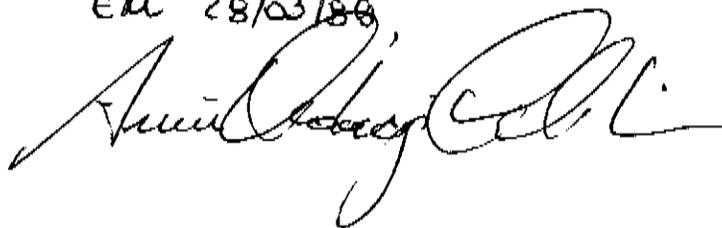


ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE DEFENDIDA
POR PAULO M. V. B. BARONE E APROVADA PELA COMISSÃO JULGADORA.

EM 28/03/88



INFLUÊNCIA DO CAMPO DE RADIAÇÃO

NO PROCESSO DE INTERFERÊNCIA ELETRÔNICA

por

PAULO MONTEIRO VIEIRA BRAGA BARONE

Orientador

AMIR ORDACGI CALDEIRA

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

Campinas, fevereiro de 1988

A Magda

AGRADECIMENTOS

A conclusão deste trabalho é o momento final de um período em que acumulei uma série de experiências pessoais e profissionais, para o que contribuíram muitas pessoas e circunstâncias, às quais desejo expressar aqui os meus agradecimentos.

Em especial ao meu orientador, Professor Amir Ordacgi Caldeira, pela amizade e pela grande dedicação à tarefa nada trivial de orientar.

Aos meus pais, aos que influenciaram na minha opção pela Unicamp, aos meus companheiros de república e de prédio, de sala e proximidades, aos meus amigos em Campinas, no Instituto e em Juiz de Fora, cujos apoio, incentivo, bom relacionamento e galhos quebrados foram fundamentais.

Aos estudantes, professores e funcionários do IFGW com quem convivi, responsáveis pela existência de um ambiente receptivo e favorável no Instituto.

Ao Professor Edison Zacarias da Silva, pela permissão do uso do seu microcomputador para a edição desta tese.

Ao Departamento de Física da UFJF, que propiciou condições para a conclusão deste trabalho.

A Capes e à Fapesp, pelo apoio financeiro.

RESUMO

Desenvolvemos uma formulação quântica não-relativística para tratar a dinâmica de um elétron considerando os efeitos do acoplamento ao seu próprio campo de radiação, os quais dão origem ao amortecimento radiativo. Para isto, utilizamos o processo introduzido por Feynman e Vernon, obtendo o operador densidade reduzido do elétron via integrais de trajetória. No limite clássico, são reproduzidos alguns resultados conhecidos, em particular a equação de movimento de Abraham-Lorentz. Aplicamos os resultados a um problema de interferência eletrônica para investigar os possíveis efeitos dos modos incoerentes do campo nas franjas de interferência.

ABSTRACT

We develop a non-relativistic quantum formulation for the dynamics of an electron taking into account the effects of the coupling to its own radiation field, which give rise to radiation damping. For this purpose, we have applied the Feynman-Vernon approach, obtaining the reduced density operator of the electron via path integrals. In the classical limit, some well known results are reproduced, such as the Abraham-Lorentz equation of motion. We have applied this results to an electron interference problem in order to investigate the possible effects of the field's incoherent modes on the interference fringes.

INDICE

I. INTRODUÇÃO	1
II. O PROBLEMA CLASSICO DO AMORTECIMENTO RADIATIVO	4
III. ESTUDO DO ACOPLAMENTO ELÉTRON-CAMPO DE RADIAÇÃO	11
IV. DINAMICA QUANTICA	26
V. APLICAÇÃO A UM PROBLEMA DE INTERFERENCIA ELETRONICA	35
VI. CONCLUSÕES	44
APENDICE A	A1
APENDICE B	B1
APENDICE C	C1
REFERENCIAS	R1

INFLUÊNCIA DO CAMPO DE RADIAÇÃO

NO PROCESSO DE INTERFERÊNCIA ELETRÔNICA

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Na tentativa de conceber uma descrição para a dinâmica quântica de um elétron radiante, chama a atenção de imediato o fato de que tal sistema apresenta perdas, representadas pelas quantidades de energia, momento linear e momento angular transportadas pela radiação. Estas perdas se refletem sobre o movimento do elétron após a emissão de radiação, dando origem ao efeito conhecido, em eletrodinâmica clássica, como amortecimento radiativo. A dificuldade principal desta tarefa é, portanto, a impossibilidade de se aplicar o esquema canônico tradicional de quantização, uma vez que o sistema de interesse não é fechado e não se enquadra no formalismo Hamiltoniano.

Em compensação, estas características tornam o elétron radiante apropriado para uma abordagem semelhante à utilizada por Caldeira e Leggett para o tratamento quântico de sistemas dissipativos de outra espécie, em particular sistemas cuja descrição clássica recaí na equação de Langevin [1]. Neste

esquema, considera-se o sistema de interesse acoplado a um reservatório, este responsável pelas perdas do primeiro.

No caso aqui enfocado, esta maneira de abordar o problema fica bastante natural, com o campo de radiação do elétron no papel de reservatório e a interação elétron-campo se encarregando do mecanismo de perdas. Aplicando o processo a um sistema realista como um elétron acoplado ao seu próprio campo de radiação, é possível também testar alguns de seus aspectos, tais como a renormalização do potencial. Isto já foi feito para os casos de acoplamento entre elétron e fónons [2] e muon e gás de elétrons [3]. Além disto, pode ser necessário empreender algumas generalizações, suscitadas pelas peculiaridades do sistema. Duas destas questões surgem aqui. Uma, relacionada com a condição inicial de interação entre o sistema de interesse e o reservatório, que é caracterizada pelo equilíbrio do sistema composto no caso de elétron + campo de radiação. Originalmente, Caldeira e Leggett, seguindo Feynman e Vernon [4], trataram a condição inicial desacoplada, em que sistema de interesse e reservatório estão em equilíbrio separadamente e a interação é ligada no instante inicial. Mais recentemente, a condição de interação inicialmente ligada foi discutida por Hakim e Ambegaokar [5] e por Smith e Caldeira [6]. A outra questão diz respeito ao comportamento espectral do reservatório, que aqui se distingue do que foi discutido anteriormente na literatura.

Seguindo o caminho descrito acima, pode ser escrita uma Hamiltoniana para o sistema composto elétron + campo de radiação. Isto permite verificar, de início, a coerência entre o comportamento do elétron no limite clássico e os resultados

conhecidos do amortecimento radiativo.

A partir da Hamiltoniana do sistema composto, é possível ter acesso à dinâmica quântica do elétron, através de um processo de eliminação das variáveis relativas ao reservatório. Isto é proporcionado pelo operador densidade reduzido, obtido segundo Feynman e Vernon, com o uso de integrais de trajetória. Conhecida a dinâmica, diversos problemas quânticos de interesse podem ser tratados.

Nossos principais propósitos neste trabalho são conseguir uma formulação quântica não relativística para o elétron radiante e aplicá-la a um problema de interferência eletrônica para investigar se o acoplamento ao próprio campo de radiação resulta em algum efeito sobre as franjas de interferência.

O trabalho se desenvolve com a estrutura seguinte. No capítulo II, apresentamos brevemente o amortecimento radiativo no contexto clássico, restringindo-nos ao caso não relativístico. No capítulo III, iniciamos o estudo do sistema composto elétron + campo de radiação, encontrando o comportamento espectral do banho, ditado pela forma da interação, e tomando o limite clássico, onde o elétron é descrito pela equação de Abraham-Lorentz [7]. Na sequência, o capítulo IV é dedicado ao cálculo do operador densidade reduzido do elétron, com especial atenção para as questões citadas da condição inicial e do comportamento espectral do campo de radiação. Uma aplicação deste resultado a um problema particular de interferência é feita no capítulo V, e as conclusões finais são apresentadas no capítulo VI.

CAPÍTULO II

O PROBLEMA CLÁSSICO DO AMORTECIMENTO RADIATIVO

Conforme já foi dito, chamamos de amortecimento radiativo o efeito da emissão de radiação sobre o movimento da fonte. Em velocidades não relativísticas, a dinâmica clássica aproximada de um elétron, incluindo o amortecimento radiativo, é descrita pela equação de Abraham-Lorentz [7]

$$m \ddot{\vec{q}} - m\tau \dot{\ddot{\vec{q}}} = \vec{F}_{\text{ext}} \quad (2.1)$$

onde

$$\tau = \frac{2}{3} \frac{e^2}{mc^3} \quad (2.2)$$

Para o elétron, $\tau \approx 10^{-24}$ s. Na equação (2.1), m é a massa do elétron, e , sua carga, e \vec{F}_{ext} , uma força externa aplicada. O termo que representa o amortecimento radiativo é

$$\vec{F}_{\text{rad}} = m\tau \ddot{\vec{q}}, \quad (2.3)$$

de terceira ordem no tempo, o que foge aos padrões habituais da mecânica clássica.

A descrição proporcionada pela equação de Abraham-Lorentz (A-L) não é completamente satisfatória, por motivos que iremos apresentar mais adiante, mas constitui a descrição mais correntemente adotada na literatura, razão pela qual iremos segui-la. De todo modo, não é nosso interesse aqui discutir em profundidade o amortecimento radiativo no contexto clássico, mas somente abordar alguns aspectos que serão úteis no decorrer do texto.

A equação de A-L pode ser obtida por diversos métodos, dos quais dois serão apresentados a seguir. O primeiro destes métodos é baseado na conservação da energia, e servirá apenas para mostrar que a descrição proporcionada pela equação de A-L é fisicamente razoável, pois trata o problema de modo restrito e não fundamental, além de conter inconsistências. Partimos da equação de movimento de Newton, escrita na forma modificada

$$m \ddot{\vec{q}} = \vec{F}_{\text{ext}} + \vec{F}_{\text{rad}}, \quad (2.4)$$

onde \vec{F}_{rad} dá conta das perdas por radiação. A seguir impomos que o trabalho realizado por esta reação da radiação sobre o elétron num intervalo de tempo deve ser igual ao negativo da quantidade de energia irradiada no mesmo intervalo :

$$\int_0^t \vec{F}_{\text{rad}} \cdot \dot{\vec{q}} dt' = - \int_0^t P(t') dt'. \quad (2.5)$$

No lado direito temos a energia irradiada expressa em termos da potência $P(t)$. Em velocidades não relativísticas, a potência é dada pela fórmula de Larmor [7],

$$P(t) = \frac{2e^2}{3c^3} \dot{\vec{q}}^2, \quad (2.6)$$

Inserindo na equação acima e fazendo uma integração por partes, obtemos

$$\int_0^t \vec{F}_{\text{rad}} \cdot \dot{\vec{q}} dt' = - m \tau [(\dot{\vec{q}} \cdot \dot{\vec{q}})_0^t - \int_0^t \ddot{\vec{q}} \cdot \dot{\vec{q}} dt']. \quad (2.7)$$

Nos casos particulares em que o termo integrado se anula, como em movimentos periódicos, a expressão encontrada para \vec{F}_{rad} é idêntica a (2.3) e (2.4) se torna idêntica a (2.1).

O outro método é baseado no estudo da auto-interação entre o elétron e seus campos próprios. Neste ponto de vista o elétron é considerado como uma distribuição de carga de extensão finita cujas partes interagem mutuamente através dos campos retardados. Devido ao retardo, cai a validade da terceira lei de Newton, e o balanço das forças de auto-interação dá origem a um efeito dinâmico da radiação sobre a carga. Com isto, Abraham e Lorentz tentaram formular um modelo puramente eletromagnético para o elétron.

Para calcular este efeito, suponhamos que o elétron seja caracterizado pelas densidades de carga e corrente $\rho(\vec{r})$ e $\vec{j}(\vec{r})$, e esteja sujeito aos campos totais

$$\vec{E} = \vec{E}_{\text{ext}} + \vec{E}_p, \quad (2.8)$$

$$\vec{B} = \vec{B}_{\text{ext}} + \vec{B}_p, \quad (2.9)$$

onde os índices p indicam os campos próprios.

O argumento inicial de Lorentz para este desenvolvimento é que o momento mecânico do elétron tem origem eletromagnética, isto é, está relacionado com o efeito descrito acima. Em outras palavras, quando escrevemos a equação de Newton na forma

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}_{\text{ext}}, \quad (2.10)$$

assumimos então que

$$\vec{F}_{\text{ext}} = \int (\rho \vec{E}_{\text{ext}} + \frac{1}{c} \vec{J} \times \vec{B}_{\text{ext}}) d^3r_p \quad (2.11)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = - \int (\rho \vec{E}_p + \frac{1}{c} \vec{J} \times \vec{B}_p) d^3r. \quad (2.12)$$

Nas expressões acima, as integrações são efetuadas sobre o volume do elétron. A integral no lado direito de (2.12) tem o significado de força própria ou de auto-interação.

Passamos agora ao cálculo da força própria. Adotamos, para a carga do elétron, o modelo simples de uma distribuição esfericamente simétrica, homogênea e rígida, em que as velocidades

e acelerações de todos os pontos são iguais em cada instante. Como simplificação adicional, vamos nos fixar num instante em que a velocidade do elétron seja nula. Levando isto em conta e escrevendo (2.12) em termos dos potenciais escalar ϕ_p e vetor \vec{A}_p , ficamos com

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \int \rho \left(\vec{\nabla} \phi_p + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}_p}{\partial t} \right) d^3r. \quad (2.13)$$

Aqui ϕ_p e \vec{A}_p são os potenciais retardados de Liénard-Wiechert. Para uma distribuição da carga eletrônica muito concentrada, os instantes de tempo atual e retardado diferem muito pouco, o que torna válido tomar uma expansão dos potenciais retardados em série de Taylor em torno do instante atual. Procedendo assim, encontramos

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d\vec{p}}{dt} \Big|_0 + \frac{d\vec{p}}{dt} \Big|_1 + \text{termos de ordens superiores}, \quad (2.14)$$

sendo

$$\frac{d\vec{p}}{dt} \Big|_0 = \frac{4}{3} \frac{U}{c^2} \ddot{\vec{q}} = \frac{4}{3} m_e \ddot{\vec{q}} \quad (2.15)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} \Big|_1 = - \frac{2}{3} \frac{e}{c^3} \dddot{\vec{q}} = - m r \dddot{\vec{q}}. \quad (2.16)$$

O termo de ordem zero, equação (2.15), contém a contribuição eletromagnética para a massa do elétron. Sendo a o

raio clássico do elétron, ela tem a forma

$$m_e = \frac{U}{c^2} = \frac{e}{c^2 a}, \quad (2.17)$$

divergindo no caso do elétron pontual, o que torna infinita a contribuição eletromagnética para a massa eletrônica. O fator $4/3$, presente no termo de massa, é indício de que a suposição de Lorentz acerca da origem puramente eletromagnética do momento mecânico do elétron não é correta, devendo haver, além desta, contribuições de natureza não eletromagnética. Técnicas de renormalização são usadas para dar solução a estes problemas.

O termo de primeira ordem, equação (2.16), representa a reação da radiação, sendo interessante observar que não depende de nenhum parâmetro relacionado com a distribuição de carga.

Já os termos de ordens superiores em (2.14) são todos proporcionais a potências positivas de a , de modo que contribuem muito pouco no caso de raio finito, e se anulam quando se toma o limite para o elétron pontual. Tomando então só os dois primeiros termos desta equação, encontramos justamente a equação de A-L.

Este tratamento do amortecimento radiativo, por meio de uma equação de movimento de terceira ordem no tempo, o que exige três constantes de integração, conduz ainda a outras questões importantes. Primeiro, o sinal do termo de amortecimento causa o aparecimento de soluções divergentes para a equação de A-L. De acordo com Dirac [8], pode-se eliminar tais soluções através da escolha de condições iniciais para a posição e a velocidade e da imposição de uma condição final, compatível com a situação física em foco, para a aceleração. Por outro lado, o custo deste

procedimento é o surgimento de problemas de causalidade [9]. Têm sido discutidas também maneiras de contornar estas dificuldades, mas não se pode, ainda, dizer que elas estejam de todo resolvidas.

No apêndice A estudamos a solução da equação de A-L em casos de interesse e detalhamos a aplicação da condição de Dirac para excluir as soluções divergentes.

CAPÍTULO III

ESTUDO DO ACOPLAMENTO ELÉTRON-CAMPO DE RADIAÇÃO

Neste capítulo, descrevemos a interação entre um elétron e seu próprio campo de radiação considerando o sistema composto elétron + campo.

O ponto de partida é a Lagrangeana do sistema composto, escrita como

$$L = L_0 + L_I + L_{EM} , \quad (3.1)$$

onde

$$L_0 = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V_0(q) , \quad (3.2)$$

$$L_I = \int \left(\frac{1}{c} \vec{J} \cdot \vec{A} - \rho \phi \right) d^3r , \quad (3.3)$$

$$L_{EM} = \frac{1}{8\pi} \int \left[\left(\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \vec{\nabla} \phi \right)^2 - (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 \right] d^3 r, \quad (3.4)$$

são as Lagrangeanas do elétron, de interação e do campo de radiação, respectivamente. Nestas expressões, \vec{A} e ϕ são os potenciais próprios do elétron, que só está sujeito a interações com agentes externos por meio de $V_0(\vec{q})$. Não usamos índices p aqui por não haver possibilidade de confusão.

A Lagrangeana de interação, equação (3.3), acopla a velocidade do elétron ao potencial vetor. No entanto, como

$$\vec{r} \cdot \dot{\vec{A}} = \frac{d}{dt} (\vec{r} \cdot \vec{A}) - \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}, \quad (3.5)$$

então é possível mudar o acoplamento para a forma $\dot{\vec{q}} \cdot \vec{A}$. É fácil ver porque isto acontece: a derivada total em (3.5) não contribui para as equações de movimento, podendo ser, portanto, ignorada.

Usando o gauge de radiação, $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ e $\phi = 0$, as expressões (3.3) e (3.4) se tornam mais simples:

$$L_I = - \int \frac{1}{c} \dot{\vec{r}} \cdot \frac{d\vec{A}}{dt} \delta(\vec{r} - \vec{q}) d^3 r, \quad (3.6)$$

$$L_{EM} = \frac{1}{8\pi} \int \left[\left(\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right)^2 - (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 \right] d^3 r. \quad (3.7)$$

Podemos agora calcular os momentos conjugados à coordenada do elétron, \vec{p} , e ao potencial vetor, \vec{P} , e passar ao formalismo Hamiltoniano. A Hamiltoniana do sistema completo fica na forma

$$H = H_0 + H_I + H_{EM} + \text{contra-termo.} \quad (3.8)$$

Aqui

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0(\vec{q}), \quad (3.9)$$

.....(elétron)

$$H_I = 4\pi e c \vec{q} \cdot \vec{P}(\vec{q}, t), \quad (3.10)$$

.....(interação)

$$H_{EM} = \int [2\pi c^2 \vec{P}^2 + \frac{1}{8\pi} (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2] d^3r, \quad (3.11)$$

.....(campo)

$$\text{contra-termo} = 2\pi \int \rho^2 r^2 d^3r. \quad (3.12)$$

A razão para o nome contra-termo, dado à expressão acima, é simples. Este termo, presente na Hamiltoniana inicial, equação (3.8), cancela uma renormalização ao potencial externo $V_0(\vec{q})$ que surge tanto na análise das equações clássicas de movimento quanto no cálculo do operador densidade quântico do elétron. Nos momentos convenientes, estes fatos serão explicitados.

O próximo passo é expandir \vec{A} e \vec{P} em modos normais, como abaixo:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \lambda} q_{\vec{k}\lambda}(t) \vec{u}_{\vec{k}\lambda}(\vec{r}), \quad (3.13)$$

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi c^2} \sum_{\vec{k}, \lambda} p_{\vec{k}\lambda}(t) \vec{u}_{\vec{k}\lambda}(\vec{r}) \quad (3.14)$$

Escolhemos os modos $\vec{u}_{\vec{k}\lambda}(\vec{r})$ como sendo ondas planas normalizadas numa caixa de grandes dimensões cujo volume é V , o que corresponde a

$$\vec{u}_{\vec{k}\lambda}(\vec{r}) = \left(\frac{2\pi c^2}{V} \right)^{1/2} \hat{e}_{\vec{k}\lambda} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (3.15)$$

Nesta equação, os $\hat{e}_{\vec{k}\lambda}$ são os versores das direções de polarização ($\lambda = 1, 2$), que satisfazem a

$$\vec{k} \cdot \hat{e}_{\vec{k}\lambda} = 0 \quad (3.16)$$

$$\hat{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \hat{e}_{\vec{k}'\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (3.17)$$

A ortonormalidade dos modos $\vec{u}_{\vec{k}\lambda}(\vec{r})$ se expressa por

$$\int \vec{u}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{u}_{\vec{k}'\lambda'} d^3r = 2\pi c^2 \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \quad (3.18)$$

Introduzindo os modos normais em (3.11), esta se torna

$$H_{EM} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \lambda} \left[\frac{p_{\vec{k}\lambda}^2}{2} + \frac{1}{2} k^2 c^2 q_{\vec{k}\lambda}^2 \right] \quad (3.19)$$

ou, como as direções de polarização são equivalentes,

$$H_{EM} = \sum_{\vec{k}} \left[\frac{p_{\vec{k}}^2}{2} + \frac{1}{2} k^2 c^2 q_{\vec{k}}^2 \right] \quad (3.20)$$

Isto mostra que o campo de radiação do elétron se comporta como um conjunto infinito de osciladores desacoplados entre si e, por outro lado, acoplados ao próprio elétron através da Hamiltoniana de interação, equação (3.10). Em outras palavras, o campo de radiação atua como um banho de osciladores acoplados ao elétron.

Passemos a manipular agora a Hamiltoniana de interação.

Introduzindo os modos normais, ela toma a forma

$$H_I = \frac{e}{c} \sum_{\vec{k}, \lambda} p_{\vec{k}\lambda} \left[\vec{q} \cdot \vec{u}_{\vec{k}\lambda}(\vec{q}) \right] \quad (3.21)$$

Mas

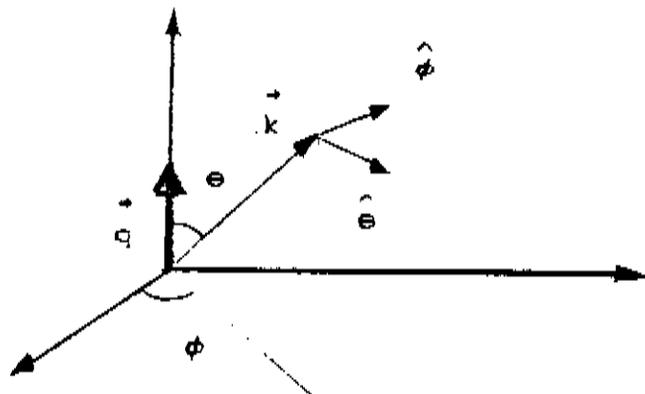
$$\vec{q} \cdot \vec{u}_{\vec{k}\lambda}(\vec{q}) = \left(\frac{2\pi c^2}{V} \right)^{1/2} (\vec{q} \cdot \hat{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{q}) \quad (3.22)$$

O produto escalar do lado direito de (3.22) é facilmente calculado se construímos um sistema de eixos em que \vec{q} está sobre o eixo z e \vec{k} é um vetor qualquer, com coordenadas (k, θ, ϕ) , e tomamos

$$\hat{\epsilon}_{\vec{k}\lambda} \equiv \hat{e} \quad (3.23)$$

$$\hat{e}_{kz} = \hat{\phi}, \quad (3.24)$$

como é mostrado na figura abaixo.



Com isto, (3.21) fica

$$H_1 = - \left(\frac{2\pi}{v} \right)^{1/2} e \sum_{\vec{k}} p_{\vec{k}} q \text{ sen} \theta \exp(ikq \text{ cos} \theta), \quad (3.25)$$

onde identificamos $p_{\vec{k}_1}$ com $p_{\vec{k}}$. Fazendo \vec{k} variar continuamente, convertamos a soma de (3.25) em integral, resultando em

$$H_1 = - \frac{e}{4\pi} \int_0^{\infty} p_k q k^2 dk \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \exp(ikq \text{ cos} \theta) \text{ sen}^2 \theta d\theta \quad (3.26)$$

Nesta última expressão, identificamos a integral em θ com uma representação integral para a função de Bessel de ordem 1 [10],

$$J_1(kq) = \frac{1}{\pi} kq \int_0^{\pi} \exp(ikq \text{ cos} \theta) \text{ sen}^2 \theta d\theta. \quad (3.27)$$

Deste modo, (3.26) se escreve

$$H_1 = - \frac{e}{2} \int_0^{\infty} p_k J_1(kq) k dk . \quad (3.28)$$

Para desenvolver ainda mais a Hamiltoniana de interação, vamos utilizar a representação em série das funções de Bessel (10), que fornece

$$J_1(kq) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!(s+1)!} \left(\frac{kq}{2} \right)^{2s+1} \quad (3.29)$$

O comportamento desta função de Bessel é bem conhecido. Ela tem valor nulo na origem e oscila à medida em que cresce o argumento, aproximando-se de zero para grandes valores deste, isto é, para altas frequências. Quando a frequência é baixa, o crescimento da função é dominado pelo primeiro termo da série acima. Se nos limitarmos a esta região de frequências baixas, obteremos uma aproximação para a equação (3.28) da forma

$$H_1 = - \frac{e}{4} \int_0^{\Omega} p_k q k^2 dk . \quad (3.30)$$

A restrição às frequências baixas se deve ao fato de que não estamos interessados em investigar nada relacionado com a estrutura interna do elétron, mas somente os efeitos globais do acoplamento deste com a radiação. Estaremos portanto interessados em dimensões muito superiores à dimensão eletrônica característica a , o que implica em tempos t tais que

$$t \gg \tau_0 = \frac{a}{c} \quad (3.31)$$

ou frequências tais que

$$\omega \ll \Omega = \frac{2\pi}{\tau_0} \quad (3.32)$$

No caso clássico, a dimensão característica é o raio clássico do elétron, e no caso quântico, este papel é representado pela largura do pacote de onda eletrônico.

Em seguida, para modificar a forma de H_I , fazemos uma transformação canônica conservando q e p idênticos, mas trocando entre si q_k e p_k . Em símbolos,

$$P \rightarrow p, \quad (3.33)$$

$$q \rightarrow q, \quad (3.34)$$

$$P_k \rightarrow ck q_k, \quad (3.35)$$

$$q_k \rightarrow \frac{P_k}{ck}. \quad (3.36)$$

Esta transformação deixa inalteradas as expressões de H_0 , H_{EM} e do contra-termo, mas converte o termo de interação em

$$H_I = - \frac{ec}{4} \int_0^{\Omega} q_k q k^2 dk. \quad (3.37)$$

Nesta última expressão da Hamiltoniana de interação, notamos que o acoplamento entre o elétron e o banho de osciladores se faz na

forma coordenada-coordenada. Prosseguindo, podemos retornar a uma soma do tipo

$$H_I = \sum_k a_k q_k \dot{q} , \quad (3.38)$$

onde os a_k são os coeficientes de acoplamento entre as coordenadas do elétron e dos osciladores. Para isto, é necessário definir a densidade espectral do banho,

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_k \frac{a_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k) , \quad (3.39)$$

que contém informações sobre o comportamento espectral do reservatório. Introduzindo esta expressão em (3.37), vemos que a requerida conversão em uma soma como (3.38) exige que a densidade espectral assuma a forma particular

$$J(\omega) = \begin{cases} m\tau \omega^2, & \omega \leq \Omega \\ 0 & , \omega > \Omega \end{cases} . \quad (3.40)$$

É oportuno estabelecer, neste momento, uma comparação entre o tratamento dado, neste capítulo, ao acoplamento entre um elétron e seu próprio campo de radiação, e o dado por Caldeira e Leggett a sistemas dissipativos ôhmicos [1]. Caldeira e Leggett partem de uma Hamiltoniana idêntica a (3.8), com acoplamento coordenada-coordenada e contra-termo, e impõem a forma que deve ter a densidade espectral para que, no limite clássico, seja obtido o comportamento correto. No caso elétron-campo, esta

Hamiltoniana se escreve de modo natural, uma vez que o campo de radiação é um banho de osciladores com existência concreta, aparece de início o contra-termo e o acoplamento revela ser do tipo coordenada-coordenada. Além disto, não impomos aqui a forma da densidade espectral, mas ela decorre, de forma também natural, da natureza da interação. Cabe verificar se, nestas condições, é obtida a equação de movimento de A-L no limite clássico.

Para este propósito, vamos tomar as equações de Hamilton de (3.8),

$$m \ddot{q} = - V'_0(q) - \sum_k a_k q_k \quad (3.41)$$

e

$$\ddot{q}_k = - c^2 k^2 q_k - a_k q \quad (3.42)$$

A eliminação das coordenadas q_k dos osciladores do reservatório é feita tomando a transformada de Laplace da segunda das equações acima,

$$\tilde{q}_k = - \frac{s q_k(0) + \dot{q}_k(0) + a_k \tilde{q}(s)}{s^2 + c^2 k^2} \quad (3.43)$$

e levando a transformada inversa desta na outra equação, o que resulta em

$$m \ddot{q} = - V'_0(q) + L^{-1} \left\{ \sum_k \left[a_k \frac{a_k q_k(0) + \dot{q}_k(0)}{s^2 + c^2 k^2} + \frac{a_k^2 \ddot{q}(s)}{s^2 + c^2 k^2} \right] \right\} \quad \dots (3.44)$$

O primeiro dos termos dentro da soma fornece

$$F(t) = \sum_k \left[a_k q_k(0) \cos ckt + \frac{a_k \dot{q}_k(0)}{ck} \sin ckt \right] \quad (3.45)$$

Para analisar este termo, vamos calcular seu valor médio e sua correlação num ensemble de sistemas identicamente preparados, supondo que o reservatório esteja em equilíbrio termodinâmico no instante inicial. Isto nos permite afirmar que

$$\langle q_k(0) \rangle = 0, \quad (3.46)$$

$$\langle \dot{q}_k(0) \rangle = 0, \quad (3.47)$$

$$\langle q_k(0) q_{k'}(0) \rangle = 0, \quad (3.48)$$

$$\langle q_k(0) \dot{q}_{k'}(0) \rangle = \frac{K_F T}{m_k \omega_k^2} \epsilon_{kk'}, \quad (3.49)$$

$$\langle \dot{q}_k(0) q_{k'}(0) \rangle = \frac{K_F T}{m_{k'}} \epsilon_{kk'}, \quad (3.50)$$

onde usamos o teorema da equipartição, que tem validade quando falamos de limite clássico. Com as expressões acima, é imediato calcular o valor médio de $F(t)$:

$$\langle F(t) \rangle = 0 . \quad (3.51)$$

Da mesma forma, a correlação fica

$$\langle F(t) F(t') \rangle = \frac{2K_B T}{n} \int_0^\infty \frac{\omega J(\omega)}{\omega} \cos \omega(t-t') d\omega , \quad (3.52)$$

que, integrada, se torna

$$\begin{aligned} \langle F(t) F(t') \rangle = & \frac{2m\tau K_B T}{n} \left\{ \frac{\Omega^2 \text{sen}\Omega(t-t')}{(t-t')} + \right. \\ & \left. + \frac{2}{(t-t')} \frac{d}{dt} \frac{\text{sen}\Omega(t-t')}{(t-t')} \right\} . \end{aligned} \quad (3.53)$$

Estas expressões concordam com a expressão fornecida pelo teorema da flutuação-dissipação [11].

$$\langle F(t) F(t') \rangle = \frac{\hbar}{n} \int_0^\infty J(\omega) \coth \left(\frac{\hbar\omega}{2K_B T} \right) \cos \omega(t-t') d\omega , \quad (3.54)$$

para $J(\omega)$ dada pela equação (3.40) e $K_B T \gg \hbar\omega$.

O termo restante em (3.44) é

$$L^{-1} \left\{ \tilde{R}(\omega) \tilde{q}(\omega) \right\} . \quad (3.55)$$

com

$$\tilde{R}(s) = \sum_k \frac{a_k^2}{s^2 + c^2 k^2} \quad (3.56)$$

Usando a densidade espectral do reservatório, podemos escrever

$$\tilde{R}(s) = \frac{2m\tau}{\pi} \int_0^\Omega \frac{s'^4}{s^2 + s'^2} ds' \quad (3.57)$$

Reescrevendo o integrando, isto se torna

$$\tilde{R}(s) = \frac{2m\tau}{\pi} \int_0^\Omega \left(s'^2 - s^2 + \frac{s^4}{s^2 + s'^2} \right) ds' \quad (3.58)$$

que, após integração, fornece

$$\tilde{R}(s) = \frac{2m\tau\Omega^3}{3\pi} - \frac{2m\tau}{\pi} \frac{\Omega}{s^2} + m\tau s^2 + \frac{2m\tau}{\Omega\pi} + O\left(\frac{1}{\Omega^3}\right) \quad (3.59)$$

Para Ω muito grande, as contribuições dos dois últimos termos podem ser desprezadas. Finalmente, a transformada inversa em (3.55) corresponde, em (3.44), à expressão

$$\frac{2m\tau\Omega^3}{3\pi} q(t) - \frac{2m\tau}{\pi} \frac{\Omega}{s} q(t) + m\tau q(t) \quad (3.60)$$

O termo da esquerda representa uma renormalização ao potencial externo, devida ao acoplamento com o banho. No entanto, este termo é cancelado pelo contra-termo presente na Hamiltoniana (3.8), de modo que o potencial permanece inalterado [1]. Por sua

vez, o termo do meio na equação acima renormaliza a massa eletrônica, enquanto que o da direita é claramente identificado com a reação da radiação.

Isto mostra que a equação de movimento clássica correspondente à Hamiltoniana (3.8) é justamente a equação de A-L, com a massa eletrônica renormalizada pela contribuição eletromagnética, isto é, modificada para $m' = m + \Delta m$, com

$$\Delta m = \frac{2m\tau\Omega}{\pi} \quad (3.61)$$

O significado disto é que modelar o sistema de nosso interesse através de (3.8), na aproximação de frequências baixas, implica em que a descrição clássica resultante é a mesma que tem sido obtida de outras formas. A diferença é que aqui conseguimos escrever uma Hamiltoniana para o sistema, o que nos permite tratá-lo quanticamente no esquema canônico e obter a formulação quântica correspondente.

Antes de passar ao contexto quântico, porém, é necessário analisar melhor as correções sofridas pelo potencial externo e pela massa do elétron. Faremos o cálculo destas correções para o caso simples de distribuição de carga homogênea, esfericamente simétrica, de raio a . A renormalização de massa se torna, neste caso,

$$\Delta m = \frac{4}{3} \frac{U}{c^2} = \frac{4}{3} m_e \quad (3.62)$$

idêntica ao coeficiente do termo inercial em (2.15). Por sua vez, a renormalização de potencial é extraída diretamente de (3.60)

$$\Delta V = - \frac{1}{3 \pi} m \tau \Omega^3 q^2 , \quad (3.63)$$

enquanto que o contratermo, de (3.12), para este modelo simples, dá

$$\text{c.t.} = \frac{9}{32 \pi^3} m \tau \Omega^3 q^2 . \quad (3.64)$$

A forma do contratermo é justamente a forma requerida para cancelar a renormalização de potencial, o mesmo ocorrendo com a ordem de grandeza, embora os valores não coincidam exatamente neste modelo. Podemos então formular outro modelo, ligeiramente diferente, em que o cancelamento dos dois termos ocorra de forma exata. Por exemplo, se tomarmos uma distribuição de carga da mesma forma que antes, mas com raio

$$a' = \left(\frac{2}{\pi^2} \right)^{1/3} \frac{3 a}{4} \approx 0,51 a , \quad (3.65)$$

o cancelamento é exato.

Enfim, obtivemos uma descrição para o sistema composto elétron+campo de radiação que produz o limite clássico correto e que nos permite utilizar o processo canônico para passar ao problema quântico, que é de fato o interesse deste trabalho.

CAPÍTULO IV

DINÂMICA QUÂNTICA

Neste capítulo, apresentamos o tratamento do sistema de interesse no limite quântico e os resultados encontrados. A idéia é converter as variáveis de posição e momento do sistema composto em operadores satisfazendo às relações de comutação canônicas, o que é possível por ser o sistema composto descrito por uma Hamiltoniana no limite clássico.

Dada, portanto, a Hamiltoniana

$$H = H_c(q,p) + H_I(q,q_k) + H_{EM}(q_k,p_k) \quad (4.1)$$

podemos escrever o operador densidade do sistema composto como

$$\hat{\rho}(t) = \exp(-iHt/\hbar) \hat{\rho}(0) \exp(-iHt/\hbar). \quad (4.2)$$

De acordo com (4.1), este operador depende não só das variáveis q e p do sistema de interesse, mas também das variáveis do reservatório. O problema é eliminar esta última dependência, o que é feito observando que os valores médios de operadores $\hat{O}(q,p)$ calculados através de (4.2) são da forma

$$\langle \hat{O}(q,p) \rangle = \text{tr}_{SR} \{ \hat{\rho}(t) \hat{O}(q,p) \}, \quad (4.3)$$

onde S e R significam, respectivamente, sistema de interesse e reservatório, e que isto pode ser reescrito como

$$\text{tr}_S \{ [\text{tr}_R \hat{\rho}(t)] \hat{O}(q,p) \} = \text{tr}_S \{ \tilde{\rho}(t) \hat{O}(q,p) \}, \quad (4.4)$$

com

$$\tilde{\rho}(t) = \text{tr}_R \hat{\rho}(t). \quad (4.5)$$

Nestas últimas expressões, $\tilde{\rho}(t)$ é chamado o operador densidade reduzido do sistema de interesse, e não envolve variáveis do reservatório, podendo, portanto, ser utilizado na descrição desejada do limite quântico. O objetivo deste capítulo será, então, o cálculo do operador densidade reduzido do elétron radiante, nas condições que serão especificadas oportunamente.

Usaremos a notação \vec{R} para representar a configuração do reservatório, isto é, para representar o vetor

$$\vec{R} = (R_1, R_2, \dots, R_N), \quad (4.6)$$

onde os R_k são valores assumidos pelas coordenadas q_k dos osciladores do banho. A relação de completeza para a base de autovetores de posição do sistema composto é

$$\iint dx' d\vec{R}' |x'\vec{R}'\rangle \langle x'\vec{R}'| = \hat{1} \quad (4.7)$$

Na representação de coordenadas, o operador densidade reduzido é escrito como

$$\tilde{\rho}(x,y,t) = \langle x | \tilde{\rho}(t) | y \rangle = \iint d\vec{R} d\vec{Q} \delta(\vec{R}-\vec{Q}) \langle x\vec{R} | \hat{\rho}(t) | y\vec{Q} \rangle \quad (4.8)$$

Com o auxílio de (4.2) e (4.7), isto se torna

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(x,y,t) = & \iiint dx' dy' d\vec{R}' d\vec{Q}' d\vec{R} \langle x\vec{R} | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | x'\vec{R}' \rangle * \\ & * \langle x'\vec{R}' | \hat{\rho}(0) | y'\vec{Q}' \rangle \langle y'\vec{Q}' | \exp(i\hat{H}t/\hbar) | y\vec{R} \rangle \end{aligned} \quad (4.9)$$

Nesta expressão, identificamos os propagadores de Feynman

$$K(x,\vec{R},t;x',\vec{R}',0) = \langle x\vec{R} | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | x'\vec{R}' \rangle \quad (4.10)$$

$$K^*(y,\vec{R},t;y',\vec{Q}',0) = \langle y'\vec{Q}' | \exp(i\hat{H}t/\hbar) | y\vec{R} \rangle \quad (4.11)$$

e escrevemos então

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(x,y,t) = & \iiint dx' dy' d\vec{R}' d\vec{Q}' d\vec{R} K(x,\vec{R},t;x',\vec{R}',0) * \\ & * \langle x'\vec{R}' | \hat{\rho}(0) | y'\vec{Q}' \rangle K^*(y,\vec{Q},t;y',\vec{Q}',0) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Neste ponto, surge a primeira condição particular a ser discutida em nosso cálculo do operador densidade reduzido, relacionada com a condição inicial de interação entre o sistema de interesse e o reservatório. Esta condição inicial é expressa pelo elemento de matriz

$$\hat{\rho}(\vec{x}'R', \vec{y}'Q', 0) = \langle \vec{x}'R' | \hat{\rho}(0) | \vec{y}'Q' \rangle. \quad (4.13)$$

Em determinadas situações, tem sentido pensar que a interação sistema-reservatório possa estar inicialmente desligada e seja bruscamente conectada em $t=0$. Isto simplifica bastante o desenvolvimento, e de fato foi o ponto de vista seguido nas primeiras abordagens de problemas envolvendo sistemas compostos [1,4].

No entanto, este não é o caso da interação entre o elétron e seus campos, onde inicialmente o reservatório e o sistema de interesse já estão acoplados e em equilíbrio termodinâmico. Podemos, adicionalmente, efetuar alguma medida ou preparação de estado do elétron em $t=0$, mas não ligar ou desligar a interação neste ou noutro instante. Como desejamos obter a evolução temporal do operador densidade reduzido do elétron a partir de uma situação genérica, em geral envolvendo a preparação do pacote de onda eletrônico no instante inicial, manteremos a possibilidade de fazê-lo da maneira mostrada a seguir. Nestas circunstâncias, podemos escrever o operador densidade do sistema composto no instante inicial como

$$\hat{\rho}(\vec{x}'\vec{R}', y'\vec{Q}', 0) = \hat{\rho}_0(x', y', 0) \hat{\rho}_{eq}(\vec{x}'\vec{R}', y'\vec{Q}') \quad (4.14)$$

onde $\hat{\rho}_0$ representa a preparação realizada em $t=0$ e ρ_{eq} , o operador densidade em equilíbrio do sistema composto. Identificamos também

$$\hat{\rho}_0(x', y', 0) = \tilde{\rho}_0(x', y', 0). \quad (4.15)$$

Voltando à equação (4.12), vamos introduzir a representação dos propagadores em termos de integrais de trajetória,

$$K(\vec{x}, \vec{R}, t; y, \vec{Q}, 0) = \int_{x'}^x \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D\vec{x}(t) D\vec{R}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(t), \vec{R}(t)]\right), \quad (4.16)$$

e utilizar (4.14) e (4.15) para obter

$$\tilde{\rho}(x, y, t) = \iint dx' dy' J(x, y, t; x', y', 0) \tilde{\rho}_0(x', y', 0). \quad (4.17)$$

Em (4.16), o funcional S é a ação do sistema composto,

$$S[\vec{x}(t), \vec{R}(t)] = \int_0^t L[\vec{x}(t'), \vec{R}(t'), \dot{\vec{x}}(t'), \dot{\vec{R}}(t')] dt', \quad (4.18)$$

e em (4.17),

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

$$* [F[x(t), y(t)]] \quad (4.19)$$

Nesta última equação, S_0 representa a ação do elétron isolado e o funcional $F[x(t), y(t)]$ é o chamado funcional de influência [4,12], dado por

$$F[x(t), y(t)] = \iiint d\vec{R}' d\vec{Q}' d\vec{R} \rho_{e,q}^{\vec{x}'\vec{R}', \vec{y}'\vec{Q}', 0} \int_{\vec{R}=\vec{R}'}^{\vec{R}} \int_{\vec{Q}=\vec{Q}'}^{\vec{Q}} D\vec{R} D\vec{Q} *$$

$$* \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ S_I[x(t), R(t)] - S_I[y(t), Q(t)] + S_{EM}[R(t)] - S_{EM}[y(t)] \right\}.$$

...(4.20)

Os índices I e EM nas ações dizem respeito, respectivamente, à interação e ao campo de radiação.

O cálculo do operador densidade reduzido do elétron radiante, que é o objetivo deste capítulo, é efetuado através de (4.17), desde que sejam conhecidos o funcional de influência, equação (4.20), e a função $J(x, y, t; x', y', 0)$, equação (4.19). Esta função é interpretada como o propagador do operador densidade reduzido, enquanto que o funcional de influência carrega toda a informação acerca dos efeitos do banho (campo de radiação) sobre o sistema de interesse (elétron).

Dado o interesse em aplicar os resultados destes cálculos a um problema de interferência, trataremos o caso de um elétron livre.

Também é relevante a especificação do comportamento espectral do reservatório, através da densidade espectral obtida no capítulo anterior [equação (3.40)]

Problemas formalmente semelhantes a este, no que

concerne à condição inicial, são tratados por Hakim e Ambegaokar [5] e por C. Morais Smith e Caldeira [6]. Os primeiros estudam a dinâmica quântica de uma partícula livre acoplada a um reservatório linearmente dissipativo, com a condição de interação inicialmente ligada. Os demais estudam diversas formas da condição inicial, também para dissipação linear, e aplicações à partícula livre e ao oscilador harmônico.

Por outro lado, as situações encontradas nestas referências diferem totalmente da encontrada aqui com relação à densidade espectral, que tem comportamento cúbico no caso da interação elétron-campo de radiação. Isto produz algumas alterações nos resultados aqui obtidos.

Para simplificar as expressões, transformamos as variáveis do elétron para variáveis relativas, por meio de

$$q = \frac{1}{2} (x + y) \quad (4.21)$$

$$\xi = x - y \quad (4.22)$$

Os cálculos são demasiado longos e estão apresentados no apêndice B. A seguir vão apenas os resultados. Primeiro, o funcional de influência ($\beta = 1/k_B T$).

$$F[q, \xi] = \exp \left\{ \frac{i m^* \tau^2}{\hbar} \int_0^{\tau} \xi(u) \dot{q}(u) du \right\} \exp S_2 \quad (4.23)$$

onde temos

$$S_2 = \left\{ \frac{m' \tau'}{\hbar \pi} \int_0^\Omega f_1(\omega) d\omega \int_0^t \int_0^t \xi(u) \xi(v) \cos \omega(u-v) du dv \right\} +$$

$$+ \left\{ \frac{m' \tau'}{\hbar \pi} \int_0^\Omega f_2(\omega) d\omega \left\{ \xi'^2 + \xi' \omega \int_0^t \xi(u) g(u) du \right\} \right\} \quad (4.24)$$

$$f_1(\omega) = \omega^2 \cot h \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) \quad (4.25)$$

$$f_2(\omega) = \frac{\omega \cot h \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2} \right)}{\left(\frac{m'}{m} \right)^2 + (\omega \tau)^2} \quad (4.26)$$

$$g(u) = 2u\omega \cos \omega u - 2 \left(\frac{m'}{m} \right)^2 \sin \omega u \quad (4.27)$$

Agora, o propagador do operador densidade reduzido,

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = \int_{q'}^q \int_{\xi'}^{\xi} Dq(t) D\xi(t) \exp \left[iS_1 + S_2 \right], \quad (4.28)$$

com

$$S_1 = \frac{m'}{\hbar} \int_0^t [\tau \xi(u) \dot{q}(u) + \xi(u) \dot{q}(u)] du \quad (4.29)$$

Por fim,

$$\tilde{\rho}(q, \xi, t) = \frac{m'}{\hbar t} \iint dq' d\xi' \exp \left[iS_{scL} + S_{scL} \right] \tilde{\rho}_0(q', \xi', 0), \quad (4.30)$$

onde S_{1CL} e S_{2CL} são as ações S_1 e S_2 calculadas nos caminhos clássicos de S_1 , conforme se mostra no apêndice B, e cujas expressões são dadas abaixo:

$$S_{1CL}(q, \xi) = \frac{m'}{h} (q \xi - q' \xi') \quad (4.31)$$

$$S_{2CL}(\xi) = \frac{m' \tau'}{h \pi} \left\{ \xi^2 F(t) + \xi \xi' G(t) + \xi'^2 H(t) \right\}, \quad (4.32)$$

onde as funções F , G e H estão explicitadas no apêndice B.

O resultado (4.30) dá a dinâmica do elétron radiante em termos da condição inicial a que ele estiver submetido. Se especificarmos o operador densidade reduzido em $t=0$, podemos conhecer os efeitos do acoplamento do elétron ao seu campo de radiação sobre o seu comportamento quântico. Em particular, podemos estudar a interferência eletrônica levando em conta a radiação, preparando convenientemente pacotes de onda eletrônicos. Este será o objeto do próximo capítulo.

CAPÍTULO V

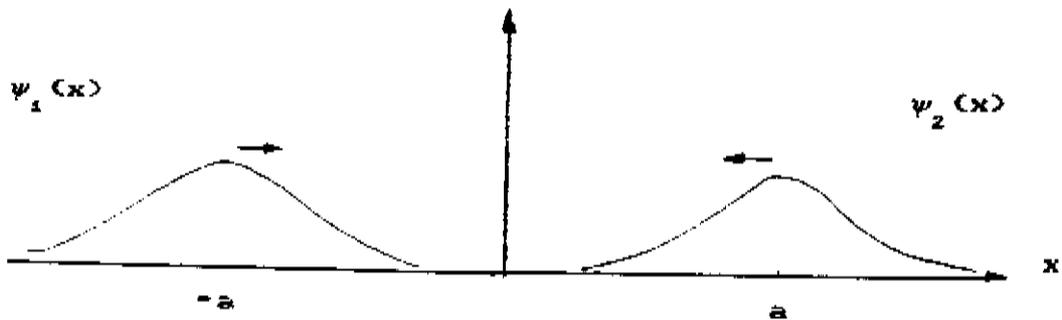
APLICAÇÃO A UM PROBLEMA DE INTERFERÊNCIA

Uma maneira de testar os efeitos do acoplamento com a radiação sobre a dinâmica quântica do elétron seria realizar uma experiência de interferência com elétrons. Um exemplo idealizado seria uma experiência de fenda dupla, em que um feixe de elétrons emitidos por um catodo fosse preparado num anteparo com uma fenda dupla e coletado por detectores dispostos noutro anteparo colocado atrás do primeiro e paralelamente a este. Ao longo do trajeto entre o catodo emissor e o primeiro anteparo, o elétron se propaga em equilíbrio com o campo de radiação. A preparação de estado na passagem pelas fendas produz a emissão de radiação. Numa situação como esta, o formalismo desenvolvido no capítulo anterior nos permite conhecer a evolução temporal do operador densidade reduzido e, portanto, avaliar os efeitos da radiação no processo de interferência. Mesmo que agisse algum campo bastante localizado na região das fendas, os resultados do apêndice A garantiriam a

validade disto, pois a solução da equação clássica para uma força impulsiva é praticamente igual à da partícula livre.

Um experimento imaginário bastante semelhante a este foi sugerido por Caldeira e Leggett [13], ao analisarem a possibilidade de testar uma previsão teórica de destruição da interferência quântica por efeito de um amortecimento ôhmico.

Trataremos aqui uma situação ainda mais simples, mas igualmente capaz de fornecer a informação desejada acerca da influência do acoplamento com a radiação num processo de interferência eletrônico. Consideremos o seguinte problema unidimensional. Em $t=0$, dois pacotes gaussianos, livres, de larguras σ , centrados em a e $-a$, são dirigidos um contra o outro com momentos $-p$ e p ($p = \hbar k$), respectivamente, conforme a figura.



O estado deste sistema pode ser descrito por

$$w(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x), \quad (5.1)$$

onde

$$\psi_1(x) = \exp(ikx) \exp\left\{-\frac{(x+a)^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (5.2)$$

$$\psi_2(x) = \exp(-ikx) \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right\}. \quad (5.3)$$

Para um estado assim, o operador densidade se escreve na forma

$$\tilde{\rho}_0(x,y,0) = \tilde{\rho}_1(x,y,0) + \tilde{\rho}_2(x,y,0) + \tilde{\rho}_{INT}(x,y,0), \quad (5.4)$$

onde as duas primeiras parcelas descrevem as densidades de probabilidade relativas a cada pacote, como se estivesse sozinho, e a última, a interferência. Este é, portanto, o termo de interesse, e omitiremos os demais daqui em diante. Primeiro, vejamos o que se passa quando não há dissipação. Se $a \gg \sigma$, o termo de interferência é, no início, muito pequeno. À medida em que passa o tempo, a superposição entre os dois pacotes vai crescendo, até atingir o máximo no instante em que eles passam pela origem, e depois torna a decair até se tornar desprezivelmente pequena. Devemos esperar, também, que os centros dos pacotes sigam a trajetória clássica, neste caso uma trajetória de partícula livre, e que as larguras dos pacotes aumentem.

Para ver o que ocorre no caso de acoplamento com a radiação, vamos calcular a evolução temporal do termo de interferência.

$$\tilde{\rho}_{INT}(x,y,0) = \tilde{\psi}_1(x)\tilde{\psi}_2^*(y) + \tilde{\psi}_2(x)\tilde{\psi}_1^*(y). \quad (5.5)$$

que, em termos das coordenadas q e ξ , fica na forma

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{INT}(q, \xi, 0) = & C \exp(2ikq) \exp\left\{-\frac{1}{\sigma^2}(q^2 + \xi^2/4 + a\xi + a^2)\right\} + \\ & + \exp(-2ikq) \exp\left\{-\frac{1}{\sigma^2}(q^2 + \xi^2/4 - a\xi + a^2)\right\}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

A constante de normalização, C , é

$$C = \frac{1}{2\sigma\sqrt{\pi}}. \quad (5.7)$$

Levando isto à expressão (4.30) para o operador densidade, observamos que a solução é encontrada com facilidade, mediante a integração de gaussianas. Procedendo assim, chegamos a

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{INT}(q, \xi, t) = & \frac{m'}{2\hbar t} \left(\frac{\pi}{-\alpha(t)}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{im'}{\hbar t} q\xi\right) \exp(-a^2/\sigma^2) * \\ & * \left\{ \exp\left[-\frac{\sigma^2}{4} \left(\frac{m'}{\hbar t} \xi + 2k\right)^2\right] \exp\left[-\frac{\beta_1^2(t)}{4\alpha(t)}\right] + \right. \\ & \left. + \exp\left[-\frac{\sigma^2}{4} \left(\frac{m'}{\hbar t} \xi - 2k\right)^2\right] \exp\left[-\frac{\beta_2^2(t)}{4\alpha(t)}\right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde

$$\beta_1(t) = A(t) \xi + B(t) - \frac{im'}{\hbar t} q \quad (5.9)$$

$$\beta_2(t) = A(t) \xi - B(t) - \frac{im'}{\hbar t} q \quad (5.10)$$

$$A(t) = \frac{\sigma^2 m'^2}{2\hbar^2 t^2} + \frac{m' \tau'}{\hbar \pi} G(t) \quad (5.11)$$

$$B(t) = \frac{\sigma^2 m' k}{\hbar \pi} + \frac{a}{\sigma^2} \quad (5.12)$$

$$\alpha(t) = -\frac{1}{4\sigma^2} - \frac{\sigma^2 m'^2}{4\hbar^2 t^2} + \frac{m' \tau'}{\hbar \pi} H(t). \quad (5.13)$$

A informação relevante é fornecida pelos termos diagonais do operador densidade reduzido, obtidos tomando $x=y$ ou, equivalentemente, $\xi=0$. Fazendo isto em (5.8) e rearranjando os termos, esta se torna (omitindo os índices INT)

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(q, \xi=0, t) &= \tilde{\rho}(q, t) = \frac{2\sqrt{\pi}}{\alpha(t)} \exp\left\{-\frac{[q + a(t)]^2}{2\sigma^2(t)}\right\} \exp\left\{-\frac{[q - a(t)]^2}{2\sigma^2(t)}\right\} * \\ &* \cos\left\{\frac{m' q B(t)}{2\hbar t \alpha(t)}\right\} \exp\left\{-\frac{m' \tau' H(t)}{\hbar \pi \alpha(t)} \left(\sigma^2 k^2 + \frac{a^2}{\sigma^2}\right)\right\}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

com

$$a(t) = a - \frac{\hbar k}{m'} t \quad (5.15)$$

$$\sigma^2(t) = \sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m'^2 \sigma^2} - \frac{4\hbar t \tau'}{\pi m'} H(t) \quad (5.16)$$

Este é o resultado final desejado, e podemos passar a discutí-lo.

Primeiro, a forma de (5.14) é quase idêntica à forma que

teria o termo de interferência no caso de não haver dissipação, que é

$$\hat{\rho}_{INT}(q,t) = 2 \sqrt{\hat{\rho}_1(q,t)} \sqrt{\hat{\rho}_2(q,t)} \cos f(q,t), \quad (5.17)$$

onde a função $f(q,t)$ descreve as franjas de interferência, e atinge o máximo quando os centros dos dois pacotes coincidem. Isto ocorre devido à não modificação do caráter linear do processo de interferência. A diferença, quando se leva em conta o acoplamento com a radiação, é que surge um termo multiplicativo a mais, modulando todo o termo de interferência. Este é o fato mais importante a ser analisado, e retornaremos a ele mais adiante.

Por enquanto, vejamos o significado das duas gaussianas em (5.14). Cada um delas representa um dos pacotes de onda, cujos centros se situam em $a(t)$, e cujas larguras são $\sigma(t)$, funções que evoluem no tempo de acordo com (5.15) e (5.16). Em particular, a expressão de $a(t)$ mostra que os centros dos pacotes seguem as trajetórias clássicas de partícula livre, com velocidades

$$v = \frac{\hbar k}{m} \quad (5.18)$$

como se deveria esperar. Também a expressão para a largura $\sigma(t)$ não apresenta novidades.

O argumento do cosseno em (5.14) é responsável pelas franjas de interferência, da mesma forma que no caso sem dissipação, embora tenha forma mais complicada.

Voltando agora ao termo multiplicativo adicional no

termo de interferência, notamos que sua forma exponencial pode modificar radicalmente a natureza do resultado do processo. Podemos ver que

$$D(t) = \exp \left\{ - \frac{m' \tau' H(t)}{h n \alpha(t)} \left(\sigma^2 k^2 + \frac{a^2}{c^2} \right) \right\} \quad (5.19)$$

apresenta os limites

$$D(0) = 1 \quad (5.20)$$

$$D(\infty) = \exp \left[- \left(\sigma^2 k^2 + \frac{a^2}{c^2} \right) \right] \quad (5.21)$$

Este último, como $\sigma^2 k^2$ pode ser feito muito pequeno e a^2/c^2 muito grande, de acordo com a preparação do estado inicial, é praticamente

$$D(\infty) = \exp \left[- \frac{a^2}{c^2} \right] \quad (5.22)$$

Em palavras, isto quer dizer que o termo multiplicativo acaba, num tempo longo (t_1 , digamos), por destruir as franjas de interferência e, conforme (5.4), a dinâmica dos pacotes passa a ser descrita apenas pelo movimento independente dos mesmos.

Mais ainda, a análise detalhada do argumento da

exponencial em $D(t)$ mostra que ele pode ser linearizado, de modo a escrever

$$D(t) \approx \exp(-\Gamma t), \quad (5.23)$$

onde Γ^{-1} dá uma escala de tempo relevante para a destruição da interferência. A complexidade das funções envolvidas, porém, dificulta bastante a obtenção de Γ em função dos demais parâmetros do problema, e portanto não seguiremos este caminho. Argumentamos apenas que, exercendo controle sobre a preparação do estado inicial, podemos encurtar a escala de tempo em que a interferência é destruída. Isto pode ser visto notando que, de acordo com (5.22), a interferência é destruída, de toda forma, após o tempo t_1 . No entanto, se aumentarmos a razão a/c , podemos manipular a taxa com que $D(t)$ se aproxima de 0, definindo uma nova escala de tempo de destruição de interferência (t_2 , digamos), bem mais curta que a anterior, t_1 , e tornando ainda mais drástico o efeito.

Um problema similar é estudado por Caldeira e Leggett [13], com dissipação ôhmica, conduzindo também à destruição do termo de interferência em escalas de tempo muito mais curtas que o tempo de relaxação das partículas envolvidas.

O valor residual em (5.22) é decorrente de termos desprezados a superposição inicial dos dois pacotes, o que é válido para $a \gg c$.

Resta questionar a causa da destruição da interferência. Por um lado, o amortecimento radiativo, ténue na maior parte das situações clássicas, a não ser naquelas em que forças extremamente grandes atuam em intervalos extremamente pequenos, tem efeito

diminuto sobre a dinâmica dos pacotes, pois somente no momento da preparação é emitida radiação. Por outro lado, o acoplamento com a radiação não introduz somente o amortecimento radiativo, mas também a influência das flutuações do campo sobre o elétron. Mesmo em situações de movimento sem perturbações externas, as flutuações do campo são relevantes, e aqui são o único processo que pode ser responsável pela destruição da interferência.

No caso de dissipação ôhmica, o amortecimento tem papel preponderante sobre as flutuações, uma vez que estes mecanismos de dissipação são incomparavelmente mais intensos que o amortecimento radiativo, mesmo para dissipação fraca.

Em resumo, o estudo da interferência eletrônica, levando em conta o acoplamento com a radiação, mostra que o termo de interferência acaba por se anular, em razão das flutuações, e então a dinâmica dos pacotes superpostos se torna a dinâmica de dois pacotes distinguíveis e independentes entre si.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES

Dentro do contexto clássico, o amortecimento radiativo tem sido bastante discutido, mas o tratamento mais adotado, através da equação de A-L, apresenta problemas tanto conceituais quanto em suas decorrências. Sem entrar neste mérito, fomos capazes de encontrar diversos resultados conhecidos utilizando um processo diferente. Como exemplo, reproduzimos a equação de A-L e obtivemos a contribuição eletromagnética à massa eletrônica.

Tomando como ponto de partida o acoplamento entre o elétron e seu próprio campo de radiação, que se mostrou frutífero já no limite clássico, obtivemos uma formulação quântica para o problema, por meio de integrais de trajetória, na aproximação de dipolo, ou de baixas frequências. A aplicação desta formulação (não relativística) a um problema protótipo de interferência eletrônica permite-nos tirar a conclusão de que, embora o amortecimento causado pelo acoplamento de um elétron ao seu próprio campo de radiação seja em geral fraco, ou mesmo nulo.

outro efeito deste acoplamento pode ser determinante para o comportamento quântico: a introdução de flutuações.

Como foi discutido no capítulo anterior, a interferência é destruída pelo acoplamento com o campo, e não podemos atribuir este fato ao amortecimento radiativo, mas às flutuações.

Ao lado disto, aplicar a idéia de interação com um reservatório a um sistema realista como o elétron radiante ilustrou muitos aspectos formais do modelo, dentre os quais o cancelamento entre contratermo e renormalização de potencial.

Apesar de produzir estes bons resultados, a aproximação de baixas frequências pode não ser satisfatória em problemas envolvendo escalas de distância comparáveis com o comprimento de onda Compton do elétron ou então velocidades relativísticas. Certamente é de muito interesse conduzir o problema para estes caminhos, que podem inclusive ajudar a desvendar novos fatos acerca da natureza da autointeração eletromagnética.

APÉNDICES

APÊNDICE A

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE MOVIMENTO CLÁSSICA

Resolveremos aqui a equação de A-L para os casos de interesse neste trabalho, aplicando a condição de Dirac de modo a excluir as soluções divergentes. Vamos nos limitar a uma dimensão e a forças externas $F(t)$ dependentes somente do tempo. Deste modo, a equação se escreve

$$m \ddot{q} + m\tau \dot{q} = F(t) . \quad (A.1)$$

Com o auxílio do fator integrante $\exp(-t/\tau)$, esta equação pode ser facilmente integrada, resultando na solução geral

$$\dot{q}(t) = \left[\dot{q}(0) - \frac{1}{m\tau} \int_0^t F(t') \exp(-t'/\tau) dt' \right] \exp(t/\tau) . \quad (A.2)$$

Para uma aceleração inicial genérica, a aceleração dada pela expressão acima diverge com o fator $\exp(t/\tau)$. Isto ocorre

inclusive no caso de partícula livre, como se vê em (A.2), levando a um comportamento incompatível com as condições físicas vigentes neste caso. Há, porém, uma escolha particular possível para $q(0)$ para a qual a aceleração se comporta da maneira fisicamente correta, isto é, para a qual $q(t)$ tende a se anular em tempos muito longos [8,14]. Devemos, para tanto, escolher

$$q(0) = \frac{1}{m\tau} \int_0^{\infty} F(t') \exp(-t'/\tau) dt' , \quad (A.3)$$

o que conduz à solução

$$q(t) = \frac{1}{m\tau} \int_t^{\infty} F(t') \exp(-t'/\tau) dt' . \quad (A.4)$$

A escolha (A.3) é chamada, às vezes, de condição de Dirac, visto que foi por ele sugerida. Na forma como está escrita acima, ela dá conta dos casos em que se deve ter $q(\infty) = 0$. Em outras situações, a exigência é de que a aceleração final seja compatível com a física envolvida.

Como se pode ver nas equações (A.3) e (A.4), a aplicação da condição de Dirac dá origem a uma pré-aceleração para o elétron, além de vincular a aceleração à força atuante em instantes no futuro. Neste sentido, a equação de A-L é acausal [9]. No entanto, estes efeitos são significativos somente quando $F(t)$ varia de modo apreciável em intervalos da ordem de τ . Por exemplo, o movimento do elétron é influenciado pelas forças que agem num intervalo da ordem de τ no futuro, e a aplicação de forças gera acelerações prévias num intervalo de τ .

O fenômeno da pré-aceleração é discutido por Feynman e

Wheeler [15], que concluem não ser possível distinguir entre interações adiantadas e retardadas em intervalos da ordem de τ .

Têm sido feitas também tentativas no sentido de obter-se, para o movimento de partículas radiantes, levando em conta o amortecimento radiativo, uma formulação exata, livre de acausalidade e de soluções divergentes ou auto-aceleradas. Em determinado limite, tais formulações tentativas recaem na equação de A-L, de modo que se atribui às aproximações o surgimento destas dificuldades.

Prosseguindo agora na solução da equação clássica, estudemos primeiro um elétron livre. Neste caso, (A.3) se transforma em

$$\ddot{q}(0) = 0 \quad (\text{A.5})$$

e portanto a aceleração dá

$$\ddot{q}(t) = 0, \quad (\text{A.6})$$

em acordo com o que se espera. Esta expressão é trivialmente integrada, fornecendo

$$q(t) = q(0) + \dot{q}(0) t. \quad (\text{A.7})$$

O próximo caso de interesse é o de uma força constante, atuante num intervalo limitado, como abaixo.

$$F(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ F_0, & 0 < t < t_0 \\ 0, & t > t_0 \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Obteremos as soluções em separado para cada intervalo. Para $t < 0$, a aceleração é

$$\ddot{q}(t) = \frac{F_0}{m} \exp(t/\tau) [1 - \exp(-t_0/\tau)] \quad (A.9)$$

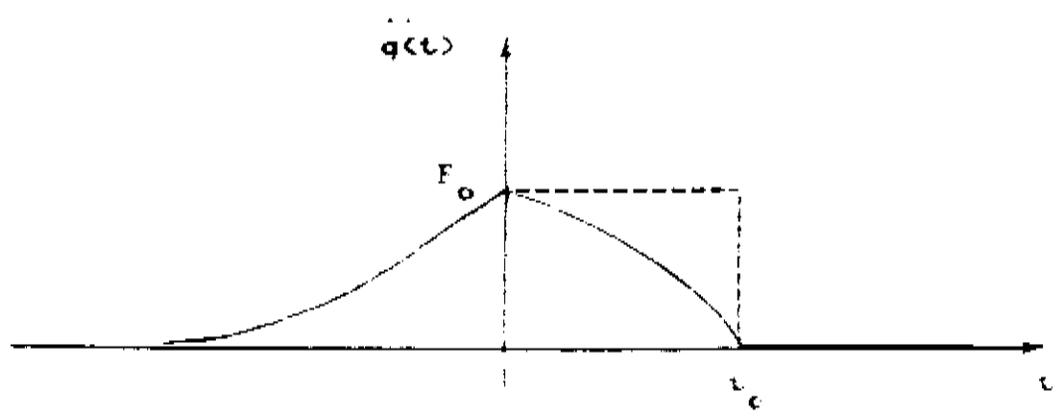
Para $0 < t < t_0$,

$$\ddot{q}(t) = \frac{F_0}{m} \left[1 - \exp[(t-t_0)/\tau] \right] \quad (A.10)$$

e para $t > t_0$,

$$\ddot{q}(t) = 0 \quad (A.11)$$

O gráfico abaixo mostra qualitativamente estes resultados.



Integrando de novo para encontrar a posição como função do tempo, os resultados são os seguintes. Para $0 < t < t_0$

$$\begin{aligned}
q(t) = q(0) + \dot{q}(0) t - \frac{F_0 \tau}{m} \left(1 - \exp(-t_0/\tau) \right) t + \\
+ \frac{F_0 \tau^2}{m} \left(1 - \exp(-t_0/\tau) \right) \left(\exp(t/\tau) - 1 \right) .
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Para $0 < t < t_0$,

$$\begin{aligned}
q(t) = q(0) + \dot{q}(0) t + \frac{F_0 t}{m} \left(\frac{t}{2} + \tau \exp(-t_0/\tau) \right) - \\
- \frac{F_0 \tau^2}{m} \exp(-t_0/\tau) \left(\exp(t/\tau) - 1 \right) .
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Para $t > t_0$,

$$\begin{aligned}
q(t) = q(0) + \dot{q}(0) t + \frac{F_0 t_0}{m} \left(t - t_0 - \tau \exp(-t_0/\tau) \right) - \\
- \frac{F_0 \tau}{m} \left(1 - \exp(-t_0/\tau) \right) (\tau + t - t_0) .
\end{aligned} \tag{A.14}$$

Nos interessam particularmente forças constantes que agem em intervalos muito curtos. Nestes casos, as equações acima para a posição se reduzem à equação (A.7), mesmo que a $F(t)$ seja extremamente grande, significando que o elétron tem comportamento de partícula livre.

APÊNDICE B

CÁLCULO DO OPERADOR DENSIDADE REDUZIDO

Mostramos neste apêndice os passos que conduzem à obtenção do operador densidade reduzido do elétron, definido no capítulo IV. O caso em foco é de uma partícula livre, submetida a uma interação inicialmente ligada, e um reservatório cuja densidade espectral é cúbica.

Hakim e Ambegaokar [5] discutem um caso que difere deste somente no comportamento espectral do reservatório. No entanto, um de seus resultados intermediários vale para $J(\omega)$ qualquer, e será aproveitado em nosso desenvolvimento, razão pela qual indicaremos como foi obtido.

Para uma partícula livre acoplada via coordenada-coordenada a um banho de osciladores, a Hamiltoniana se escreve como

$$H = \frac{P^2}{2m} + \sum_k \left[\frac{P_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right] + \sum_k a_k q_k q + \sum_k \frac{a_k^2 q^2}{2m_k \omega_k^2},$$

onde o último termo à direita é o contratermo responsável pelo cancelamento da renormalização de potencial.

Do ponto de vista dos osciladores do banho, o caminho clássico da partícula age, sobre cada oscilador, como uma força dependente do tempo. Daí, como os osciladores são desacoplados entre si, podemos encontrar as suas dinâmicas quânticas através do produto dos operadores de evolução temporal $V_k(t)$ de todos estes osciladores forçados, como mostram as equações abaixo:

$$|\psi_k(t)\rangle = V_k(t) |\psi_k(0)\rangle \quad (\text{B.2})$$

$$V_S(t) = \prod_k V_k(t). \quad (\text{B.3})$$

O funcional de influência descreve o efeito do reservatório na propagação da partícula, e pode ser expresso em termos dos operadores acima como

$$\tilde{\rho}_0(x', y', 0) F(x(t), y(t)) = \text{tr}_R \left\{ \tilde{\rho}_0(x', y', 0) V_V^\dagger(t) V_S(t) \right\}, \quad (\text{B.4})$$

para uma condição inicial genérica do sistema composto.

Com a condição (4.14), isto fornece, para a parte imaginária,

$$F_I(x, y) = \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} \int_0^t \int_0^u [x(u) - y(u)] \alpha(u-s) [x(s) + y(s)] ds du \right\}, \quad (\text{B.5})$$

com

$$a_i(u-s) = - \sum_k \frac{a_k^2}{2m_k \omega_k} \text{sen } \omega_k (u-s), \quad (\text{B.6})$$

e para a parte real,

$$F_r(x,y) = \exp \left\{ - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \coth \left[\frac{\beta E_{\alpha}}{2} \right] \left| \sum_{\gamma} \left[\frac{\mu_{\gamma} \omega_{\gamma}}{2} \right]^{1/2} (A_{\alpha}^{\gamma} I_{\gamma} - B_{\alpha}^{\gamma} I_{\gamma}^*) \right|^2 \right\}, \quad \dots(\text{B.7})$$

com as diversas definições abaixo:

$$I_{\gamma} = 1 (y'-x') + \omega_{\gamma} \int_0^t [x(u) - y(u)] \exp (i \omega_{\gamma} u) du \quad (\text{B.8})$$

$$A_{\alpha}^{\gamma} = - \frac{1}{2} \left[\frac{\mu_{\gamma} \omega_{\gamma}}{E_{\alpha}} \right]^{1/2} \frac{1}{E_{\alpha} + \omega_{\gamma}} \left\{ \sum_{\beta} \frac{\mu_{\beta} \omega_{\beta}^2}{(E_{\alpha}^2 - \omega_{\beta}^2)^2} \right\}^{-1/2} \quad (\text{B.9})$$

$$B_{\alpha}^{\gamma} = \frac{1}{2} \left[\frac{\mu_{\gamma} \omega_{\gamma}}{E_{\alpha}} \right]^{1/2} \frac{1}{E_{\alpha} - \omega_{\gamma}} \left\{ \sum_{\beta} \frac{\mu_{\beta} \omega_{\beta}^2}{(E_{\alpha}^2 - \omega_{\beta}^2)^2} \right\}^{-1/2} \quad (\text{B.10})$$

$$\mu_{\gamma} = \frac{a_{\gamma}^2}{m_{\gamma} \omega_{\gamma}^4} \quad (\text{B.11})$$

As funções A_{α}^{γ} e B_{α}^{γ} são provenientes da diagonalização de (B.1) por meio de transformações unitárias, e os autovalores encontrados são as soluções de

$$1 = \sum_{\alpha} \frac{\mu_{\alpha} \omega_{\alpha}^2}{m (E^2 - \omega_{\alpha}^2)} \quad (B.12)$$

A equação (B.7) pode ser desenvolvida para uma densidade espectral cúbica substituindo as funções A_{α}^{γ} , B_{α}^{γ} e I_{γ} , usando (B.10) e transformando somas existentes em integrais, segundo a técnica do apêndice C. Por sua vez, a equação (B.7) é desenvolvida transformando a soma em integral por meio da densidade espectral, equação (3.40).

Começemos pela parte imaginária. Usando a densidade espectral, (B.6) se torna

$$\begin{aligned} \alpha_{\gamma}(u-s) &= -\frac{1}{\pi} \int_0^{\Omega} m\tau \omega^3 \sin \omega(u-s) d\omega \\ &= \frac{m\tau}{\pi} \frac{d}{d(u-s)} \int_0^{\Omega} m\tau \omega^2 \cos \omega(u-s) d\omega. \end{aligned} \quad (B.13)$$

Escrevendo agora (B.5) em termos das variáveis relativas, equações (4.21) e (4.22), e de (B.13), podemos integrar por partes em s para encontrar

$$\begin{aligned} F_{\gamma}[q, \xi] &= -\frac{im\tau}{h\pi} \left\{ -2 \int_0^{\Omega} \omega^2 d\omega \int_0^1 q(u) \xi(u) du + \right. \\ &\quad \left. + 2q' \int_0^{\Omega} \omega^2 d\omega \int_0^1 \xi(u) \cos \omega u du + \right. \end{aligned}$$

$$+ 2 \int_0^1 du \zeta(u) \int_0^\Omega d\omega \int_0^u \omega^2 \cos \omega(u-s) q(s) ds . \quad (\text{B.14})$$

O primeiro destes termos, integrado em ω , dá a renormalização do potencial,

$$\exp \left\{ \frac{2im\tau\Omega^3}{3h\pi} \int_0^1 q(u)\zeta(u) du \right\} , \quad (\text{B.15})$$

e será omitido a partir deste ponto, pelos motivos já apresentados.

O cálculo da segunda e da terceira das integrais em (B.14) requer um pouco de cuidado, especialmente nas aproximações do tipo

$$\frac{\text{sen } \Omega u}{\pi u} \approx \delta(u) \quad (\Omega \gg 1), \quad (\text{B.16})$$

que podem levar a divergências se o instante $u=0$ for incluído nos intervalos de integração. Uma forma simples de contornar este problema é efetuar as integrais em que surge (B.16) no intervalo $[\epsilon, t]$ e depois tomar o limite $\epsilon \rightarrow 0^+$, mantendo $u=0$ fora deste intervalo. Deste modo, encontramos

$$F_1[q, \xi] = \exp \left\{ \frac{i}{h} m\tau \int_0^1 \zeta(u) q(u) du - \frac{2im\tau\Omega}{h\pi} \int_0^1 \zeta(u) q(u) du \right\} . \quad \dots(\text{B.17})$$

A segunda integral acima é identificada com a renormalização de massa, e será incorporada a esta, de modo que a parte imaginária

do funcional de influência fica sendo apenas a exponencial da primeira das integrais em (B.17), com m' no lugar de m . Faremos também $m'\tau' = m\tau$.

Passemos à parte real, equação (B.7). Seguindo o roteiro delineado acima, chegamos, após algum esforço de cálculo, a

$$F_R[q, \xi] = \exp S_2, \quad (B.18)$$

onde

$$S_2 = \exp \left\{ \frac{m'\tau'}{h\pi} \int_0^1 f_1(\omega) d\omega \int_0^1 \int_0^1 \xi(u) \xi(v) \cos \omega(u-v) du dv \right\} * \\ * \exp \left\{ \frac{m'\tau'}{h\pi} \int_0^\Omega f_2(\omega) d\omega \left\{ \xi'^2 + \xi'\omega \int_0^1 \xi(u) g(u) du \right\} \right\} \quad (B.19)$$

$$f_1(\omega) = \omega^3 \cot h \left(\frac{\beta h \omega}{2} \right) \quad (B.20)$$

$$f_2(\omega) = \frac{\omega \cot h \left(\frac{\beta h \omega}{2} \right)}{\left(\frac{m'}{m} \right)^2 + (\omega\tau)^2} \quad (B.21)$$

$$g(u) = 2u\omega \cos \omega u - 2 \left(\frac{m'}{m} \right)^2 \sin \omega u \quad (B.22)$$

Isto completa a obtenção do funcional de influência, e devemos obter, em seqüência, o propagador do operador densidade reduzido, definido através de (4.19). Para o elétron livre, a ação S_0 é

$$S_0[x(t)] = \int_0^t \frac{1}{2} m \dot{x}^2(u) du \quad (B.23)$$

Assim, (4.19) fica, nas variáveis relativas,

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = \int \int Dq(t) D\xi(t) \exp (iS_1 + S_2) , \quad (B.24)$$

com

$$S_1 = \frac{m'}{h} \int_0^1 [\tau \ddot{\xi}(u) \dot{q}(u) + \dot{\xi}(u) \dot{q}(u)] du . \quad (B.25)$$

Uma maneira conveniente de resolver esta integral funcional dupla é expandir o integrando em torno dos caminhos clássicos de S_1 . As equações de movimento desta ação são

$$m' \ddot{\xi} = 0 \quad (B.26)$$

$$m' \ddot{q} - m' \tau' \ddot{\xi} = 0 , \quad (B.27)$$

cujas soluções fisicamente aceitáveis (cf. apêndice A) são, respectivamente,

$$\bar{\xi}(t) = \xi' t + \xi' \quad (B.28)$$

$$\bar{q}(t) = q' t + q' \quad (B.29)$$

A expansão proposta é

$$q(t) = \bar{q}(t) + \delta q \quad (B.30)$$

$$\xi(t) = \bar{\xi}(t) + \delta\xi. \quad (B.31)$$

Por definição, o caminho clássico torna a ação extrema, e portanto suas variações em primeira ordem se anulam. Aqui, isto se aplica às variações de S_1 . Por outro lado, em S_2 sobrevivem todas as variações, e ficamos com o seguinte:

$$S_1 = S_{1CL} + \text{var. 2a. ordem} \quad (B.32)$$

$$S_2 = S_{2CL} + \text{var. 1a. ordem} + \text{var. 2a. ordem}. \quad (B.33)$$

Acima, as variações em 1a. ordem contém $\delta\xi$, ao passo que as variações em 2a. ordem contém $\delta\xi \delta\xi$ e $\delta\xi \delta q$, mas não $\delta q \delta q$.

Prosseguindo, discretizamos o intervalo de tempo $[0,t]$ introduzindo uma partição no eixo dos tempos. Assim, dadas as dependências das variações, observamos que a integral em (B.24) tem a forma

$$\exp (iS_{1CL} + S_{2CL}) \int DV \exp \left\{ \frac{i}{2} V^t M V + iA^t V \right\}, \quad (B.34)$$

no espaço definido pelas variações discretizadas δq_i e $\delta \xi_j$. As matrizes em (B.34) têm a estrutura

$$A = \begin{bmatrix} 0 \\ a \end{bmatrix} \quad (B.35)$$

$$M = \begin{bmatrix} 0 & b \\ b & c \end{bmatrix}, \quad (B.36)$$

e

$$DV = \prod \frac{dV_i}{\sqrt{2\pi}} \quad (B.37)$$

O resultado conhecido para a integral em (B.34) é

$$(\det M)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} A^t M^{-1} A \right\} \quad (B.38)$$

A equação (B.36) implica em que M^{-1} , por sua vez, tenha a estrutura

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} d & e \\ f & 0 \end{bmatrix}, \quad (B.39)$$

e que, então,

$$A^t M^{-1} A = 0. \quad (B.40)$$

Dai a integração de (B.24) resulta em

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = [f(t)]^{-1} \exp (iS_{1CL} + S_{2CL}), \quad (B.41)$$

onde fizemos

$$(\det M)^{-1/2} = (\det b)^{-1} = [f(t)]^{-1} \quad (B.42)$$

Desenvolvendo as ações S_{1CL} e S_{2CL} , sobre os caminhos

clássicos (B.28) e (B.29) de S_1 , obtemos

$$S_{1CL} = \frac{m'}{h} (\dot{q} \xi - \dot{q}' \xi') \quad (B.43)$$

$$S_{2CL} = \frac{m' \tau'}{h \pi} \left\{ F(t) \xi^2 + G(t) \xi \xi' + H(t) \xi'^2 \right\} \quad (B.44)$$

As funções $F(t)$, $G(t)$ e $H(t)$ são mostradas abaixo:

$$F(t) = \int_0^{\Omega} \frac{f_1(\omega)}{\omega^2} d\omega *$$

$$* \left\{ 1 - \frac{2 \operatorname{sen} \omega t}{\omega t} - \frac{2}{\omega^2 t^2} (\cos \omega t - 1) \right\} \quad (B.45)$$

$$G(t) = 2 \int_0^{\Omega} \frac{f_1(\omega)}{\omega^2} d\omega *$$

$$* \left\{ \frac{4 \operatorname{sen} \omega t}{\omega t} - (2 \cos \omega t + 1) + \frac{2}{\omega^2 t^2} (\cos \omega t - 1) \right\} +$$

$$+ \int_0^{\Omega} f_2(\omega) d\omega *$$

$$* \left\{ \frac{2 \tau'}{i} (\omega t \operatorname{sen} \omega t + \cos \omega t - 1) - 2 \frac{m'^2}{m^2} \left(\frac{\operatorname{sen} \omega t}{\omega t} - \cos \omega t \right) \right\}$$

... (B.46)

$$H(t) = \int_0^{\Omega} \frac{f_1(\omega)}{\omega^2} d\omega *$$

$$* \left\{ 2 \cos \omega t - \frac{6 \sin \omega t}{\omega t} + 3 - \frac{2}{\omega^2 t^2} (\cos \omega t - 1) \right\} +$$

$$+ \int_0^{\Omega} f_2(\omega) d\omega *$$

$$* \left\{ 1 - \frac{2 \tau}{t} (1 - \cos \omega t) + 2 \frac{m'^2}{m^2} \left[\frac{\sin \omega t}{\omega t} - 1 \right] \right\} \quad (B.47)$$

Resta agora encontrar o operador densidade reduzido, que se escreve, em termos das variáveis relativas, como

$$\tilde{\rho}(q, \xi, t) = \iint dq' d\xi' J(q, \xi, t; q', \xi', 0) \tilde{\rho}_0(q', \xi', 0) \quad (B.48)$$

Com o auxílio das equações anteriores, isto se torna

$$\tilde{\rho}(q, \xi, t) = \frac{1}{f(t)} \iint dq' d\xi' \exp \left[iS_{1CL} + S_{2CL} \right] \tilde{\rho}_0(q', \xi', 0) \quad (B.49)$$

faltando ainda calcular a função $f(t)$. Isto será feito através da normalização do operador, impondo que

$$\text{tr } \tilde{\rho}(q, \xi, t) = \int dq \tilde{\rho}(q, \xi=0, t) = 1 \quad (B.50)$$

Procedendo assim, e supondo que $\tilde{\rho}_0(q', \xi', 0)$ seja normalizado, encontramos

$$r(L) = \frac{\hbar t}{m'} \quad (B.51)$$

com o que, finalmente,

$$\hat{\rho}(q, \xi, t) = \frac{m'}{\hbar t} \iint dq' d\xi' \exp \left(iS_{1cL} + S_{2cL} \right) \tilde{\rho}_0(q', \xi', 0). \quad (B.52)$$

Concluimos, assim, a apresentação dos resultados utilizados no capítulo III.

APÊNDICE C

CONVERSÃO DE SOMAS EM INTEGRAIS

Mostraremos aqui como é feita a transformação das somas indicadas no Apêndice B em integrais [5]. Tais somas são da forma

$$S = \sum_{\beta} \frac{m f(E_{\beta})}{2 E_{\beta}^2 \sum_{\gamma} \left\{ \frac{\omega_{\gamma}^2 \mu_{\gamma}}{(E_{\beta}^2 - \omega_{\gamma}^2)^2} \right\}} \quad (C.1)$$

A idéia é usar o Teorema dos Resíduos, segundo o qual, se $F(z)$ é uma função analítica sobre e no interior de um contorno C , exceto num número finito singularidades isoladas a_f dentro de C (se houver), então

$$\oint_C F(z) dz = 2\pi i \sum_f \text{Res } F(a_f) \quad (C.2)$$

As somas (C.1) podem ser escritas como

$$S = \sum_{\beta} S(E_{\beta}) , \quad (C.3)$$

e tentaremos identificar $S(E_{\beta})$ com o resíduo, calculado em E_{β} , de alguma função $F(z)$ que tenha pólos nos pontos E_{β} . Para uma função que se escreva

$$F(z) = \frac{f(z)}{g(z)} , \quad (C.4)$$

o resíduo em $z = E_{\beta}$, desde que $f(E_{\beta}) \neq 0$ e $g(z)$ tenha um zero simples neste ponto, é

$$\text{Res } F(E_{\beta}) = \frac{f(E_{\beta})}{g'(E_{\beta})} . \quad (C.5)$$

Devemos então procurar a função $g(z)$ tal que

$$g'(z) = \frac{2}{m} z^2 \sum_{\gamma} \left\{ \frac{\omega_{\gamma}^2 \mu_{\gamma}}{(z^2 - \omega_{\gamma}^2)^2} \right\} . \quad (C.6)$$

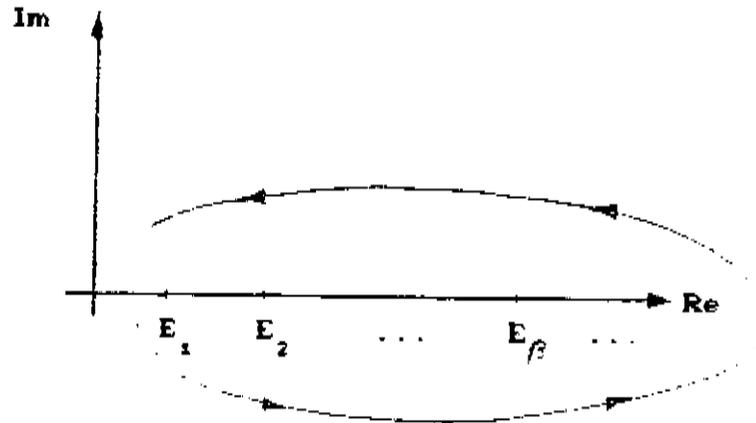
Utilizando a relação (B.11), encontramos

$$g(z) = z \left[1 - \sum_{\gamma} \frac{\mu_{\gamma}}{m} \frac{\omega_{\gamma}^2}{z^2 - \omega_{\gamma}^2} \right] , \quad (C.7)$$

donde então

$$S = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \left[z \left(1 - \sum_{\gamma} \frac{\mu_{\gamma}}{m} \frac{\omega_{\gamma}^2}{z^2 - \omega_{\gamma}^2} \right) \right]^{-1} f(z) dz \quad (C.8)$$

O contorno C é indicado na figura abaixo.



A expressão entre colchetes, no denominador da integral, pode ser reescrita como

$$1 - \frac{2}{m n} \int_0^{\alpha} \frac{J(\omega)}{\omega(z^2 - \omega^2)} d\omega \quad (C.9)$$

Agora introduzimos a densidade espectral, dada em (3.40), e manipulamos o integrando, o que leva a

$$\begin{aligned} 1 - \frac{2}{\pi} \int_C \left(1 - \frac{z^2}{z^2 - \omega^2} \right) d\omega &= 1 + \frac{\Delta m}{n} - i\tau E \operatorname{sgn} \epsilon = \\ &= \frac{m'}{n} - i\tau E \operatorname{sgn} \epsilon \end{aligned} \quad (C.10)$$

Para resolver a segunda das integrais no primeiro membro desta

equação, fizemos $z = E + i\epsilon$. O resultado acima permite-nos então concluir que

$$S = \frac{-1}{\pi\tau} \int_0^{\infty} \frac{f(E)}{E^2 + m'^2/m^2\tau^2} dE, \quad (G.11)$$

conforme o desejado.

REFERÊNCIAS

1. A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Physica (Utrecht)* 121 A, 587 (1983).
2. A. O. Caldeira, não publicado.
3. P. Hedegaard and A. O. Caldeira, *Physica Scripta* 35, 609 (1987).
4. R. P. Feynman and F. L. Vernon, *Ann. Phys. (N. Y.)* 24, 118 (1963).
5. V. Hakim and V. Ambegaokar, *Phys. Rev.* 32 A, 423 (1985).
6. C. M. Smith and A. O. Caldeira, *Phys. Rev.* 36 A, 3509 (1987).
7. J. D. Jackson, *Eletrodinâmica Clássica* (Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1983).
8. P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. Series A* 167, 148 (1938).
9. J. L. Jimenez and I. Campos, *Am. J. Phys.* 55, 1017 (1987). A. M. Cetto and L. de la Peña, *Rev. Mex. Fis.* 29, 537 (1983).
10. G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press, N. Y., 1985).
11. L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics* (University of Texas Press, Austin, 1980).
12. R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path*

Integrals (McGraw-Hill, N. Y., 1965).

13. A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Phys. Rev. 31 A, 1059 (1985).

14. G. N. Plass, Revs. Mod. Phys. 33, 37 (1961).

15. J. A. Wheeler and R. P. Feynman, Revs. Mod. Phys. 17, 157 (1957).