau, \tau')] K(\tau - \tau') (\zeta(\tau) - \zeta(\tau'))^2\right].$$
 (5.72)

Para deixar a matriz densidade numa descrição coerente, vamos escrever os termos $F_1, F_2, S_0[q_1] \in S_0[q_2]$ em termos de " ζ " e " ξ ". Esse passo não apresenta grande desafio e será omitido. O resultado final da matriz densidade de duas partículas em equilíbrio térmico em um reservatório comum é então dado por

$$\rho_s(\zeta_f, \zeta_i; \xi_f, \xi_i, \beta) = \int_{\zeta_i}^{\zeta_f} \mathcal{D}[\zeta(\tau)] \int_{\xi_i}^{\xi_f} \mathcal{D}[\xi(\tau)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_{eff}\right], \quad (5.73)$$

em que

$$S_{eff} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[m\dot{\zeta}^2 + \frac{m}{4}\dot{\xi}^2 \right] + \Gamma$$
(5.74)

е

$$\Gamma \equiv \frac{1}{\eta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \eta [\theta(\tau, \tau')] K(\tau - \tau') (\zeta(\tau) - \zeta(\tau'))^2 +$$
(5.75)

$$+ \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' K(\tau - \tau') (\zeta(\tau) - \zeta(\tau'))^2 +$$
 (5.76)

$$+\frac{\pi}{\eta\Omega}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau' K(\tau-\tau') V_{eff}[\theta(\tau,\tau')] +$$
(5.77)

$$+\frac{1}{4}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' K(\tau-\tau')(\xi(\tau)-\xi(\tau'))^2.$$
 (5.78)

Se compararmos o resultado acima com a matriz densidade de uma partícula browniana em equilíbrio térmico, podemos fazer a interpretação a seguir.

A partícula de coordenada " $\zeta(\tau)$ " encontra-se livre de um potencial externo e sente uma dissipação convencional governada pela constante η , embutida em $K(\tau, \tau')$, como vemos do primeiro termo em Γ . Além disso, ela também sofre uma dissipação "anômala", governada pela função ($\eta[\theta]/\eta$), como pode ser visto do segundo termo em Γ .

A outra partícula, de coordenada " $\xi(\tau)$ ", aparece sujeita a um potencial efetivo $V_{eff}[\theta]$, como vemos do terceiro termo em Γ . O último termo em Γ indica a ação de uma dissipação convencional, cuja constante também está relacionada a η . Cabe ressaltar que o potencial efetivo aparece dentro de uma integral, multiplicado pelo núcleo $K(\tau - \tau')$. O significado disso é que essa idéia de um potencial gerado pelo banho mantém-se consistente, visto que o mesmo sofre flutuações induzidas por $K(\tau - \tau')$. Uma interação artificial colocada *a priori* no modelo, como feito em [17] através de " $m c_{12}x_1x_2$ ", obviamente mostraria-se presente na matriz densidade e correlacionaria as partículas, mas *não representaria um efeito do meio*, ao contrário do que é aparentemente sugerido no trabalho citado.

A matriz densidade escrita em (5.73) contém todos os elementos relevantes da teoria browniana de duas partículas e mostra-se bastante consistente em descrever esse sistema quântico no equilíbrio. Contudo, o resultado encontra-se escrito em termos de integrais de Feynman. Para resolvê-las, precisamos de algumas aproximações, uma vez que não podemos integrar analiticamente exponenciais de ações cujos lagrangeanos envolvam potências em $q \in \dot{q}$ diferentes de 0, 1 ou 2.

Tais aproximações serão fundamentadas no comportamento esperado do sistema de duas partículas brownianas. É natural esperar que a interação efetiva entre as partículas aproxime-as. Até alcançar o equilíbrio, espera-se que a distância entre elas vá diminuindo e, ao longo do movimento, elas vão sentindo um atrito gerado pelo meio e, com isso, perdendo energia. Até que, enfim, elas fiquem em um regime em que o potencial efetivo seja harmônico e que as flutuações que dêem energia para as partículas seja comparável às que retirem energia das mesmas. Visto isso e levando em consideração que a dissipação anômala até segunda ordem é $\eta[\theta] \approx \eta[1 - 6(k_0 \ \theta)^2]$, podemos assumir que, no equilíbrio, somente o regime de partículas muito próximas e, portanto, de dissipação ôhmica, seja relevante. Em outras palavras, vamos considerar $|k_0\xi(\tau)| << 1$ e, assim, poderemos desacoplar $\zeta(\tau)$ de $\xi(\tau)$, de modo que a primeira seja uma partícula browniana livre e a segunda, um oscilador harmônico dissipativo, ambas no equilíbrio térmico.

Toda essa argumentação traduz-se nas equações da forma

$$\rho_s(\zeta_f, \zeta_i; \xi_f, \xi_i, \beta) = \rho_\zeta(\zeta_f, \zeta_i, \beta) * \rho_\xi(\xi_f, \xi_i, \beta),$$
(5.79)

em que

$$\rho_{\zeta}(\zeta_f, \zeta_i, \beta) = \int_{\zeta_i}^{\zeta_f} \mathcal{D}[\zeta(\tau)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_{eff}^{[1]}\right]$$
(5.80)

е

$$\rho_{\xi}(\xi_f, \xi_i, \beta) = \int_{\xi_i}^{\xi_f} \mathcal{D}[\xi(\tau)] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} S_{eff}^{[2]}\right].$$
(5.81)

Nas equações acima, definimos

$$S_{eff}^{[1]} \equiv \int_0^{\hbar\beta} \left[m\dot{\zeta}^2 + 2\int_0^{\tau} d\tau' K(\tau - \tau')(\zeta(\tau) - \zeta(\tau'))^2 \right] d\tau$$
(5.82)

е

$$S_{eff}^{[2]} \equiv \int_0^{\hbar\beta} \left[\frac{m}{4} \dot{\xi}^2 + \frac{m}{4} \omega_0^2 \xi^2 + \frac{1}{4} \int_0^{\tau} d\tau' K(\tau - \tau') (\xi(\tau) - \xi(\tau'))^2 \right] d\tau, \qquad (5.83)$$

com $\omega_0^2 \equiv \frac{4\eta\Omega}{m\pi}$, como em (4.51).

Lembrando que uma partícula livre pode ser tratada como um oscilador harmônico de freqüência nula, tudo que precisamos fazer é conhecer a solução do problema de um oscilador harmônico quântico dissipativo. A referida solução pode ser encontrada na literatura [16], [18]. Explicitamente,

$$\rho(x,x') = \langle x|\rho|x'\rangle = C \exp\left[-\frac{1}{8\langle q^2\rangle}(x+x')^2 - \frac{\langle p^2\rangle}{2\hbar^2}(x-x')^2\right],$$
(5.84)

em que

$$\langle q^2 \rangle = \frac{2\hbar\gamma}{m\pi} \int_0^\infty \left(\frac{\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2} \right) \coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right) d\omega \tag{5.85}$$

е

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2m\hbar\gamma}{\pi} \int_0^\infty \left(\frac{\omega^3}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2} \right) \coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right) d\omega, \tag{5.86}$$

tal que $\gamma \equiv \eta/(2m)$ e C é uma constante de normalização.

Para a coordenada ζ , teremos

$$\omega_{\zeta}^2 = 0, \qquad m_{\zeta} = 2M \qquad e \qquad \eta_{\zeta} = 4\eta \tag{5.87}$$

e para ξ ,

$$\omega_{\xi}^{2} = \frac{4\eta\Omega}{M\pi}, \qquad m_{\xi} = \frac{M}{2} \qquad e \qquad \eta_{\xi} = \frac{\eta}{2}.$$
 (5.88)

As constantes acima, quando aplicadas a (5.85) e (5.86), estabelecem o significado do que definimos como $\langle q_{\zeta}^2 \rangle$, $\langle p_{\zeta}^2 \rangle$, $\langle q_{\xi}^2 \rangle$ e $\langle p_{\xi}^2 \rangle$. Com isso,

$$\rho_{\zeta}(\zeta_f, \zeta_i, \beta) = C_{\zeta} \exp\left[-\frac{1}{8\langle q_{\zeta}^2 \rangle}(\zeta_f + \zeta_i)^2 - \frac{\langle p_{\zeta}^2 \rangle}{2\hbar^2}(\zeta_f - \zeta_i)^2\right]$$
(5.89)

е

$$\rho_{\xi}(\xi_f, \xi_i, \beta) = C_{\xi} \exp\left[-\frac{1}{8\langle q_{\xi}^2 \rangle} (\xi_f + \xi_i)^2 - \frac{\langle p_{\xi}^2 \rangle}{2\hbar^2} (\xi_f - \xi_i)^2\right].$$
 (5.90)

Finalmente obtemos a solução final do nosso problema nas variáveis originais, q_1 e q_2 ,

$$\rho_s(x_1, x_2; y_1, y_2, \beta) \equiv \langle x_1 \ x_2 | \rho_s | y_1 \ y_2 \rangle = C_{\zeta} C_{\xi} e^{-f(x_1, x_2, y_1, y_2)}, \tag{5.91}$$

sendo

$$f(x_1, x_2, y_1, y_2) \equiv \frac{(y_1 - y_2 + x_1 - x_2)^2}{8\langle q_{\xi}^2 \rangle} + \frac{\langle p_{\xi}^2 \rangle}{2\hbar^2} (y_1 - y_2 - x_1 + x_2)^2 +$$
(5.92)

$$+\frac{(y_1+y_2+x_1+x_2)^2}{32\langle q_{\zeta}^2\rangle} + \frac{\langle p_{\zeta}^2\rangle}{8\hbar^2}(y_1+y_2-x_1-x_2)^2,$$
(5.93)

 $\operatorname{com} x_i \in y_i$ definidos em (5.5).

De posse da solução da matriz densidade de duas partículas brownianas em equilíbrio térmico com o reservatório, estamos aptos a calcular o emaranhamento entre elas como função da temperatura. Esse é o assunto da próxima seção.

5.2 Negatividade Logarítimica em função da temperatura

No primeiro capítulo definimos a negatividade logarítimica, $E_{\mathcal{N}}$. Mostramos como usar essa grandeza para medir o emaranhamento em estados gaussianos. Em particular, uma expressão analítica foi apresentada para estados gaussianos de dois modos. A referida expressão depende da matriz de covariância do sistema de duas partículas, σ , que pode ser encontrada a partir da função característica:

$$\tilde{W}(X) = \exp\left[-\frac{1}{2}X \ \sigma \ X^T\right],\tag{5.94}$$

em que $X \equiv (q_1, p_1, q_2, p_2).$

Em termos do operador densidade do sistema, ρ_s ,
podemos encontrar a função $\tilde{W}(X)$ através de

$$\tilde{W}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\vec{p}.\vec{r}} \left\langle \vec{r} - \frac{\vec{q}}{2} \right| \rho_s \left| \vec{r} + \frac{\vec{q}}{2} \right\rangle dr_1 dr_2.$$
(5.95)

O elemento de matriz a ser integrado em (5.95) pode ser reescrito como

$$\left\langle \vec{r} - \frac{\vec{q}}{2} \middle| \rho_s \left| \vec{r} + \frac{\vec{q}}{2} \right\rangle \equiv \langle a \ b | \rho_s | c \ d \rangle,$$
(5.96)

definidos por

$$a \equiv r_1 - \frac{q_1}{2}, \qquad b \equiv r_2 - \frac{q_2}{2},$$
(5.97)

$$c \equiv r_1 + \frac{q_1}{2}, \qquad d \equiv r_2 + \frac{q_2}{2}.$$
 (5.98)

Observando a segunda igualdade na expressão (5.91) é imediato notar que basta substituir $x_1 = a$, $x_2 = b$, $y_1 = c$ e $y_2 = d$. Efetuando tal substituição e simplificando os termos chegamos em

$$\left\langle \vec{r} - \frac{\vec{q}}{2} \middle| \rho_s \left| \vec{r} + \frac{\vec{q}}{2} \right\rangle = C_{\zeta\xi} \exp[-\tilde{f}], \qquad (5.99)$$

 com

$$\tilde{f} = \frac{1}{2\langle q_{\xi}^2 \rangle} (r_1 - r_2)^2 + \frac{\langle q_{\xi}^2 \rangle}{2\hbar^2} (q_1 - q_2)^2 +$$
(5.100)

$$+\frac{1}{8\langle q_{\zeta}^2\rangle}(r_1+r_2)^2 + \frac{\langle q_{\zeta}^2\rangle}{8\hbar^2}(q_1+q_2)^2.$$
 (5.101)

Dadas as expressões (5.99) e (5.101), podemos realizar a integração em (5.95). Por consistir em integrais gaussianas, somente o resultado será apresentado:

$$\tilde{W}(X) = C_{\xi\zeta} \frac{\pi}{\sqrt{4AB}} \times \exp[K]$$
(5.102)

com

$$K \equiv -\frac{\langle p_{\xi}^2 \rangle}{2\hbar^2} (q_1 - q_2)^2 - \frac{\langle p_{\zeta}^2 \rangle}{8\hbar^2} (q_1 + q_2)^2$$
(5.103)

$$-\frac{p_1^2}{4(A+B)} - \frac{1}{16(A+B)AB}(p_1 (A-B) + p_2 (A+B))^2,$$
(5.104)

em que definimos

$$A \equiv \frac{1}{2\langle q_{\xi}^2 \rangle} \qquad e \qquad B \equiv \frac{1}{8\langle q_{\zeta}^2 \rangle}. \tag{5.105}$$

Podemos escrever a matriz de covariância σ comparando as exponenciais em (5.102) e (5.94). Assim,

$$-\frac{1}{2}X \ \sigma \ X^T = K, \tag{5.106}$$

ou seja,

$$X \sigma X^{T} = \frac{\langle p_{\xi}^{2} \rangle}{\hbar^{2}} (q_{1} - q_{2})^{2} + \frac{\langle p_{\zeta}^{2} \rangle}{4\hbar^{2}} (q_{1} + q_{2})^{2} +$$
(5.107)

$$+\frac{p_1^2}{2(A+B)} + \frac{1}{8(A+B)AB}(p_1 (A-B) + p_2 (A+B))^2.$$
(5.108)

Identificando cada um dos termos da multiplicação matricial com os do lado direito da expressão acima, podemos concluir que a matriz de covariância é dada por

$$\sigma = \begin{bmatrix} R & 0 & S & 0 \\ 0 & Z & 0 & T \\ S & 0 & R & 0 \\ 0 & T & 0 & Z \end{bmatrix},$$
(5.109)

em que definimos

$$R \equiv \left(\frac{\langle p_{\zeta}^2 \rangle}{4\hbar^2} + \frac{\langle p_{\xi}^2 \rangle}{\hbar^2}\right), \qquad S \equiv \left(\frac{\langle p_{\zeta}^2 \rangle}{4\hbar^2} - \frac{\langle p_{\xi}^2 \rangle}{\hbar^2}\right), \tag{5.110}$$

$$Z \equiv \frac{(A+B)}{8AB}, \qquad T \equiv \frac{(A-B)}{8AB}.$$
(5.111)

Novamente estamos assumindo $A=1/(2\langle q_{\xi}^2\rangle)$ e $B=1/(8\langle q_{\zeta}^2\rangle).$

Obtido o resultado da matriz de covariância, podemos aplicar os métodos apresentados no primeiro capítulo e calcular a negatividade logarítimica, $E_{\mathcal{N}}[\rho_s]$, dada por

$$E_{\mathcal{N}}[\rho_s] = max[0, -\ln\tilde{\nu}_-], \qquad (5.112)$$

em que

$$2\tilde{\nu}_{-}^{2} = \tilde{\Delta} - \sqrt{\tilde{\Delta}^{2} - 4\det\sigma}$$
(5.113)

е

$$\tilde{\Delta} \equiv \det \alpha + \det \beta - 2 \det \gamma, \qquad (5.114)$$

sendo $\alpha,\,\beta \in \gamma$ matrizes 2×2 tais que

$$\sigma = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \gamma^T & \beta \end{pmatrix}. \tag{5.115}$$

Em termos das variáveis definidas em (5.111),

$$\tilde{\nu}_{-} = [(R+S)(Z-T)]^{\frac{1}{2}}.$$
(5.116)

Isso significa que

$$\tilde{\nu}_{-} = \frac{\sqrt{\langle p_{\zeta}^2 \rangle \langle q_{\xi}^2 \rangle}}{2\hbar}.$$
(5.117)

Logo, o emaranhamento é dado por

$$E_{\mathcal{N}}[\rho_s] = max \left[0, \ -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\langle p_{\zeta}^2 \rangle \langle q_{\xi}^2 \rangle}{4\hbar^2} \right) \right].$$
(5.118)

Antes de estudar com mais detalhes a equação (5.118), vamos deixar escrito também um outro resultado bastante pertinente ao estudo de sistemas quânticos abertos: a pureza da matriz densidade, μ . Essa grandeza pode ser calculada [5] por intermédio de

$$\mu \equiv Tr[\rho_s^2] = \frac{1}{\sqrt{\det \sigma}}.$$
(5.119)

É fácil mostrar que

$$\mu = \frac{\hbar^2}{\sqrt{\langle p_{\zeta}^2 \rangle \langle q_{\zeta}^2 \rangle} \sqrt{\langle p_{\xi}^2 \rangle \langle q_{\xi}^2 \rangle}}.$$
(5.120)

Vamos agora substituir os parâmetros do nosso modelo no cálculo de $\tilde{\nu}_{-}$ para observar o comportamento da negatividade logarítimica como função da temperatura do sistema. Para tal, mostra-se necessário o esclarecimento de dois pontos.

Primeiramente, usando as constantes definidas em (5.87) e (5.88) pode-se mostrar sem dificuldades que

$$\omega_0^2 = \frac{4}{\pi} \gamma_{\zeta} \Omega \tag{5.121}$$

e, portanto,

$$\frac{\gamma_{\zeta}}{\omega_0} \approx \frac{\omega_0}{\Omega}.$$
 (5.122)

Em segundo lugar, precisamos de analisar com mais cuidado o cálculo de $\langle p_{\zeta}^2 \rangle$. Para sermos consistentes com a aproximação do regime de partículas muito próximas, no qual as coordenadas ζ e ξ desacoplam-se, é necessário reanalizarmos os limites de integração em (5.86). Nesse regime, temos $\xi(\tau)$ funcionando como um oscilador harmônico, o que o que estabelece uma freqüência de corte para a validade da aproximação, a qual pode ser superestimada por Ω . Desse modo, admitiremos a partir daqui que

$$\langle p_{\zeta}^2 \rangle \propto \int_0^{\Omega} \left(\frac{\omega^3}{\omega^4 + 4\gamma_{\zeta}^2 \omega^2} \right) \coth\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) d\omega.$$
 (5.123)

Podemos colocar a expressão para $\tilde{\nu}_{-}$ dependente das variáveis adimensionais definidas por

$$r \equiv \frac{\gamma_{\zeta}}{\omega_0} \qquad e \qquad A \equiv \left(\frac{k_B T}{\hbar \gamma_{\zeta}}\right)^2.$$
 (5.124)

Pode-se mostrar que essa expressão é dada por

$$\tilde{\nu}_{-}^{2} = \frac{2}{\pi^{2}} r^{4} A^{2} \left[\int_{0}^{\infty} \frac{u \coth(u/2)}{(1 - r^{2} A u^{2})^{2} + r^{4} A u^{2}} du \right] \left[\int_{0}^{(\sqrt{A}/r)} \frac{u^{3} \coth(u/2)}{A u^{4} + 4 u^{2}} du \right].$$
(5.125)

Na igualdade acima, as variáveis de integração também são adimensionais, $u \equiv (\hbar \omega)/(k_B T)$. Para reescrever o limite superior da segunda integral, usamos (5.122).

Plotaremos a seguir o limite de baixas temperaturas (0 < A < 1) e de subamortecimento (0 < r < 1) para a negatividade logarítimica, $E_{\mathcal{N}}[\rho_s] = max[0, -\ln \tilde{\nu}_-]$.



Figura 5.1: Negatividade Logarítimica $E_{\mathcal{N}}$ em função da temperatura parametrizada por A

A figura acima mostra que o emaranhamento entre as partículas diminui com o aumento da temperatura do sistema. Esse decaimento é monótono, dado que nenhum termo oscilatório encontra-se nas expressões. Observe que a origem do gráfico acima é (0.1, 1.0) e não (0, 0).

Note que o linha tracejada decai mais rapidamente que a linha contínua. Esse comportamento é o esperado, dado que quanto maior o acoplamento com o reservatório, menos robustas devem ser as propriedades quânticas do sistema, como o emaranhamento. Tal acoplamento é quantificado por γ_{ζ} e parametrizado por r.
Conclusões

A partir das análises feitas para uma partícula, percebemos que a perda de coerência na superposição de dois pacotes gaussianos está diretamente relacionada com o surgimento de emaranhamento entre o sistema e o reservatório.

A baixas temperaturas e dissipação fraca, o tempo característico desses fenômenos é $\Gamma^{-1} = (N\gamma)^{-1}$, em que N está relacionado à distância inicial entre os pacotes. Nesse mesmo regime, vimos que é possível estimar o tempo de decoerência interna do pacote gaussiano como sendo da ordem de γ^{-1} .

Nossa intenção inicial era descobrir as condições para surgimento de emaranhamento em um sistema quântico não-isolado de dois corpos. Essa questão foi respondida a partir do estudo do modelo para duas partículas brownianas. No modelo, diferentemente do caso de uma partícula, é necessário levar em consideração uma escala de comprimento. Com isso, acaba surgindo naturalmente uma interação efetiva entre os corpos quânticos, mediada pelo banho.

Alcançamos resultados que mostram que tal interação é capaz de gerar nãoseparabilidade na matriz densidade das duas partículas. O emaranhamento no equilíbrio térmico foi estudado em função da temperatura e do acoplamento com o reservatório. Como esperado, tanto o aumento da temperatura quanto o do acoplamento acentuam a queda do emaranhamento.

Apêndice A Resultados dos cálculos do $Tr[\rho_s^2]$

Por clareza e completeza, deixaremos registrados os principais resultados das contas realizadas para o capítulo 3.

Abaixo estão os resultados de $Tr[\rho_1^2]$, $Tr[\rho_1\rho_2]$, $Tr[\rho_1\rho_{int}] \in Tr[\rho_{int}^2]$:

$$Tr[\rho_1^2] = \frac{1}{2\sigma(t)} \left(\frac{2A}{\hbar} + \frac{4\sigma^2 L^2}{\hbar^2} - \frac{\hbar^2 W^2}{4N^2 \sigma^2(t)} \right)^{-1/2},$$
(A.1)

$$Tr[\rho_1\rho_2] = Tr[\rho_1^2] \exp\left[-\frac{K_1^2 z^2}{4N^2 \sigma^2(t)} - \left(2\sigma(t)Tr[\rho_1^2]\right)^{-2} \left[\frac{K_1\hbar z^2}{4N\sigma^2(t)} - \frac{L}{\hbar}\right]^2 z^2\right], \quad (A.2)$$

$$Tr[\rho_1 \rho_{int}] = Tr[\rho_1^2](\exp{-\frac{z^2}{8\sigma^2}})(\exp[\Delta(t)] + \exp[\Delta^*(t)]),$$
(A.3)

em que $\Delta^*(t)$ é o conjugado de

$$\Delta(t) \equiv \frac{z^2 \hbar^2}{16N^2 \sigma^2(t)} \left[\frac{i}{\hbar} K_1 + \frac{1}{4\sigma^2}\right]^2 \tag{A.4}$$

е

$$Tr[\rho_{int}^2] = 2Tr[\rho_1^2] \exp{-\frac{z^2}{4\sigma^2}} [1 + \exp(z^2 g(t))],$$
(A.5)

em que

$$g(t) \equiv \frac{\hbar^2}{64\sigma^4 N^2 \sigma^2(t)} + \frac{\hbar^4 W^2 (2\sigma(t) Tr[\rho_1^2])^{-2}}{256N^4 \sigma^4(t)\sigma^4}.$$
 (A.6)

Nas funções acima estamos usando as definições

$$2\sigma^{2}(t) = \frac{2\sigma^{2}K_{1}^{2}(t) + \hbar C_{1}(t)}{N^{2}(t)}$$
(A.7)

е

$$W = W(t) \equiv \frac{4\sigma^2 L K_1}{\hbar^2} - \frac{B}{\hbar}.$$
(A.8)

Com exceção de z e σ , todas as outras variáveis são funções do tempo e já foram definidas ao longo do texto, capítulo 3.

Para conseguir plotar as funções A(t), $B(t) \in C(t)$, também foram necessárias algumas aproximações. O regime considerado no artigo [9] na seção de baixas temperaturas e limite de dissipação fraca faz com que possamos escrever

$$C(\theta) \approx \frac{M\gamma}{4} \frac{2\theta}{1 - 2\alpha\theta} (1 + p^2(\theta)), \qquad (A.9)$$

$$A(\theta) \approx \frac{M\gamma}{4} \frac{2\theta e^{-2\alpha\theta}}{1 - 2\alpha\theta} (1 + p^2(\theta))$$
(A.10)

е

$$B(\theta) \approx \frac{M\gamma}{4} \frac{4\theta e^{-2\alpha\theta}}{1 - 2\alpha\theta} (1 + p^2(\theta)), \qquad (A.11)$$

em que $p^2(\theta) \equiv (\alpha + S \coth(S\theta))^2$, $S \equiv \omega/\omega_0$. Nesse mesmo regime é considerado $\alpha \ll 1, \theta \gg 1$ e $(\alpha \ \theta) \ll 1$.

Bibliografia

- [1] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, Phys. Rev. Lett., 47, 777-780 (1935);
- [2] A. J. Leggett, Foundations of Physics, Vol. 33, No. 10, October 2003;
- [3] F. Lalöe, arXiv:quant-ph/0209123v2, 14 Nov 2004;
- [4] S. Albeverio and S. Fei J. Opt. B: Quantum Semiclass Opt. 3 2001 223-227;
- [5] Geraldo Adesso and Fabrizio Illuminati, Phys. Rev. A, 72, 032334 (2005);
- [6] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Physica **121A** (1983) 587-616;
- [7] Amir O. Caldeira, Lectures Notes Macroscopic Quantum Phenomena and Quantum Dissipation, IFGW Unicamp and ITP University of Utrecht, April-June 2007;
- [8] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, ed. MacGraw-Hill;
- [9] A. O. Caldeira and A. J. Legget, Phys. Rev. A **31**, 1059 (1985);
- [10] C. Monroe, D.M. Meekhof, B. E. King, D. J. Wineland, Science vol. 272, 1131 (24 MAY 1996);
- [11] Jens Eisert and Martin B. Plenio, arXiv: quant-ph/0111016v3, 24 Jun 2002;
- [12] Oscar Salomón Duarte Muñoz, Dissertação de Mestrado Estudo do acoplamento efetivo entre duas partículas brownianas quânticas, IFGW, Unicamp, Junho de 2006;
- [13] P. Hedegard and A. O. Caldeira, Physica Scripta **35**, 609 (1987);

- [14] O. S. Duarte and A. O. Caldeira, Phys. Rev. Lett. 97, 250601 (2006);
- [15] O. S. Duarte and A. O. Caldeira, Phys. Rev. A 80, 032110 (2009);
- [16] Ulrich Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, 2ed. World Scientific;
- [17] Juan Pablo Paz and Augusto J. Roncaglia, Phys. Rev. Lett. **100**, 220401 (2008);
- [18] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Annals of Phys. 149, 347 (1983).