

# TRANSMISSÃO POR UMA BARREIRA DISSIPATIVA

- Uma análise crítica -

Tese apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Candidata: Paola Sztajn

Orientador: Dr. Amir O. Caldeira

Instituto de Física Gleb Wataghin

- UNICAMP -

Campinas, abril de 1989.

*Este exemplar corresponde à versão final da tese defendida pela aluna Paola Sztajn e aprovada pela comissão julgadora*

*Amir O. Caldeira*

*05/05/89*

"Acho a tua disposição de luta a qualquer preço profundamente louvável mas no momento temos maiores chances de fazer apenas o mais difícil, que é mudar a vida em vez de mudar o mundo."

(Antônio Callado - QUARUP)

- Aos meus pais - Jayme e Angélica - que me ajudaram sem entender nada de "contas" !

- Às "afilhadas" Mônica, Elaine e Moniquinha.

## **Agradecimentos**

Gostaria de aproveitar para agradecer a todas as pessoas que, cada uma com seu próprio jeito, contribuíram na execução deste trabalho. Aos amigos de forma geral, à minha família pelo eterno apoio, ao pessoal da biblioteca, secretaria, etc ...

### **Em particular:**

- Ao meu orientador Amir Caldeira pelas inúmeras e proveitosas discussões ao longo destes dois anos de convivência.
- Aos Carvalho pelo “ apoio estratégico” e pelo prazer da companhia.
- Ao João por ter sido muito mais do que meu amigo em todos os momentos.
- Aos colegas de sala, corredor e grupo pelos infindáveis papos e trocas de idéias.
- Ao Dr. Renato Portugal (CBPF) pela ajuda no final do trabalho.
- Ao Adaminho, ao Jonas e à Conceição pela bela impressão.
- Ao CNPq e à CAPES pelo apoio financeiro.

# ÍNDICE

	pág.
Resumo.....	1
Abstract.....	2
I -Introdução.....	3
II -O Problema Inicial.....	9
II.1 -A Resolução do Problema para uma Barreira Retan- gular e Acoplamento Coordenada - Coordenada.....	18
III -O Modelo para Quantização e a Renormalização do Potencial.....	21
III.1 -A Hamiltoniana e Questão da Invariância Translacional....	25
III.2 -A resolução do Problema para a Barreira Retangular Renormalizada.....	26
III.3 -Alguns Comentários.....	31
IV -A Relação entre Frequência de Corte e Tempo de Travessia.....	32
IV.1 -O Problema ainda sem Contra-Termo no Limite Correto...	34
IV.2 -O Problema com Contra-Termo no Limite Correto.....	37
IV.3 -O Limite Correto e a Teoria de Perturbação Dependente do Tempo - Alguns Comentários.....	42
V -Conclusões.....	45
Apêndice A.....	47
Apêndice B.....	51
Apêndice C.....	55
Referências.....	58

## Resumo

Neste trabalho pretendemos analisar comparativamente os resultados opostos obtidos primeiramente por Caldeira e Leggett e posteriormente por Bruinsma e Bak. Os primeiros resolveram o problema do tunelamento macroscópico dissipativo de um estado meta-estável e concluíram que a dissipação inibe o tunelamento. Os últimos estudaram o problema da transmissão através de uma barreira de potencial dissipativa e concluíram, por sua vez, que o efeito da flutuação se sobrepõe ao da dissipação aumentando a taxa de tunelamento. Inicialmente estudamos o método proposto por Bruinsma e Bak para resolver o problema da transmissão dissipativa e depois o modelo para quantização de sistemas dissipativos. Posteriormente, verificamos a questão da escala de tempo apropriada para o problema de interesse. Finalmente analisamos a validade do método utilizado por Bruinsma e Bak.

## Abstract

In the present work we intend to comparatively analyse the opposite results obtained firstly by Caldeira and Leggett and secondly by Bruinsma and Bak. The first solved the problem of macroscopic dissipative tunnelling out of a metastable state and concluded that dissipation inhibits tunnelling. The latter studied the problem of the transmission in a dissipative potential barrier and concluded that the effect of fluctuation is bigger than that of dissipation and this enhances the tunnelling rate. First of all we study the method proposed by Bruinsma and Bak to solve the dissipative transmission problem and then the model for quantization of dissipative systems. After that we verify the question of the appropriate time scale for the problem we are interested in. Finally, we analyse the validity of Bruinsma and Bak's method.

# I - Introdução

Em 1931 Condon (1) sugeriu que seria interessante considerar problemas nos quais a probabilidade de se encontrar uma partícula em diferentes posições fosse dependente do tempo. Desta forma tornar-se-ia possível o estudo do problema da transmissão de uma partícula através de uma barreira de potencial, utilizando-se a mecânica ondulatória. No ano seguinte MacColl (2), seguindo tal sugestão, estudou a passagem de um pacote gaussiano através de uma barreira de potencial retangular de altura  $V_0$ . Iniciava-se assim o estudo dos problemas quânticos de transmissão e de tunelamento.

Desde esta época, os problemas de tunelamento vêm sendo sistematicamente estudados. Nas últimas décadas no entanto, com o desenvolvimento da ciência dos materiais e da física do estado sólido, o interesse no estudo deste tipo de problema cresceu enormemente devido à sua aplicação em junções supercondutoras e, particularmente, em sistemas que apresentam o efeito Josephson.

Os elétrons de condução de um material supercondutor e de um metal normal podem entrar em equilíbrio térmico se colocarmos os metais tão próximos que apenas uma camada isolante extremamente fina os separe (3). Os elétrons podem tunelar através do isolante até que haja equilíbrio. Se nenhum dos metais for supercondutor, ao aplicarmos uma diferença de potencial induzimos uma "corrente de tunelamento" que obedece à lei de Ohm. Se os dois metais forem supercondutores, Josephson (4) previu em 1962 que, além do tunelamento normal dos elétrons, haveria uma "corrente supercondutora de tunelamento" devida aos pares de Cooper. Assim, se a barreira de potencial não for muito larga, também os pares de elétrons podem atravessar a junção entre dois supercondutores sem se dissociarem. Uma supercorrente de pares de Cooper deve fluir pela junção na ausência de campo elétrico aplicado.

Há diversas situações em física nas quais vários sistemas estão acoplados mas apenas um deles é de interesse. Nestes casos é, em geral, conveniente saber o efeito sobre o sistema no qual estamos interessados dos demais sistemas a ele acoplados (5).

Consideremos, por exemplo, o caso de um sistema macroscópico cuja variável não pode ser desacoplada dos graus de liberdade microscópicos do problema. O efeito sobre o sistema macroscópico de interesse dos de-

mais sistemas microscópicos pode ser, entre outros, o da dissipação (6). No estudo do problema de tunelamento de um sistema microscópico é possível, muitas vezes, desprezar o acoplamento do mesmo com o reservatório ou tratá-lo perturbativamente. Esta aproximação não é verdadeira para sistemas macroscópicos nos quais o acoplamento é necessariamente forte e o movimento amortecido. Ou seja, os sistemas macroscópicos, por sua própria natureza, interagem de forma complexa com o meio no qual se encontram. Desta forma, há uma contínua troca de energia e não podemos, de modo algum, considerar o sistema como isolado. Em particular, quando o movimento do sistema pode ser descrito classicamente, a equação de Newton deve apresentar um termo que corresponda a esta energia dissipada.

Uma outra diferença a ser considerada entre o tunelamento de sistemas microscópicos e macroscópicos é que, no primeiro caso, nos pouquíssimos exemplos conhecidos nos quais o acoplamento ao reservatório é relevante, conhece-se, *a priori*, a hamiltoniana correta para a descrição de tal interação. Por outro lado, em muitos dos sistemas macroscópicos desconhecemos o mecanismo de dissipação e os detalhes do acoplamento. Sendo assim, temos que nos reduzir à descrição somente dos efeitos deste acoplamento, lançando mão de constantes fenomenológicas tais como o coeficiente de atrito, de viscosidade, etc...

A questão importante que se coloca é o efeito deste acoplamento e, conseqüentemente, da dissipação nos problemas de tunelamento quântico - não necessariamente nos casos de sistemas macroscópicos mas de forma geral. A dissipação deve aumentar ou diminuir a probabilidade de tunelamento? Como representar quânticamente o acoplamento e resolver o problema do tunelamento?

A quantização de sistemas dissipativos é um problema antigo que vem sendo tratado basicamente através de dois enfoques distintos. No primeiro a idéia central é a modificação do sistema canônico de quantização para sistemas não isolados. Há diferentes propostas para estas modificações (7), tais como a introdução de um termo não-linear na Equação de Schrödinger ou de termos explicitamente dependentes do tempo na hamiltoniana, mas ainda não há uma formulação clara e única para representar diferentes processos dissipativos.

No segundo enfoque, que será adotado, a idéia é manter o esquema canônico de quantização mas, baseado entre outras coisas na discussão

anterior, modificar o sistema a ser quantizado. Devemos considerar explicitamente a interação do sistema de interesse com o reservatório tal como proposto inicialmente por Senitzky (8). O sistema de interesse e o meio devem ser encarados como um único sistema, um “universo fechado” que devemos quantizar e que pode, em princípio, ser descrito por uma hamiltoniana ou uma lagrangeana. Neste caso a dissipação nada mais é do que a transferência de energia de um grau de liberdade que representa o sistema de interesse, para o conjunto muito complexo dos demais graus de liberdade do nosso universo, que descrevem o reservatório. Uma vez transferida, a energia “desaparece” no reservatório cujo número de graus de liberdade deve ser infinito (matematicamente trocamos os somatórios no número de graus que compõem o meio por integrais).

Cada um desses graus de liberdade é muito pouco perturbado pela presença e interação com o sistema. O movimento de qualquer sistema físico levemente perturbado em torno do seu estado de equilíbrio pode ser descrito quanticamente, à temperatura zero, através de um conjunto de osciladores harmônicos (9). Sendo assim, o que fazemos é representar o reservatório por um conjunto de osciladores: o “banho”. Ou seja, estamos tratando o problema em primeira ordem e assumindo que a resposta do reservatório à perturbação introduzida pelo sistema é linear (6,10). Vamos considerar também, de acordo com o trabalho de Caldeira e Leggett, que o acoplamento entre o sistema e o banho deva ser linear nas coordenadas dos osciladores e uma função apenas da coordenada do sistema; em particular usaremos o acoplamento bilinear coordenada - coordenada.

Um problema interessante que surgiu a partir do desenvolvimento das junções supercondutoras foi o do tunelamento macroscópico através de um potencial que possui um mínimo meta-estável, isto é, o decaimento de um sistema inicialmente em um estado meta-estável para o contínuo. Consideremos, em particular, o caso dos “dispositivos supercondutores de interferência quântica (SQUID)”, que são anéis supercondutores interrompidos por uma junção Josephson (6, 10, 11, 12). Na presença de um campo externo perpendicular ao plano do anel, a equação para o fluxo total pelo interior do mesmo é

$$C\ddot{\phi} + R^{-1}\dot{\phi} + \frac{dU}{d\phi} = 0$$

onde C e R são, respectivamente, a capacitância e a resistência da junção e

$U(\phi)$  é a energia potencial do sistema que possui um mínimo meta-estável e que pode ser distorcida conforme variamos o campo externo.

O fluxo através do anel é uma grandeza quantizada (11). Podemos ajustar o campo externo de forma que, inicialmente, o SQUID se encontre em um estado meta-estável. Começamos a modificar lentamente este campo até que, para um certo valor crítico, o anel absorva uma quantidade finita de fluxo e passe para um estado de menor energia, tunelando através da parede do potencial meta-estável para próximo mínimo de  $U(\phi)$ .

Se pensamos no análogo mecânico deste problema estamos interessados no estudo do movimento de uma partícula pesada em um fluido viscoso. No regime clássico esta partícula obedece à equação fenomenológica de Langevin (Markofiana) dada por (13):

$$m\ddot{q} + \eta\dot{q} + \frac{\partial V}{\partial q} = f(t), \quad (1.1)$$

onde  $m$  é a massa da partícula que deve ser muito superior à massa de cada uma das partículas que compõem o meio,  $V(q)$  é um potencial externo que age sobre a partícula e que possui um mínimo meta-estável;  $f(t)$  é uma força flutuante que obedece às relações

$$\langle f(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle f(t)f(t') \rangle = 2\eta k_B T \delta(t - t'), \quad (1.2)$$

sendo  $\eta$  o coeficiente de atrito,  $k_B$  a constante de Boltzman,  $T$  a temperatura e  $\langle \rangle$  a média estatística sobre um ensemble de partículas identicamente preparadas.

Queremos quantizar o nosso sistema utilizando uma hamiltoniana simples que descreva o sistema composto "sistema-banho" e que, a partir de algumas condições impostas ao modelo, reproduza as equações desejadas no limite clássico. Posteriormente, devemos eliminar as variáveis do "banho" que não são de interesse.

De uma maneira geral, descrevemos o sistema por uma hamiltoniana da forma

$$H = H_S + H_I + H_B \quad (1.3)$$

onde  $H_S$  é a hamiltoniana do sistema de interesse isoladamente,  $H_I$  representa a interação sistema-banho e finalmente  $H_B$  é a hamiltoniana do banho de osciladores harmônicos que representa o reservatório.

Partindo desta idéia de quantização do sistema composto e da técnica já desenvolvida por Caldeira e Leggett na resolução do tunelamento metaestável, Bruinsma e Bak (14) estudaram a transmissão de uma partícula através de uma barreira de potencial no interior da qual há um meio dissipativo. Consideremos uma partícula com energia inicial  $E$  e função de onda conhecida que incide sobre uma barreira no interior da qual pode colidir inelasticamente com os diferentes modos aí presentes (que representam o reservatório) e ser então transmitida com uma nova energia  $E'$ . Este seria basicamente um problema de espalhamento com diversas aplicações em problemas de tunelamento, tratado essencialmente através de um método "WKB com dissipação".

Podemos pensar, por exemplo, em algum tipo de dispositivo onde haja, primeiramente, um material com o qual uma dada partícula interaja fracamente de forma que possamos conhecer sua função de onda. A partícula penetra então numa nova região onde o acoplamento com os fonons da rede seja forte e precise ser de alguma forma considerado. Ela atravessa tal material sendo transmitida para uma terceira região onde novamente a interação é fraca e conhecemos a evolução temporal da partícula.

O resultado defendido por Bruinsma e Bak em seu trabalho (14) é que quando colocamos o meio dissipativo no interior da barreira, levando em conta o acoplamento da partícula com o meio e tomando a temperatura como sendo nula, a flutuação facilita o tunelamento. Segundo eles, o efeito da flutuação predomina sobre o da dissipação que inibe o tunelamento, fazendo com que a probabilidade da partícula ser transmitida, com qualquer energia final, aumente com a introdução do meio material no interior da barreira. Ou seja, a partícula tunela mais facilmente quando há interação na região sob a barreira de potencial.

Este resultado é contraditório com o obtido anteriormente por Caldeira e Leggett (6,10,11) no qual o tunelamento é prejudicado pela presença da dissipação fazendo com que a taxa de tunelamento seja inferior neste caso do que quando não há dissipação. O objetivo deste trabalho é justamente mostrar que se utilizarmos corretamente o modelo de quantização proposto por Caldeira e Leggett, levando em consideração o contra-termo de renormalização do potencial e as escalas de tempo corretas para a resolução do

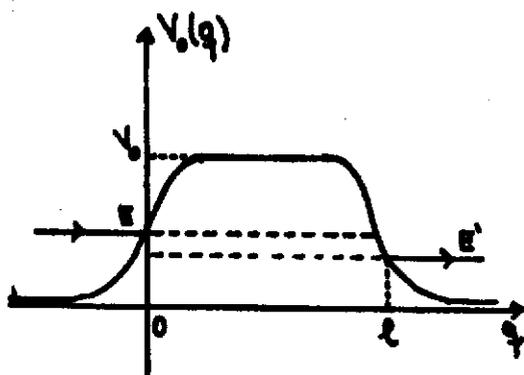
problema proposto por Bruinsma e Bak, o resultado obtido deve ser, de fato, a inibição do tunelamento - como dizem os primeiros.

O início do trabalho, após esta introdução, é uma descrição cuidadosa do problema proposto por Bruinsma e Bak e da forma como eles o resolveram (seção II), resolvendo a seguir o caso particular de uma barreira retangular de altura  $V_0$  com acoplamento bilinear nas coordenadas. Através do estudo do modelo de quantização (seção III), tornamos a resolver o problema utilizando agora uma hamiltoniana renormalizada que veremos ser uma imposição do modelo. Seguem-se algumas considerações sobre a questão das escalas de tempo do problema (seção IV) e mais uma vez retornamos à resolução do problema considerando o limite que achamos correto. Finalmente, fazemos uma comparação dos diversos resultados (seção V) e uma análise crítica do método proposto por Bruinsma e Bak para resolução do problema da transmissão dissipativa.

## II - O Problema Inicial

Queremos estudar o problema da transmissão de uma partícula em uma barreira de potencial dissipativa. Consideremos uma partícula de

energia inicial  $E$  que incide numa barreira de potencial como a da figura, localizada em  $q_0 = 0$ . No interior desta barreira há um meio material que interage com a partícula trocando energia e fazendo com que haja dissipação. Sob a barreira, a partícula pode sofrer múltiplas colisões inelásticas e ser transmitida com uma nova energia média  $E'$ , diferente da energia inicial  $E$ .



Queremos escrever uma hamiltoniana tipo (1.3) para este problema que contenha uma parte relativa à partícula, uma parte relativa ao conjunto de osciladores harmônicos que representa o meio dissipativo e uma hamiltoniana que descreva a interação entre os dois.

Temos então, de acordo com Bruinsma e Bak (14), uma partícula de massa  $m$  e coordenada  $q$  querendo tunelar por uma barreira de potencial dada por  $V_0(q)$ . No interior da barreira existe um meio representado por um conjunto de osciladores harmônicos de massas  $m_k$ , coordenadas  $q_k$  (representadas coletivamente por  $\bar{Q}$ ) e frequências  $\omega_k$  respectivamente. A partícula se acopla a este reservatório através de uma "força"  $V_1(q)$  e a hamiltoniana do problema é dada por:

$$H = H_S + H_I + H_B \quad (2.1)$$

com

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + V_0(q) , \quad (2.2)$$

$$H_I = - \sum_k C_k q_k V_1(q) \quad (2.3)$$

e

$$H_B = \sum_k \left( \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right). \quad (2.4)$$

$V_1(q)$  deve ser tal que só exista no interior da barreira  $V_0(q)$ .

Se não houvesse a dissipação, poderíamos resolver este problema diretamente utilizando o método WKB e a solução para a transmissão seria dada por (15)

$$T_E = e^{-2 \int_0^\ell dq k(q)} \quad (2.5)$$

onde  $\ell$  é a largura da barreira e

$$k(q) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[V_0(q) - E]}. \quad (2.6)$$

Para este problema temos ainda o tempo de travessia que, segundo Büttiker e Landauer (16), é dado por

$$\tau = \int_0^\ell dq \frac{m}{\hbar k(q)}. \quad (2.7)$$

Suponhamos que a partícula incida sobre a barreira no instante  $t_0 = 0$ . Uma vez sob a barreira ela "sente" a presença do banho e para esta região ( $0 \leq q \leq \ell$ ) podemos falar em uma "hamiltoniana da partícula" dada por

$$H_p = \frac{p^2}{2m} + V_0(q) - V_1(q) f(t) \quad (2.8)$$

com

$$f(t) = \sum_k C_k q_k(t). \quad (2.9)$$

Consideremos conhecido o pacote incidente que pode ser descrito por uma certa função  $\Psi_E(q)$ . Podemos escrever a evolução temporal do mesmo através do propagador  $K(q, t, q_0, t_0)$ . Utilizando a formulação de integrais de trajetória de Feynman(17) podemos escrever simbolicamente

$$K(q, t, q_0, t_0 = 0) = \int_{q_0}^q Dq' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' L_p(q', t') \right\} \quad (2.10)$$

onde

$$L_p(q, t) = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V_0(q) + V_1(q) f(t) \quad (2.11)$$

é a lagrangeana da partícula associada à (2.8). A evolução temporal do pacote no interior da barreira é dada por

$$\Psi(q, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \Psi_E(q_0) K(q, t, q_0, 0). \quad (2.12)$$

Vamos assumir que no interior da barreira devemos ter uma função de onda tipo WKB para a partícula e portanto, nesta região,

$$\Psi(q, t) = A e^{iS(q,t)}. \quad (2.13)$$

Substituindo esta expressão na equação de Schrödinger obtemos, no limite semi-clássico, a equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 - V(q, t). \quad (2.14)$$

Neste problema em particular,

$$V(q, t) = V_0(q) - V_1(q)f(t) \quad (2.15)$$

e estamos considerando não apenas a barreira  $V_0(q)$  mas também, explicitamente, o acoplamento através de  $V_1(q)f(t)$ . Sendo assim, vamos procurar uma ação  $S(q, t)$  para o problema que seja da forma

$$S(q, t) = S_0(q, t) + S_1(q, t) \quad (2.16)$$

onde  $S_0(q, t)$  deve satisfazer à equação de Hamilton-Jacobi (2.14) na ausência de acoplamento, isto é,

$$S_0(q, t) = -Et + i\hbar \int_0^q dq' k(q'). \quad (2.17)$$

O outro termo da ação,  $S_1(q, t)$ , deve conter o acoplamento. Em primeira ordem para  $V_1(q)f(t)$  temos a equação:

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} + i \frac{\hbar k(q)}{m} \frac{\partial S_1}{\partial q} - V_1(q)f(t) = 0. \quad (2.18)$$

Tomando a transformada de Fourier e resolvendo esta equação obtemos (14)

$$S_1(q, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' f(t') Q_i(t') \quad (2.19)$$

onde

$$Q_i(t') = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega g(q, \omega) e^{-i\omega(t'-t)} \quad (2.20)$$

e

$$g(q, \omega) = \int_0^q \frac{dq'}{2\pi} \frac{mV_1(q')}{\hbar k(q')} \exp \left\{ -\omega \int_{q'}^q dq'' \frac{m}{\hbar k(q'')} \right\}. \quad (2.21)$$

Finalmente, juntando (2.16), (2.17) e (2.19),

$$S(q, t) = -Et + i\hbar \int_0^q dq' k(q') + \int_{-\infty}^{\infty} dt' f(t') Q_i(t'). \quad (2.22)$$

Até agora consideramos apenas a partícula que sente uma interação com o reservatório. Não podemos esquecer de levar em consideração a presença do banho quando estudamos a evolução do sistema. Devemos quantizar o sistema como um todo, isto é, o sistema composto "sistema-banho". Pensando neste sistema composto, tomamos a função de onda inicial no instante  $t_0 = 0$  no qual a partícula incide na barreira como

$$\Psi(q_0, \vec{Q}_0) = \Psi_E(q_0) \Phi(\vec{Q}_0). \quad (2.23)$$

$\Psi_E(q_0)$  é a função de onda inicial da partícula com energia  $E$  e  $\Phi(\vec{Q}_0)$  é o estado inicial do conjunto de osciladores harmônicos se o considerarmos em um estado puro. Utilizando esta função inicial estamos considerando que, no instante em que a partícula penetra na barreira, partícula e banho estão desacoplados.

No interior da barreira temos

$$\Psi(q, \vec{Q}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{Q}_0 \Psi(q_0, \vec{Q}_0) K(q, \vec{Q}, t, q_0, \vec{Q}_0, t_0 = 0) \quad (2.24)$$

onde

$$K(q, \vec{Q}, t, q_0, \vec{Q}_0, 0) = \int_{q_0}^q Dq' \int_{\vec{Q}_0}^{\vec{Q}} D\vec{Q}' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' L(q', \vec{Q}', t') \right\} \quad (2.25)$$

e

$$L(q, \vec{Q}, t) = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V_0(q) + V_1(q) f(t) + \sum_k \left( \frac{1}{2} m_k \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right). \quad (2.26)$$

Se levarmos em conta (2.10), (2.11), (2.12) e (2.23) temos

$$\Psi(q, \vec{Q}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{Q}_0 \Phi(\vec{Q}_0) \int_{\vec{Q}_0}^{\vec{Q}} D\vec{Q}' \Psi(q, t) \dots$$

$$\dots \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \sum_k \left( \frac{1}{2} m_k \dot{q}_k'^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k'^2 \right) \right\} \quad (2.27)$$

Considerando ainda (2.9), (2.13) e (2.22),

$$\Psi(q, \vec{Q}, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \dots$$

$$\dots \exp \left\{ - \int_0^q dq' k(q') \right\} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{Q}_0 \Phi(\vec{Q}_0) K_{ef}^t(\vec{Q}, +\infty, \vec{Q}_0, -\infty) \quad (2.28)$$

onde

$$K_{ef}^t(\vec{Q}, +\infty, \vec{Q}_0, -\infty) = \int_{\vec{Q}_0}^{\vec{Q}} D\vec{Q}' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' L_{ef}^t(\vec{Q}', t') \right\} \quad (2.29)$$

e

$$L_{ef}^t(\vec{Q}, t') = \sum_k \left[ \frac{1}{2} m_k \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 + C_k q_k Q_t(t') \right]. \quad (2.30)$$

Estamos considerando para o banho uma lagrangeana efetiva que é, claramente, uma lagrangeana de oscilador forçado. O que fizemos foi reinterpretar o último termo de (2.22) como um termo forçante na lagrangeana do oscilador já que a ação é uma integral no tempo de uma lagrangeana. Ou seja, devido à presença do sistema de interesse, o conjunto de osciladores harmônicos que representa o meio material passa a ser um conjunto de osciladores harmônicos forçados.

O propagador para o conjunto de osciladores é o produto dos propagadores de cada um dos osciladores. Esta expressão é conhecida (17) e para cada oscilador do banho que vai de  $q_{k0}$  até  $q_{kf}$  em  $\Delta t = t_f - t_0$  (depois tomando o limite de  $t_f \rightarrow +\infty$  e  $t_0 \rightarrow -\infty$ ) temos:

$$K_{ef,k}^t(q_{kf}, t_f, q_{k0}, t_0) = N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m_k \omega_k}{2 \text{sen}(\omega_k \Delta t)} \left[ \cos(\omega_k \Delta t) (q_{kf}^2 + q_{k0}^2) + \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& -2q_{kf}q_{k0} + \frac{2C_k q_{kf}}{m_k \omega_k} \int_{t_0}^{t_f} dt' Q_i(t') \text{sen}[\omega_k(t' - t_0)] + \\
& + \frac{2C_k q_{k0}}{m_k \omega_k} \int_{t_0}^{t_f} dt' Q_i(t') \text{sen}[\omega_k(t_f - t')] + \\
& - \frac{2C_k^2}{m_k^2 \omega_k^2} \int_{t_0}^{t_f} dt' \int_{t_0}^{t'} ds Q_i(t') Q_i(s) \text{sen}[\omega_k(t_f - t')] \dots \\
& \dots \text{sen}[\omega_k(s - t_0)] \Big\} \tag{2.31}
\end{aligned}$$

onde  $N$  é uma constante de normalização que depende de  $\omega_k$  e  $\Delta t$ .

Se substituirmos  $q = \ell$  e  $\vec{Q} = \vec{Q}_f$  em (2.28) e utilizarmos (2.31) obteremos a função de onda da partícula quando esta deixa a barreira - para uma distribuição qualquer  $\vec{Q}_f$  dos osciladores do banho.

O que nós queremos é a nova distribuição de energias  $E'$  quando a partícula sai da barreira e, portanto, devemos tomar a transformada de Fourier de (2.28). Para obtermos o coeficiente de transmissão (probabilidade) devemos tomar o módulo quadrado e finalmente, para eliminarmos as variáveis do banho que não são de interesse, devemos somar em todos os possíveis estados finais do banho. Logo (14)

$$\begin{aligned}
P_{E,E'} &= N \exp \left\{ -2 \int_0^\ell dq k(q) \right\} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 e^{\frac{i}{\hbar}(E' - E)(t_1 - t_2)} \dots \\
&\dots \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{Q}_0 d\vec{Q}'_0 d\vec{Q}_f \Phi(\vec{Q}_0) \Phi^*(\vec{Q}'_0) \dots \\
&\dots K_{e,f}^{t_1}(\vec{Q}_f, +\infty, \vec{Q}_0, -\infty) K_{e,f}^{t_2*}(\vec{Q}_f, +\infty, \vec{Q}'_0, -\infty) \tag{2.32}
\end{aligned}$$

onde  $N$  é um novo fator de normalização.

Como podemos ver, o primeiro fator de (2.32) é o coeficiente de transmissão  $T_E$  (2.5) para a barreira na ausência da dissipação. Agora, com a

introdução do meio dissipativo, este coeficiente aparece multiplicado por um novo fator que contém a informação sobre o meio. Neste novo fator aparece a densidade inicial de estados do banho de osciladores que escreveremos como

$$\rho(\vec{Q}_0, \vec{Q}'_0) = \sum_n e^{-\beta E_n} \Phi_n(\vec{Q}_0) \Phi_n^*(\vec{Q}'_0), \quad (2.33)$$

pois estamos considerando-o em equilíbrio termodinâmico na temperatura T.

Para  $\beta = (k_b T)^{-1}$  temos (apêndice A):

$$\begin{aligned} P_{E,E'} &= T_E N \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 e^{\frac{i}{\hbar}(E' - E)(t_1 - t_2)} \dots \\ &\dots \exp \left\{ \sum_k \frac{C_k^2}{2\hbar m_k \omega_k} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t ds \left\{ i [Q_{i_1}(t) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - Q_{i_2}^*(t)] [Q_{i_1}(s) + Q_{i_2}^*(s)] \text{sen} [\omega_k(t - s)] + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \text{cotgh} \left( \frac{\beta \hbar \omega_k}{2} \right) |Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)| |Q_{i_1}(s) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - Q_{i_2}^*(s)] \cos [\omega_k(t - s)] \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Vamos considerar que o banho é formado por uma infinidade de osciladores que pode ser descrita através de uma função espectral (conforme veremos na seção III) dada por

$$J(\omega) = \sum_k \frac{\pi C_k^2}{2m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k). \quad (2.35)$$

Podemos substituir o somatório em todos os osciladores que aparece em (2.34) por uma integral em todas as freqüências. Substituindo também a expressão (2.20) para  $Q_i(t')$  e escrevendo como  $g(\omega)$  a expressão (2.21) quando fazemos  $q = \ell$ , obtemos para a probabilidade de tunelamento por unidade de tempo (apêndice B) a seguinte expressão:

$$P_{E,E'} = T_E N \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t} \exp \left\{ \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \left\{ [g^2(\omega)e^{i\omega t} + \right. \right. \\ \left. \left. -g^2(-\omega)e^{-i\omega t}] + \operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) [g^2(\omega)e^{i\omega t} + 2g(\omega)g(-\omega) + \right. \right. \\ \left. \left. + g^2(-\omega)e^{-i\omega t}] \right\} \right\}. \quad (2.36)$$

Somando para todas as energias finais  $E'$ ,

$$T_E' = T_E \exp \left\{ \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \left\{ [g^2(\omega) - g^2(-\omega)] + \right. \right. \\ \left. \left. \operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) [g(\omega) + g(-\omega)]^2 \right\} \right\}. \quad (2.37)$$

A primeira parcela do expoente de (2.37) está ligada à parte imaginária de (2.34) e nos fornece o efeito da dissipação. A segunda parcela, ligada à parte real de (2.34), contém a temperatura  $T$  e representa as flutuações térmicas do sistema. Este termo é sempre positivo.

Ainda conforme será explicado na seção III, vamos assumir que, no nosso modelo, a função espectral pode ser tomada em boa aproximação como sendo linear em  $\omega$  até uma certa freqüência de corte  $\Omega$ , a partir da qual a função é nula. Ou seja,

$$J(\omega) = \begin{cases} \eta\omega & \text{se } \omega < \Omega \\ 0 & \text{se } \omega > \Omega \end{cases} \quad (2.38)$$

Vamos assumir também que no limite de temperatura muito baixa, como é nosso interesse,  $\beta \rightarrow \infty$  muito rapidamente de forma que podemos fazer  $\operatorname{cotgh}(\beta\hbar\omega/2) \equiv 1$  e finalmente calcular

$$T_E^t = T_E \exp \left\{ \frac{2\pi\eta}{\hbar} \int_0^\Omega d\omega \omega \left\{ [g^2(\omega) - g^2(-\omega)] + [g(\omega) + g(-\omega)]^2 \right\} \right\} \quad (2.39)$$

A expressão (2.39) é uma das expressões principais deste trabalho. Uma vez escolhidos o feitiço da barreira  $V_0(q)$  e o tipo de acoplamento  $V_1(q)$  podemos calcular  $g(\omega)$  em (2.21) e obter  $T_E^t$ . Se a exponencial que multiplica  $T_E$  for positiva,  $T_E^t$  é maior que  $T_E$  o que significa que o tunelamento cresce com a presença da dissipação. Caso contrário, se a exponencial for decrescente,  $T_E^t$  é menor que  $T_E$ . Neste caso, o fato de considerarmos o acoplamento com o meio dissipativo faz que a transmissão seja inibida.

Como exemplo, vamos escolher o caso em que a barreira é praticamente constante na região que a partícula fica sob sua influência. A partir de agora consideraremos o caso de uma barreira retangular de altura  $V_0$  e largura  $l$  e de acoplamento bilinear coordenada-coordenada.

## II.1 - A Resolução do Problema para uma Barreira Retangular e Acoplamento Coordenada-Coordenada

Para este problema vamos considerar que

$$V_0(q) = V_0 \Theta(q) \Theta(l - q), \quad (2.40)$$

$$V_1(q) = q \Theta(q) \Theta(l - q) \quad (2.41)$$

e temos a seguinte hamiltoniana para o problema (2.1):

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0 \Theta(q) \Theta(l - q) - \sum_k C_k q_k q \Theta(q) \Theta(q - l) +$$

$$+ \sum_k \left( \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right) \quad (2.42)$$

De acordo com (2.6),

$$k(q) = k_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (2.43)$$

logo para (2.5) e (2.7),

$$T_E^0 = e^{-2k_0 \ell}, \quad (2.44)$$

$$\tau_0 = \frac{m\ell}{\hbar k_0}. \quad (2.45)$$

Finalmente, calculando  $g(\omega)$  através de (2.21) para  $q = \ell$ ,

$$\begin{aligned} g(\omega) &= \int_0^\ell \frac{dq}{2\pi} \frac{mq}{\hbar k_0} \exp \left\{ -\omega \int_q^\ell dq' \frac{m}{\hbar k_0} \right\} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{m\omega\ell - \hbar k_0 (1 - e^{-\omega\tau_0})}{m\omega^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.46)$$

A partir desta expressão podemos agora calcular (2.39) que é o que desejamos.

Vamos antes reescrever o problema em função da variável adimensional  $x = \omega/\Omega$ . Neste caso,

$$g(x) = \frac{\ell}{2\pi\Omega} \left[ \frac{x - (\Omega\tau_0)^{-1} (1 - e^{-x\Omega\tau_0})}{x^2} \right] \quad (2.47)$$

e queremos calcular

$$T_E^t = T_E^0 \exp \left\{ \frac{2\pi\eta}{\hbar} \Omega^2 \int_0^1 dx x \left\{ [g^2(x) - g^2(-x)] + [g(x) + g(-x)]^2 \right\} \right\} \quad (2.48)$$

Para calcular esta expressão, Bruinsma e Bak (14) tomaram o limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$ . Vamos considerar este mesmo limite e reescrever

$$g(x) = \frac{\ell}{2\pi\Omega} \left[ \frac{\Omega\tau_0}{2!} - \frac{x(\Omega\tau_0)^2}{3!} + \frac{x^2(\Omega\tau_0)^3}{4!} - \frac{x^3(\Omega\tau_0)^4}{5!} \dots \right]. \quad (2.49)$$

Agora podemos calcular  $T_E^t$ , para este limite, e o resultado é:

$$T_E^t = T_E^0 \exp \left\{ \frac{\eta\ell^2}{\pi\hbar} \left[ \frac{(\Omega\tau_0)^2}{4} - \frac{(\Omega\tau_0)^3}{18} \right] \right\} \quad (2.50)$$

sendo  $T_E^0$  dado por (2.44).

Este é basicamente o resultado obtido por Bruinsma e Bak em seu trabalho (14), no qual eles propõem esta formulação para se resolver o problema da transmissão por uma barreira dissipativa.

O primeiro termo de correção à transmissão devido à presença do banho de osciladores no interior da barreira é um termo que surge por causa das flutuações. O segundo termo, que é negativo, é o termo dissipativo. No limite considerado de  $\Omega\tau_0 \ll 1$ , a correção que predomina é a da flutuação que é uma exponencial positiva e que, portanto, faz com que a transmissão cresça.

Baseado neste resultado a conclusão que se chega é que o meio dissipativo facilita o tunelamento! É justamente este resultado que pretendemos discutir nas duas próximas seções introduzindo, inicialmente, um termo de renormalização do potencial na hamiltoniana e considerando, a seguir, o limite de  $\Omega\tau_0 \gg 1$ .

### III - O Modelo para Quantização e a Renormalização do Potencial

Após uma breve explicação na seção I deste trabalho sobre a idéia utilizada para a quantização de sistemas dissipativos - que é a quantização do sistema de interesse juntamente com o reservatório - utilizamos diretamente na seção II uma hamiltoniana tipo (1.3) para resolver o problema de interesse. Pretendemos agora justificar este modelo.

Estamos interessados na quantização de sistemas não isolados que obedecem, no limite clássico, à equação fenomenológica de Langevin (1.1) sujeita às condições (1.2) (1.3). Tal equação tem sido usada no estudo do movimento Browniano (10,18) e apresenta um termo dissipativo da forma  $\eta\dot{q}$  fazendo com que não exista qualquer hamiltoniana  $H(p,q)$  cujas equações de Hamilton forneçam a equação de movimento correta.

A proposta para a quantização é partir de um sistema relativamente simples, que possua uma hamiltoniana simples e que possa reproduzir, no limite clássico, equações de movimento amortecido tipo Langevin. Para que este modelo funcione, faremos algumas imposições ao sistema escolhido.

Vamos partir inicialmente de uma hamiltoniana tipo a (2.1) com acoplamento coordenada-coordenada, ou seja,

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0(q) - \sum_k C_k q_k q + \sum_k \left( \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right) \quad (3.1)$$

válida para a região onde há dissipação. Neste caso, os  $C_k$ 's são as constantes de acoplamento entre as partículas do reservatório de coordenadas  $q_k$  e o sistema de coordenada  $q$ . Estamos assumindo que este acoplamento pode ser descrito como bilinear nas coordenadas e também, por hipótese, que ele é fraco no sentido de ser possível considerar a resposta do reservatório como linear e representá-lo numa aproximação harmônica (6).  $\omega_k$ 's são as frequências de movimento dos osciladores harmônicos do banho.

Temos então a lagrangeana  $L(q, \dot{q})$

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V_0(q) + \sum_k C_k q_k q + \sum_k \left( \frac{1}{2} m_k \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right) \quad (3.2)$$

e, no limite clássico, as equações de Euler-Lagrange:

$$m\ddot{q} + \frac{\partial V_0}{\partial q} = \sum_k C_k q_k \quad (3.3)$$

$$m_k \ddot{q}_k + m_k \omega_k^2 q_k = C_k q, \quad \forall k. \quad (3.4)$$

Tomando a transformada de Laplace de (3.4) e depois substituindo em (3.3) (12) obtemos

$$m\ddot{q} + \frac{\partial V_0}{\partial q} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} ds \sum_k \left\{ C_k \left[ \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{s q_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} \right] + \frac{C_k^2}{m_k} \left[ \frac{\tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} \right] \right\} e^{st}. \quad (3.5)$$

Vamos chamar de  $f(t)$  a primeira parte desta integral de forma que

$$m\ddot{q} + \frac{\partial V_0}{\partial q} = f(t) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} ds \sum_k \frac{C_k^2}{m_k} \left[ \frac{\tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} \right] e^{st} \quad (3.6)$$

sendo  $f(t)$  uma "força" dependente apenas das condições iniciais do banho dada por

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} ds \sum_k C_k \left[ \frac{\dot{q}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{s q_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} \right] e^{st}. \quad (3.7)$$

Consideremos agora as seguintes condições iniciais para o banho:

$$\langle q_k(0) \rangle = \langle \dot{q}_k(0) \rangle = \langle q_{k'}(0) \dot{q}_k(0) \rangle = 0. \quad (3.8)$$

Além disso, pelo teorema de equipartição de energia temos

$$\langle q_k(0) q_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k \omega_k^2} \delta_{kk'} \quad (3.9)$$

e

$$\langle \dot{q}_k(0)\dot{q}_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k} \delta_{kk'} \quad (3.10)$$

para o banho em equilíbrio termodinâmico à temperatura T. Se introduzirmos a função espectral  $J(\omega)$  definida por

$$J(\omega) = \sum_k \frac{\pi C_k^2}{2m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k) = \begin{cases} \eta \omega & , \omega < \Omega \\ 0 & , \omega > \Omega \end{cases} \quad (3.11)$$

obtemos exatamente as condições (1.2) para  $f(t)$ , conforme desejamos.

Retornando agora para (3.6), ainda é preciso que, de alguma maneira, o último termo desta expressão forneça o termo dissipativo  $-\eta\dot{q}$  para que ela se reduza, no limite clássico, à equação de Langevin (1.1).

Se considerarmos a função espectral  $J(\omega)$  em suas duas formas como dado por (3.11) temos

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega) \cos[\omega(t-t')]}{\omega} = \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos[\omega_k(t-t')] = \eta \delta(t-t'). \quad (3.12)$$

Então,

$$\begin{aligned} -\eta\dot{q} &= -\frac{d}{dt} \int_0^t dt' q(t') \eta \delta(t-t') \\ &= -\sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{d}{dt} \int_0^t dt' q(t') \cos[\omega_k(t-t')] \\ &= -\sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{d}{dt} \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} ds \tilde{q}(s) \frac{s}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} \right] \\ -\eta\dot{q} &= \sum_k \frac{C_k^2}{m_k} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} ds \left[ \frac{\tilde{q}(s)}{s^2 + \omega_k^2} - \frac{\tilde{q}(s)}{\omega_k^2} \right] e^{st} \end{aligned} \quad (3.13)$$

A primeira parcela do integrando é a integral que aparece em (3.6). Como podemos ver, é preciso adicionar um novo termo à nossa hamiltoniana inicial para obtermos no limite clássico a equação desejada. Na equação de Euler-Lagrange para a coordenada  $q$  devemos ter o termo

$$-\sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon-i\infty}^{\epsilon+i\infty} ds \tilde{q}(s) e^{st} = -\sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q \quad (3.14)$$

e a lagrangeana do problema deve ser

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V_0(q) + \sum_k C_k q_k q + \sum_k \left( \frac{1}{2} m_k \dot{q}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right) - \sum_k \frac{C_k^2 q^2}{2m_k \omega_k^2}. \quad (3.15)$$

Comparando (3.2) com (3.15) vemos que há um novo termo na última expressão que surgiu como uma imposição do modelo para que tenhamos o limite clássico correto. Podemos interpretar este novo termo como uma correção ao potencial; um termo de renormalização do potencial. Se quisermos que a partícula veja no limite clássico o potencial  $V_0(q)$ , devemos partir no caso quântico, por construção do nosso modelo, de um potencial efetivo  $V(q) = V_0 + \Delta V$  onde

$$\Delta V = \sum_k \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k^2} q^2 = \frac{\eta \Omega}{\pi} q^2. \quad (3.16)$$

Quando partimos de uma hamiltoniana que não possui esta correção para o potencial imposta pelo modelo, como foi o caso de Bruinsma e Bak (14), o potencial que será efetivamente "sentido" pela partícula será  $V(q) = V_0(q) - \Delta V$ . Isto é, o potencial efetivo será um potencial menor do que aquele que desejamos. Assim, ao incluirmos a presença do banho, o primeiro efeito é o do aumento da probabilidade de tunelamento. Este efeito, no entanto, não é real pois advém simplesmente do fato de estarmos considerando um potencial que é menor do que o potencial desejado e que portanto permite um tunelamento maior. Uma vez incluído o contra-termo, ele deve corrigir este crescimento "artificial" da transmissão que aparece em primeira análise.

### III.1 - A Hamiltoniana e a Questão da Invariância Translacional

Vamos escrever a hamiltoniana do nosso problema considerando agora o contra-termo. Vamos supor também, como temos feito, que o acoplamento é bilinear nas coordenadas mas vamos assumir que a barreira está localizada num ponto qualquer do espaço  $q = q_0$  e possui largura  $\ell$ . A interação só deve existir no interior da barreira e, portanto, somente nesta região é que o potencial é renormalizado.

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0(q) + \left( \sum_k \frac{C_k q^2}{2m_k \omega_k^2} - \sum_k C_k q_k q \right) \Theta(q - q_0) \Theta(q_0 + \ell - q) + \sum_k \left( \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right). \quad (3.17)$$

Consideremos a seguinte mudança de variáveis (19) para o banho:

$$\bar{q}_k = \frac{m_k \omega_k^2}{C_k} q_k \quad (3.18)$$

$$\bar{p}_k = \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} p_k \quad (3.19)$$

$$\bar{m}_k = \frac{C_k}{m_k^2 \omega_k^4} \quad (3.20)$$

Podemos rescrever

$$\bar{H} = \frac{p^2}{2m} + V_0(q) + \sum_k \left\{ \frac{\bar{p}_k^2}{2\bar{m}_k} + \frac{1}{2} \bar{m}_k \omega_k^2 [\bar{q}_k - q \Theta(q - q_0) \Theta(q_0 + \ell - q)]^2 \right\} \quad (3.21)$$

que é uma hamiltoniana invariante por translação. Quando a partícula está fora da barreira temos a hamiltoniana da partícula e do banho de osciladores sem qualquer interação. Uma vez que a partícula penetre na região do potencial, em  $q = q_0$ , automaticamente é "ligada" a interação e o potencial é renormalizado.

No caso de uma barreira localizada no espaço devemos tomar cuidado com a questão da invariância translacional pois o resultado do problema não pode depender do local onde se encontra a barreira. No problema como tratado até agora, sem contra-termo, a invariância translacional não está garantida. Fizemos em particular  $q_0 = 0$  mas se considerarmos, por exemplo, uma barreira simétrica e fizermos  $q_0 = -\ell/2$ , o resultado muda drasticamente e o primeiro termo de correção à transmissão é negativo, de ordem cinco em  $\Omega\tau_0$  e proveniente da parte dissipativa da correção.

Pelas discussões feitas anteriormente vemos que é necessário retornar ao problema resolvido na seção anterior e resolvê-lo agora partindo desta nova hamiltoniana proposta, que contém o contra-termo. Ou seja, onde antes usávamos o potencial  $V_0(q)$  simplesmente, se queremos que a partícula perceba realmente  $V_0(q)$ , devemos usar o potencial efetivo  $V(q) = V_0(q) + \Delta V$ .

### III.2 - A Resolução do Problema para a Barreira Retangular Renormalizada

Vamos retornar ao problema resolvido na seção II.1 para a barreira retangular de altura  $V_0$  e largura  $\ell$ . Ao invés da hamiltoniana (2.42) devemos considerar

$$H = \frac{p^2}{2m} + \left( V_0 + \frac{\eta\Omega}{\pi} q^2 \right) \Theta(q)\Theta(q - \ell) - \sum_k C_k q_k q \Theta(q)\Theta(q - \ell) + \sum_k \left( \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right) \quad (3.22)$$

onde  $V(q) = V_0 + \eta'\Omega q^2$  com  $\eta' = \eta/\pi$  é o potencial renormalizado que, por causa do modelo, devemos adotar. Neste caso, calculando (2.6) obtemos

$$k(q) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\eta' \Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2} \quad (3.23)$$

onde  $k_0$  é dado por (2.43), e de (2.7) temos

$$\tau = \frac{m}{\sqrt{2m\eta' \Omega}} \ell n \left( \frac{\sqrt{2m\eta' \Omega \ell^2 + \hbar^2 k_0^2} + \sqrt{2m\eta' \Omega \ell^2}}{\hbar k_0} \right). \quad (3.24)$$

Queremos a função  $g(\omega)$  que agora é dada por:

$$g(\omega) = \frac{e^{-\omega\tau}}{2\pi\omega} \int_0^\ell dq \frac{m\omega q}{\sqrt{2m\eta' \Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2}} \dots$$

$$\dots \exp \left\{ \frac{m\omega}{\sqrt{2m\eta' \Omega}} \ell n \left( \frac{\sqrt{2m\eta' \Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2} + \sqrt{2m\eta' \Omega q^2}}{\hbar k_0} \right) \right\}. \quad (3.25)$$

Esta integral está calculada no apêndice C e o resultado é

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{m\omega\ell - \sqrt{2m\eta' \Omega \ell^2 + \hbar^2 k_0^2} + \hbar k_0 e^{-\omega\tau}}{m\omega^2 - 2\eta' \Omega} \right). \quad (3.26)$$

Se não houvesse o contra termo  $\eta' \Omega q^2$ ,  $\tau$  se reduziria a  $\tau_0$  dado por (2.45) e (3.26) a (2.46).

Novamente reescrevendo o problema em função da variável adimensional  $x = \omega/\Omega$ , temos

$$g(x) = \frac{\ell}{2\pi\Omega} \left[ \frac{x - (\Omega\tau_0)^{-1} (\sqrt{1 + 2\eta' \Omega \tau_0^2 / m} - e^{-x\Omega\tau})}{x^2 - 2\eta' / m\Omega} \right]. \quad (3.27)$$

Seja  $\gamma$  a frequência de relaxação ligada ao decaimento do sistema em presença da dissipação,  $\gamma = \eta/2m$ . Como a maior frequência do banho é a frequência de corte  $\Omega$  devemos ter, por construção, que  $\Omega \gg \gamma$  (11) pois o

sistema deve decair em uma escala de tempo muito maior que os períodos dos osciladores harmônicos do banho. Se fosse diferente, o sistema decairia num tempo menor do que o necessário para ele interagir com os osciladores que representam o próprio meio dissipativo.

Seja

$$\alpha^2 = \frac{2\eta' \Omega \tau_0^2}{m} = \frac{4}{\pi} (\gamma \tau_0) (\Omega \tau_0) \quad (3.28)$$

um parâmetro adimensional em função do qual vamos rescrever  $g(x)$  e  $\tau$ . Então:

$$g(x) = \frac{\ell}{2\pi\Omega} \left[ \frac{x - (\Omega\tau_0)^{-1}(\sqrt{1+\alpha^2} - e^{-x\Omega\tau})}{x^2 - \alpha^2 (\Omega\tau_0)^{-2}} \right] \quad (3.29)$$

e

$$\tau = \tau_0 \left[ \frac{1}{\alpha} \ln(\sqrt{1+\alpha^2} + \alpha) \right]. \quad (3.30)$$

Vamos considerar o limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$  conforme feito por Bruinsma e Bak (14). Neste caso temos que  $\tau_0^{-1} \gg \Omega \gg \gamma$  ou  $1 \gg \Omega\tau_0 \gg \gamma\tau_0$  e  $\alpha^2 \ll 1$ . Podemos expandir  $f(\alpha) = \ln(\sqrt{1+\alpha^2} + \alpha)$  em série de MacLaurin em torno de  $\alpha$  e rescrever (3.30) como

$$\tau = \tau_0 \left( 1 - \frac{\alpha^2}{3!} \right) \quad (3.31)$$

De fato, no limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$  a correção ao potencial introduzida pela presença do contra-termo é muito pequena e em primeira ordem devemos ter  $\tau \sim \tau_0$ , isto é, o tempo de travessia deve permanecer aproximadamente o mesmo. Em segunda ordem,  $\tau$  deve ser menor que  $\tau_0$  pois se aumentamos a altura da barreira nós a tornamos mais proibida, classicamente falando, fazendo com que a partícula queira atravessá-la mais rapidamente.

De qualquer modo, o limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$  é um limite de correções ao movimento ballístico pois sendo  $\tau_0 \ll \Omega^{-1}$  o tempo de permanência da

partícula na região de interação é muito menor que o período de qualquer um dos osciladores do banho.

Para  $\Omega\tau_0 \ll 1$  temos que  $\Omega\tau \ll 1$  e como  $0 < x < 1$  podemos expandir (3.29) com o auxílio de (3.31). Não esquecendo que  $\alpha^2$  tem ordem de  $\tau_0^2$  e rearrumando a expansão em série de potências de  $\Omega\tau_0$ ,

$$g(x) = \frac{\ell}{2\pi\Omega} \left[ \frac{\Omega\tau_0}{2!} - x \frac{(\Omega\tau_0)^2}{3!} + \left( x^2 - 12 \frac{\gamma}{\Omega} \right) \frac{(\Omega\tau_0)^3}{4!} + \right. \\ \left. - \left( x^3 - 36x \frac{\Gamma}{\Omega} \right) \frac{(\Omega\tau_0)^4}{5!} + \dots \right]. \quad (3.32)$$

Comparando (2.49) e (3.32) vemos que as séries só começam a se diferenciar para o termo de terceira ordem e, mesmo nestes casos, a diferença se dá por um fator  $\gamma\Omega^{-1} \ll 1$ .

Podemos calcular agora  $T_E^i$  através de (2.48) e teremos

$$T_E^i = T_E \exp \left\{ \frac{\eta\ell^2}{\pi\hbar} \left[ \frac{(\Omega\tau_0)^2}{4} - \frac{(\Omega\tau_0)^3}{18} \right] \right\}. \quad (3.33)$$

Os resultados (2.50) e (3.33) são semelhantes - porém não são iguais. Na primeira expressão temos  $T_E^0$  que é a transmissão pela barreira retangular; agora temos  $T_E$  que deve ser recalculado para o novo  $k(q)$  que estamos utilizando devido à presença do contra-termo. Temos um potencial quadrático e usando (2.5) e (3.23),

$$T_E = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^\ell dq \sqrt{2m\eta'\Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2} \right\} \\ = \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left[ \sqrt{2m\eta'\Omega\ell^2 + \hbar^2 k_0^2} \ell + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\hbar^2 k_0^2}{\sqrt{2m\eta'\Omega}} \ln \left( \frac{\sqrt{2m\eta'\Omega\ell^2 + \hbar^2 k_0^2} + \sqrt{2m\eta'\Omega\ell^2}}{\hbar k_0} \right) \right] \right\}. \quad (3.34)$$

Escrevendo em função do parâmetro adimensional  $\alpha$ ,

$$T_E = \exp \left\{ -k_0 \ell \left[ \sqrt{1 + \alpha^2} + \frac{1}{\alpha} \ln(\sqrt{1 + \alpha^2} + \alpha) \right] \right\}, \quad (3.35)$$

e no limite até agora considerado de  $\Omega\tau_0 \ll 1$  e  $\alpha^2 \ll 1$ ,

$$\begin{aligned} T_E &= \exp \left\{ -k_0 \ell \left( 2 + \frac{\alpha^2}{3} \right) \right\} \\ &= T_E^0 \exp \left\{ -\frac{k_0 \ell \alpha^2}{3} \right\} \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde  $T_E^0$  é dado por (2.44). Ainda podemos rescrever  $\alpha^2$  como:

$$\alpha^2 = \frac{4}{\pi} (\gamma\tau_0) (\Omega\tau_0) = \frac{2\eta'}{m} \left( \frac{m\ell}{\hbar k_0} \right) \Omega\tau_0 = \frac{\eta\ell}{k_0\pi\hbar} 2\Omega\tau_0 \quad (3.37)$$

e

$$T_E = T_E^0 \exp \left\{ -\frac{\eta\ell^2}{\pi\hbar} \left( \frac{2}{3} \Omega\tau_0 \right) \right\}. \quad (3.38)$$

Finalmente juntando (3.38) com (3.33), temos que

$$T_E = T_E^0 \exp \left\{ \frac{\eta\ell^2}{\pi\hbar} \left[ -\frac{2}{3} \Omega\tau_0 + \frac{(\Omega\tau_0)^2}{4} - \frac{(\Omega\tau_0)^3}{18} \right] \right\}. \quad (3.39)$$

Agora sim devemos comparar (2.50) com (3.39). Vemos que resolvendo o problema da barreira retangular incluindo o contra-termo e no limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$ , a primeira correção à transmissão é negativa e portanto faz com que a probabilidade da partícula atravessar a barreira, quando no interior da mesma existe um meio dissipativo, diminua!

Como vimos anteriormente, o termo quadrático vem da flutuação e o termo cúbico da dissipação. O termo linear que obtivemos vem diretamente da modificação feita na barreira por imposição do modelo adotado.

A existência do banho de osciladores, que gera a dissipação e a flutuação, implica também numa modificação na forma da barreira para que, no limite clássico, o modelo quântico forneça os resultados corretos. É justamente esta modificação que nos fornece a exponencial decrescente que indica que a transmissão é menor através de uma barreira que contenha um meio material adverso à passagem da partícula.

### III.3 - Alguns Comentários

Temos dois resultados diferentes - (2.50) e (3.39)- quando resolvemos o problema sem e com contra-termo respectivamente. No primeiro resultado a conclusão que se chega é que o tunelamento cresce; no segundo o tunelamento decresce.

Embora o segundo resultado nos pareça ser o correto para a descrição da transmissão por uma barreira dissipativa e seja o resultado obtido quando partimos da hamiltoniana renormalizada, é importante notar que nos dois casos estamos no mesmo limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$ . Este é um limite de correções à transmissão balística. Neste caso temos que o tempo de travessia da partícula pela barreira é muito menor que o período de qualquer um dos osciladores do banho e sendo assim a partícula não pode "ver" qualquer oscilação.

O objetivo da próxima seção é a análise desta questão das escalas de tempo. Qual o limite correto para a resolução do problema da transmissão dissipativa ?

## IV - A Relação entre Freqüência de Corte e Tempo de Travessia

Ainda em seu artigo de 1932, MacColl (2) ressaltava que o processo de tunelamento é caracterizado tanto por uma taxa de tunelamento quanto por um tempo de travessia durante o qual a partícula efetivamente atravessa a barreira. A discussão sobre a questão do tempo nos problemas de tunelamento é muito controversa e há "diferentes tempos" envolvidos.

Para caracterizar o tempo de travessia, Büttiker e Landauer (16) estudaram o tunelamento através de uma barreira dependente do tempo dada por

$$V(q, t) = V_0(q) + V_1(q) \cos(\omega t). \quad (4.1)$$

Em particular, eles estudaram o caso de  $V_0(q)$  ser uma barreira retangular de altura  $V_0$  e largura  $\ell$  e  $V_1(q)$  ser uma perturbação de amplitude  $V_1$  muito pequena e constante, existente no interior da barreira e nula fora dela.

Sendo o tempo de travessia  $\tau$  dado por (2.7) eles observaram que: se o período do potencial é grande comparado com o tempo durante o qual a partícula interage com a barreira ( $\omega\tau \ll 1$ ), a partícula vê, efetivamente, uma barreira estática durante sua travessia. A partícula, neste caso, como que não nota a presença do termo oscilante. Por outro lado, se a freqüência de oscilação da barreira é grande em relação ao recíproco do tempo de travessia ( $\omega\tau \gg 1$ ) há muitos ciclos de oscilação durante o intervalo de tempo no qual a partícula interage com o potencial. A barreira efetiva percebida pela partícula não é maior ou menor que  $V_0$ ; neste caso a transmissão é diferente do caso estático anterior porque a partícula pode absorver ou ceder *quanta* de energia. A partícula pode ser transmitida com maior ou menor facilidade.

No problema que vem sendo tratado até agora, temos um potencial semelhante ao (4.1) dado por

$$V(q, t) = V_0(q) + V_1(q) \sum_k C_k q_k(t). \quad (4.2)$$

Cada um dos  $q_k(t)$  é o movimento de um oscilador harmônico de frequência  $\omega_k$  e o que fazemos é somar em todos os osciladores.

Se  $0 \leq \omega_k \leq \Omega$ , podemos considerar que no limite que  $\Omega\tau_0 \ll 1$  temos, para todas as frequências  $\omega_k$ , que  $\omega_k\tau_0 \ll 1$  e a partícula não percebe a oscilação de nenhum dos osciladores atravessando, efetivamente, uma barreira estática. De fato, para  $\Omega\tau_0 \ll 1$  temos correções ao movimento balístico e tanto (2.50) como (3.39) nos dão, em primeira ordem,  $T_E^t \sim T_E^0$ . A transmissão no caso estático é aproximadamente a transmissão sem a presença dos osciladores.

Se queremos que a partícula interaja com os osciladores podendo assim ganhar ou perder energia, devemos ter  $\Omega\tau_0 \gg 1$ . Neste caso, apesar de haver algumas frequências  $\omega_k < \tau^{-1}$ , haverá também frequências para as quais  $\omega_k \gg \tau^{-1}$  que farão com que a partícula possa absorver energia ou ceder energia para os osciladores de mais baixa frequência do banho.

Se observarmos as deduções feitas por Caldeira e Leggett (6, 10, 11) veremos que, em todo o estudo feito para este modelo no caso dos potenciais meta-estáveis, sempre se considera que a frequência de corte  $\Omega$  é muito maior que qualquer uma das frequências típicas do problema. Tal consideração é importante inclusive na dedução do modelo quando consideramos os limites das integrais em frequências como indo de zero até infinito.

Devemos ter então que  $\Omega \gg \tau_0^{-1}$  e  $\Omega \gg \gamma$  (como já foi considerado).  $\tau_0$  é o tempo de travessia da partícula pela barreira, o tempo de interação com o potencial e, neste caso, o tempo de permanência sob a barreira. Já  $\gamma^{-1}$  é o tempo de decaimento ligado ao coeficiente  $\eta$ . A relação entre  $\tau_0$  e  $\gamma^{-1}$  depende do tipo de acoplamento. Se o acoplamento for forte devemos ter  $\gamma > \tau_0^{-1}$ ; no caso do acoplamento fraco temos que  $\gamma < \tau_0^{-1}$ .

Quando fizemos  $\Omega\tau_0 \ll 1$  e, por construção,  $\gamma \ll \Omega$ , só podíamos estar considerando  $\tau_0^{-1} \gg \Omega \gg \gamma$  e, portanto, acoplamento fraco. Evidentemente, se a partícula atravessa a barreira tão rapidamente que vê uma barreira estática, ou seja, não vê os osciladores do banho, seria um contra-senso falar em acoplamento forte.

## IV.1 - O Problema ainda Sem Contra-Termo no Limite Correto.

Vamos retornar agora ao problema como resolvido por Bruinsma e Bak (14), isto é, o problema ainda sem considerar o contra-termo. Queremos analisar este problema no limite de  $\Omega\tau_0 \gg 1$  que verificamos ser o limite de interesse - ao invés do limite de correções ao movimento balístico  $\Omega\tau_0 \ll 1$ .

Usando a variável adimensional  $x$  vimos em (2.47) que

$$g(x) = \frac{\ell}{2\pi\Omega} \left[ \frac{x - (\Omega\tau_0)^{-1} (1 - e^{-x\Omega\tau_0})}{x^2} \right] \quad (4.3)$$

e queremos calcular

$$T_E^t = T_E^0 \exp \left\{ \frac{2\pi\eta}{\hbar} \Omega^2 \int_0^1 dx x \left\{ |g^2(x) - g^2(-x)| + |g(x) + g(-x)|^2 \right\} \right\}. \quad (4.4)$$

No limite de  $\Omega\tau_0 \gg 1$  não podemos mais fazer as aproximações feitas anteriormente e devemos calcular diretamente

$$T_E^t = T_E^0 \exp \left\{ \frac{\eta\ell^2}{\pi\hbar} \int_0^1 dx \left[ \frac{2\sinh(x\Omega\tau_0) - \sinh(2x\Omega\tau_0)}{x^3(\Omega\tau_0)^2} + \frac{-2x\Omega\tau_0 [1 - \cosh(x\Omega\tau_0)]}{x^3(\Omega\tau_0)^2} + \frac{3 - 4\cosh(x\Omega\tau_0) + \cosh(2x\Omega\tau_0)}{x^3(\Omega\tau_0)^2} \right] \right\}. \quad (4.5)$$

As primeiras parcelas do integrando vêm do termo dissipativo e a última do flutuante. O integrando converge na origem e esta integral pode ser feita normalmente (20). Obtemos

$$T_E^t = T_E^0 \exp \left\{ \frac{\eta\ell^2}{\pi\hbar} \left\{ \frac{-2\sinh(\Omega\tau_0) + \sinh(2\Omega\tau_0)}{2(\Omega\tau_0^2)} + \frac{-3 + 4\cosh(\Omega\tau_0) - \cosh(2\Omega\tau_0)}{2(\Omega\tau_0^2)} \right\} \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{-3 \cosh(\Omega\tau_0) + \cosh(2\Omega\tau_0) + 2 + 2\sinh(\Omega\tau_0) - \sinh(2\Omega\tau_0)}{\Omega\tau_0} + \\
& + \frac{1}{2}E_i(\Omega\tau_0) - \frac{5}{2}E_i(-\Omega\tau_0) + 2E_i(-2\Omega\tau_0) + \\
& - \lim_{x \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{2}E_i(x\Omega\tau_0) - \frac{5}{2}E_i(-x\Omega\tau_0) + 2E_i(-2x\Omega\tau_0) \right] \Big\} \quad (4.6)
\end{aligned}$$

onde (21)

$$E_i(x) = \begin{cases} - \int_{-x}^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{t} & , x < 0 \\ - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[ \int_{-x}^{-\epsilon} dt \frac{e^{-t}}{t} + \int_{\epsilon}^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{t} \right] & , x > 0 . \end{cases} \quad (4.7)$$

Podemos expressar a integral exponencial  $E_i(x)$  como sendo (21)

$$E_i(x) = C + \ln|x| + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x^k}{k \cdot k!} \quad (4.8)$$

e portanto temos que

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2}E_i(x\Omega\tau_0) - \frac{5}{2}E_i(-x\Omega\tau_0) + 2E_i(-2x\Omega\tau_0) = 2\ln 2 + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(x\Omega\tau_0)^k}{k \cdot k!} - \frac{5}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-x\Omega\tau_0)^k}{k \cdot k!} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-2x\Omega\tau_0)^k}{k \cdot k!} . \quad (4.9)
\end{aligned}$$

Se fizéssemos em (4.6) o limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$  e expandíssemos a expressão obteríamos novamente o resultado (2.50). Considerando no entanto o limite de  $\Omega\tau_0 \gg 1$ , tomando os limites assintóticos (22)

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} [x e^{-x} E_i(x)] = 1, \quad (4.10)$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} [-x e^x E_i(-x)] = 1 \quad (4.11)$$

e considerando finalmente que para  $\Omega\tau_0 \gg 1$  também temos que

$$\sinh(\Omega\tau_0) \sim \cosh(\Omega\tau_0) \sim \frac{e^{\Omega\tau_0}}{2}, \quad (4.12)$$

podemos reescrever para este novo limite de interesse

$$\begin{aligned} T_E^t &= T_E^0 \exp \left\{ \frac{\eta \ell^2}{\pi \hbar} \left[ \frac{2e^{\Omega\tau_0} - 3}{4(\Omega\tau_0)^2} + \frac{-e^{\Omega\tau_0} + 2}{2\Omega\tau_0} + \frac{1}{2} \frac{e^{\Omega\tau_0}}{\Omega\tau_0} - 2\ell n 2 \right] \right\} \\ &= T_E^0 \exp \left\{ \frac{\eta \ell^2}{\pi \hbar} \left[ \frac{e^{\Omega\tau_0}}{2(\Omega\tau_0)^2} - 2\ell n 2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Finalmente,

$$T_E^t = T_E^0 e^{-(2\ell n 2)\eta \ell^2 / \pi \hbar} \exp \left\{ \frac{\eta \ell^2}{\pi \hbar} \left[ \frac{e^{\Omega\tau_0}}{2(\Omega\tau_0)^2} \right] \right\}. \quad (4.14)$$

O primeiro fator de correção que escrevemos para a transmissão sem dissipação  $T_E^0$  é uma exponencial decrescente que, a menos de um fator numérico, depende apenas da dissipação através do coeficiente  $\eta$  e da barreira em si através de sua espessura  $\ell$ . Este tipo de correção em primeira ordem e que depende de  $\eta \ell^2 / \pi \hbar$  é o resultado encontrado por Caldeira e Leggett (6,10) para o caso de um potencial meta-estável na presença de dissipação.

O segundo fator que escrevemos depende diretamente da frequência de corte  $\Omega$  escolhida para o banho - o que não é desejado. Além disto, quando fazemos  $\Omega\tau_0 \gg 1$  este termo diverge muito rapidamente para  $+\infty$ .

Ou seja, estamos multiplicando a transmissão por um fator infinito quando levamos em consideração a presença de um meio dissipativo no interior da barreira e a interação da partícula com este meio. Neste caso, fazemos com que a transmissão seja maior do que um o que obviamente não é um resultado correto.

Mais uma vez, a idéia para se tentar controlar tal fator é a inclusão do contra-termo. Quando consideramos a frequência de corte como sendo muito grande ( $\Omega \gg \tau_0^{-1}$ ), estamos automaticamente considerando uma renormalização muito grande para o potencial. A barreira renormalizada é muito alta e faz com que a probabilidade da partícula ser transmitida caia bruscamente. A idéia é justamente que esta queda na transmissão corrija, de alguma forma, a parcela divergente indesejada que aparece no expoente.

## IV.2 - O Problema Com Contra-Termo no Limite Correto

Como vimos na seção III.2 a inclusão do contra-termo na resolução do problema nos fornece uma função  $g(x)$  dada por

$$g(x) = \frac{\ell}{2\pi\Omega} \left[ \frac{x - (\Omega\tau_0)^{-1}(\sqrt{1 + \alpha^2} - e^{-x\Omega\tau})}{x^2 - \alpha^2(\Omega\tau_0)^{-2}} \right] \quad (4.15)$$

onde

$$\tau = \tau_0 \left[ \frac{1}{\alpha} \ln(\sqrt{1 + \alpha^2} + \alpha) \right] \quad (4.16)$$

e

$$\alpha^2 = \frac{4}{\pi} (\gamma\tau_0)(\Omega\tau_0). \quad (4.17)$$

Novamente neste caso, não podemos fazer as aproximações feitas anteriormente para o limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$  e devemos integrar:

$$T_E^t = T_E \exp \left\{ \frac{\eta\ell^2}{\pi\hbar} \int_0^{\tau} dx \left[ \frac{x(\Omega\tau_0)^{-2} [2\sqrt{1 + \alpha^2} \sinh(x\Omega\tau) - \sinh(2x\Omega\tau)]}{[x^2 - \alpha^2(\Omega\tau_0)^{-2}]^2} \right] + \right.$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{2x^2(\Omega\tau_0)^{-1}[\sqrt{1+\alpha^2} - \cosh(x\Omega\tau)]}{[x^2 - \alpha^2(\Omega\tau_0)^{-2}]^2} \\
& + \frac{x(\Omega\tau_0)^{-2}[3 + 2\alpha^2 - 4\sqrt{1+\alpha^2}\cosh(x\Omega\tau) + \cosh(2x\Omega\tau)]}{[x^2 - \alpha^2(\Omega\tau_0)^{-2}]^2} \Bigg\} \quad (4.18)
\end{aligned}$$

onde as primeiras parcelas do integrando, como em (4.5), vêm do termo dissipativo e a última do termo flutuante. Se fizéssemos  $\alpha$  ir para zero, teríamos que  $\tau$  iria para  $\tau_0$  e (4.18) voltaria a ser (4.5). Este integrando agora pode possuir um polo para  $x = \alpha(\Omega\tau_0)^{-1}$ . No entanto, se substituirmos este valor de  $x$  teremos exponenciais de  $\tau\alpha/\tau_0 = \ln(\sqrt{1+\alpha^2} + \alpha)$  e poderemos verificar que o integrando é uma função bem comportada em todo o intervalo de integração e pode ser integrado normalmente. Utilizando as igualdades

$$\frac{x}{[x^2 - \alpha^2(\Omega\tau_0)^{-2}]^2} = \frac{\Omega\tau_0}{4\alpha} \left\{ \frac{1}{[x - \alpha(\Omega\tau_0)^{-1}]^2} - \frac{1}{[x + \alpha(\Omega\tau_0)^{-1}]^2} \right\} \quad (4.19)$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{x^2}{[x^2 - \alpha^2(\Omega\tau_0)^{-2}]^2} &= \frac{1}{4} \left\{ \frac{1}{[x - \alpha(\Omega\tau_0)^{-1}]^2} + \frac{1}{[x + \alpha(\Omega\tau_0)^{-1}]^2} + \right. \\
& \left. + \frac{\Omega\tau_0}{\alpha} \left[ \frac{1}{x - \alpha(\Omega\tau_0)^{-1}} - \frac{1}{x + \alpha(\Omega\tau_0)^{-1}} \right] \right\} \quad (4.20)
\end{aligned}$$

resolvemos a integral (20) obtendo:

$$\begin{aligned}
T_E^i &= T_E \exp \left\{ \frac{\eta\ell^2}{\pi\hbar} \left[ \frac{-2\sqrt{1+\alpha^2}\sinh(\Omega\tau) + \sinh(2\Omega\tau)}{2[(\Omega\tau_0)^2 - \alpha^2]} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{-3 - 2\alpha^2 + 4\sqrt{1+\alpha^2}\cosh(\Omega\tau) - \cosh(2\Omega\tau)}{2[(\Omega\tau_0)^2 - \alpha^2]} \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\Omega\tau_0[\sqrt{1+\alpha^2} - \cosh(\Omega\tau)]}{-(\Omega\tau_0)^2 - \alpha^2} + \\
& + \frac{\sqrt{1+\alpha^2}}{2\alpha} \ln\left(\frac{\Omega\tau_0 + \alpha}{\Omega\tau_0 - \alpha}\right) + \frac{-2 - \alpha^2 + 2\sqrt{1+\alpha^2}}{\alpha^2} + \\
& + \frac{e^{\tau\alpha/\tau_0}}{4\alpha} \left[ \left( \frac{\tau}{\tau_0}(-\sqrt{1+\alpha^2} + \alpha) + 1 \right) E_i\left(\frac{\tau}{\tau_0}(\Omega\tau_0 - \alpha)\right) + \right. \\
& \left. + \left( \frac{\tau}{\tau_0}(-3\sqrt{1+\alpha^2} - \alpha) - 1 \right) E_i\left(-\frac{\tau}{\tau_0}(\Omega\tau_0 + \alpha)\right) \right] + \\
& + \frac{e^{-\tau\alpha/\tau_0}}{4\alpha} \left[ \left( \frac{\tau}{\tau_0}(3\sqrt{1+\alpha^2} - \alpha) + 1 \right) E_i\left(-\frac{\tau}{\tau_0}(\Omega\tau_0 - \alpha)\right) + \right. \\
& \left. + \left( \frac{\tau}{\tau_0}(\sqrt{1+\alpha^2} + \alpha) - 1 \right) E_i\left(\frac{\tau}{\tau_0}(\Omega\tau_0 + \alpha)\right) \right] + \\
& + \frac{\tau}{\tau_0} \left[ \frac{\sqrt{1+\alpha^2}}{\alpha} \left[ e^{\tau\alpha/\tau_0} E_i\left(-\frac{\tau}{\tau_0}\alpha\right) - e^{-\tau\alpha/\tau_0} E_i\left(\frac{\tau}{\tau_0}\alpha\right) \right] + \right. \\
& \left. + \frac{1}{2\alpha} \left[ e^{2\tau\alpha/\tau_0} \left[ E_i\left(-2\frac{\tau}{\tau_0}(\Omega\tau_0 + \alpha)\right) - E_i\left(-2\frac{\tau}{\tau_0}\alpha\right) \right] + \right. \right. \\
& \left. \left. - e^{-2\tau\alpha/\tau_0} \left[ E_i\left(-2\frac{\tau}{\tau_0}(\Omega\tau_0 - \alpha)\right) - E_i\left(2\frac{\tau}{\tau_0}\alpha\right) \right] \right] \right] \right\}. \quad (4.21)
\end{aligned}$$

Precisamos analisar a expressão (4.21) no limite de  $\Omega\tau_0 \gg 1$ . Vamos chamar  $\epsilon = \gamma/\Omega$  onde, como vimos,  $\epsilon \rightarrow 0$  por construção do modelo utilizado. Vamos considerar também o parâmetro finito  $\lambda = \gamma\tau_0$  (temos que  $\lambda > 1$  para o acoplamento forte e  $\lambda < 1$  para o acoplamento fraco). Podemos reescrever nossas grandezas em função destes parâmetros.

$$\Omega\tau_0 = \frac{\lambda}{\epsilon} \gg 1 \quad (4.22)$$

$$\alpha \sim \frac{\lambda}{\sqrt{\epsilon}} \gg 1 \quad (4.23)$$

$$\Omega\tau \sim \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \ln \left( \frac{2\lambda}{\sqrt{\epsilon}} \right) \gg 1. \quad (4.24)$$

Temos também que

$$\frac{\tau}{\tau_0} \alpha \sim \ln \left( \frac{2\lambda}{\sqrt{\epsilon}} \right) \gg 1 \quad (4.25)$$

e

$$\frac{\alpha}{\Omega\tau_0} \sim \sqrt{\epsilon} \ll 1. \quad (4.26)$$

Considerando as expressões (4.10), (4.11) e (4.12) reescrevemos (4.21) como

$$\begin{aligned} T_E^t = T_E \exp & \left\{ \frac{\eta \ell^2}{\pi \hbar} \left[ \frac{\sqrt{1 + \alpha^2} e^{\Omega\tau} - 3 - 2\alpha^2}{2[(\Omega\tau_0)^2 - \alpha^2]} + \frac{\Omega\tau_0(-e^{\Omega\tau} + 2\sqrt{1 + \alpha^2})}{2[(\Omega\tau_0^2) - \alpha^2]} + \right. \right. \\ & + \frac{\sqrt{1 + \alpha^2}}{2\alpha} \ln \left( \frac{\Omega\tau_0 + \alpha}{\Omega\tau_0 - \alpha} \right) + \frac{-2 - \alpha^2 + 2\sqrt{1 + \alpha^2}}{\alpha^2} + \\ & + \frac{e^{\Omega\tau}}{4\alpha} \left[ \left( -\sqrt{1 + \alpha^2} + \alpha + \frac{\tau_0}{\tau} \right) \left( \frac{1}{\Omega\tau_0 - \alpha} \right) + \right. \\ & \left. \left. + \left( \sqrt{1 + \alpha^2} + \alpha - \frac{\tau_0}{\tau} \right) \left( \frac{1}{\Omega\tau_0 + \alpha} \right) \right] + \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\tau}{\tau_0} \left( -2 \frac{\sqrt{1+\alpha^2} \tau_0}{\alpha^2} \frac{1}{\tau} + \frac{1}{2\alpha^2} \frac{\tau_0}{\tau} \right) \Bigg] \Bigg\} \\
= T_E \exp & \left\{ \frac{\eta \ell^2}{\pi \hbar} \left\{ \left[ \frac{\sqrt{1+\alpha^2} - \Omega \tau_0}{2[(\Omega \tau_0)^2 - \alpha^2]} + \frac{(\Omega \tau_0 - \sqrt{1+\alpha^2}) + \tau_0/\tau}{2[(\Omega \tau_0)^2 - \alpha^2]} \right] e^{\Omega \tau} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\sqrt{1+\alpha^2}}{2\alpha} \ln \left( \frac{\Omega \tau_0 + \alpha}{\Omega \tau_0 - \alpha} \right) + \frac{-3 - 2\alpha^2}{2\alpha^2} \right\} \right\} \quad (4.27)
\end{aligned}$$

finalmente, considerando (4.23) e (4.26) escrevemos

$$T_E^i = T_E \exp \left\{ \frac{\eta \ell^2}{\pi \hbar} \left[ -1 + \frac{e^{\Omega \tau}}{2(\Omega \tau)(\Omega \tau_0)} \right] \right\}. \quad (4.28)$$

Se compararmos (4.13) com (4.28) poderemos ver que a última diverge mais lentamente que a primeira. O expoente na primeira é  $\Omega \tau_0$  e não  $\Omega \tau$  como na última. Apesar de termos  $\Omega \tau \gg 1$  temos que  $\Omega \tau \ll \Omega \tau_0$ . De fato isto é esperado pois, como a barreira renormalizada é muito maior do que a inicial, devemos ter  $\tau \ll \tau_0$ .

Queremos comparar (4.28) com (4.14). Para isso precisamos calcular  $T_E$  para  $\alpha \gg 1$ . Temos (3.35):

$$T_E = \exp \left\{ -k_0 \ell \left[ \sqrt{1+\alpha^2} + \frac{1}{\alpha} \ln(\sqrt{1+\alpha^2} + \alpha) \right] \right\} \quad (4.29)$$

e para  $\alpha \gg 1$

$$T_E \sim e^{-\alpha k_0 \ell} \quad (4.30)$$

que é uma transmissão muito menor do que a transmissão para a barreira não normalizada. Como esperávamos, para  $\alpha$  muito grande  $T_E$  vai para zero. Reescremos (4.28) como

$$T_E^t = e^{-\alpha k_0 \ell} e^{-\eta \ell^2 / \pi \hbar} \exp \left\{ \frac{\eta \ell^2}{\pi \hbar} \left[ \frac{e^{\Omega r}}{2(\Omega \tau)(\Omega \tau_0)} \right] \right\}. \quad (4.31)$$

Temos então que, para o problema sem contra-termo e com contra-termo respectivamente :

$$T_E^t = T_E^0 e^{-(2\ell n_2)\eta \ell^2 / \pi \hbar} \exp \left\{ \frac{\eta \ell^2}{\pi \hbar} \left[ \frac{e^{\Omega \tau_0}}{2(\Omega \tau_0)^2} \right] \right\} \quad (4.32)$$

$$T_E^t = T_E^0 e^{-\eta \ell^2 / \pi \hbar} \exp \left\{ -(\alpha - 2)k_0 \ell + \frac{\eta \ell^2}{\pi \hbar} \left[ \frac{e^{\Omega r}}{2(\Omega \tau)(\Omega \tau_0)} \right] \right\}. \quad (4.33)$$

Comparando estes dois resultados podemos ver claramente que a inclusão do contra-termo em (4.33) tenta controlar a divergência que aparecia em (4.32). Nos dois casos temos o primeiro fator de correção proporcional a  $\eta \ell^2 / \pi \hbar$  que faz com que a transmissão diminua quando consideramos a dissipação mas temos também um termo espúrio que explode nas duas expressões quando  $\Omega \tau_0 \gg 1$  - um pouco atenuado na segunda expressão pela presença do contra-termo. Ou seja, apesar da inclusão do contra-termo, a transmissão diverge no limite de  $\Omega \tau_0 \gg 1$  o que, como já foi dito no final da seção anterior, não pode ser um resultado correto.

Estamos novamente no impasse de termos uma transmissão divergente quando consideramos o limite de tempos longos ( $\tau_0 \gg \Omega^{-1}$ ) que vimos ser o correto para que possamos estudar, de fato, a interação da partícula com os osciladores do banho. Este tipo de problema - de termos uma probabilidade degenerada quando consideramos o limite de tempos longos - também aparece no estudo da teoria de perturbação dependente do tempo.

### IV.3- O Limite Correto e a Teoria de Perturbação Dependente do Tempo - Alguns Comentários

Consideremos uma hamiltoniana  $H = H_0 + V(t)$  onde os auto-estados  $E_m$  de  $H_0$  são conhecidos. Se  $V(t)$  é pequeno, podemos usar a teoria de perturbação dependente do tempo para estudar este problema. Neste caso,

queremos em geral conhecer a probabilidade do sistema, inicialmente no auto-estado  $E_i$  de  $H_0$ , ser encontrado no auto-estado  $E_f$  após um intervalo de tempo  $\Delta t$  sob ação do potencial perturbativo.

Seja, por exemplo,  $V(t) = V$  uma perturbação que começa a atuar em  $t_0 = 0$ . Em  $t = \tau$  queremos saber a distribuição de probabilidade de encontrarmos o sistema nos diversos auto-estados de energia. Se os estados são degenerados, um resultado conhecido (23) é que, quando consideramos apenas a aproximação em primeira ordem, a probabilidade de transição cresce no tempo com  $\tau^2$ . Este mesmo resultado aparece quando fazemos perturbações senoidais -  $V(t) = V$  é apenas um caso particular de  $V(t) = V \cos \omega t$  para  $\omega \equiv 0$ .

Se considerarmos neste exemplo o limite de tempos longos veremos, obviamente, que o resultado não está correto pois uma probabilidade não pode ser maior do que a unidade. Estamos em uma situação semelhante àquela encontrada em nosso problema de transmissão com dissipação. A solução deste impasse está no limite de tempo que estamos considerando. Para que seja válida a aproximação em primeira ordem é necessário que consideremos apenas o limite de tempos curtos. Se o intervalo de tempo começa a crescer, o efeito dos termos de ordem superior que foram desprezados começa a se tornar da maior importância para que seja controlado justamente este tipo de problema. Ou seja, a aproximação em primeira ordem é válida apenas no limite de tempos curtos !

No modelo proposto por Bruinsma e Bak (14), como eles próprios enunciam, estamos na verdade resolvendo um problema de espalhamento - os problemas de espalhamento podem se tratados utilizando teoria de perturbação. O método apresentado para resolução do problema da transmissão por uma barreira dissipativa é portanto, na verdade, um misto de aproximação semi-clássica com teoria de perturbação em primeira ordem. Quando escrevemos a equação (2.18) para  $S_1$  estamos tratando o acoplamento de forma perturbativa e considerando apenas o termo de primeira ordem. Sendo assim, o modelo proposto por Bruinsma e Bak é válido somente no limite de tempos curtos que vem a ser exatamente o limite de correções ao movimento balístico. Já sabemos que, se quisermos que a partícula interaja de fato com os osciladores do banho podendo assim ganhar ou perder energia, será preciso considerar o limite oposto ao da validade da aproximação, isto é, o limite de tempos longos. Neste caso, não podemos tratar o problema em primeira ordem como feito no modelo

apresentado.

Uma vantagem do formalismo utilizado por Caldeira e Leggett na resolução da barreira meta-estável com dissipação é que estes, apesar de considerarem o limite semi-clássico, não fazem qualquer tipo de aproximação perturbativa.

## V - Conclusões

A conclusão mais importante deste trabalho é que, apesar de ser muito boa a idéia de Bruinsma e Bak de incluir o meio dissipativo apenas no interior da barreira deixando a partícula envolver livremente fora dela, o problema da transmissão por uma barreira dissipativa ainda não está resolvido de forma definitiva. O modelo para resolução deste problema precisa ser aprimorado e o formalismo precisa ser compatível com o problema correto que desejamos estudar.

A pergunta inicial deste trabalho era: qual o efeito da dissipação nos problemas do tunelamento quântico? A dissipação deve aumentar ou diminuir a probabilidade de tunelamento? Como representar quanticamente o acoplamento e resolver o problema do tunelamento? A questão da representação do acoplamento foi discutida e nós o representamos através da interação com um banho de osciladores harmônicos. Quanto à questão do tunelamento em si, a presença do meio dissipativo no interior da barreira parece inibir a transmissão da partícula como achamos coerente e como no problema resolvido por Caldeira e Leggett.

No limite de validade da aproximação feita neste trabalho, que é o limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$  resolvido por Bruinsma e Bak, vemos que a inclusão de um contra-termo de renormalização do potencial que surge do modelo utilizado para representação do problema – termo este não considerado pelos últimos – faz com que a transmissão decresça. Mesmo neste limite, que não é o limite de interesse do problema dissipativo por se tratar do limite de correções ao movimento balístico, vemos que a utilização da hamiltoniana correta para a quantização do problema nos fornece uma “transmissão com dissipação” que é inferior à transmissão encontrada quando não há meio material no interior da barreira. Como vimos, a inclusão do contra-termo é imprescindível. É ele que nos garante a invariância translacional do problema e o limite clássico desejado para as equações de movimento. Tratar o problema sem este contra-termo significa estudar uma barreira inferior a barreira efetiva que queremos – é por este motivo que Bruinsma e Bak encontram uma transmissão maior.

No decorrer do trabalho vimos que, para que a partícula possa realmente interagir com o meio dissipativo e para que possamos realmente falar em dissipação, devemos considerar o limite oposto ao considerado inicialmente, isto é, o limite de  $\Omega\tau_0 \gg 1$ . Neste caso o resultado encon-

trado é um resultado incorreto mas, como dissemos, isto decorre do fato deste limite ser incompatível com as aproximações feitas anteriormente no modelo. Ainda assim vemos que, fora o termo espúrio que diverge para tempos longos e que provavelmente surgiu devido a esta incompatibilidade, encontramos um resultado que independe do intervalo de tempo e no qual a transmissão decresce. Agora o papel do contra-termo é mais uma vez renormalizar o potencial a fim de controlar esta divergência; a divergência de fato é "atenuada" mas não o suficiente para que obtenhamos um resultado correto pois nosso impasse é decorrente da utilização de aproximações falsas.

Em resumo temos: a inclusão do contra-termo de renormalização do potencial é necessária quando queremos quantizar um problema que apresenta dissipação através da interação da partícula de interesse com um meio dissipativo representado por um conjunto de osciladores harmônicos; a presença da dissipação faz com que a transmissão de uma partícula através de uma barreira dissipativa seja inferior à transmissão da mesma por uma barreira sem dissipação; o método proposto por Bruinsma e Bak só é válido no limite de  $\Omega\tau_0 \ll 1$  e o limite de interesse do problema dissipativo é  $\Omega\tau_0 \gg 1$ ; o problema da transmissão por uma barreira dissipativa ainda está em aberto e talvez possa ser resolvido evitando-se apenas a aproximação em primeira ordem utilizada neste trabalho.

## Apêndice A

Estamos interessados no cálculo da integral

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{Q}_0 d\vec{Q}'_0 d\vec{Q}_f \rho(\vec{Q}_0, \vec{Q}'_0) K_{e_j}^{t_1}(\vec{Q}_f, +\infty, \vec{Q}_0, -\infty) \dots$$

$$\dots K_{e_j}^{t_2}(\vec{Q}_f, +\infty, \vec{Q}'_0, -\infty)$$

que aparece na expressão (2.32). Todas as constantes que aparecem multiplicando o resultado desta integral podem ser incluídas no fator de normalização  $N$  da expressão (2.32) e portanto não serão incluídas neste desenvolvimento.

Para um conjunto de osciladores em equilíbrio termodinâmico temos (17,24)

$$\rho(\vec{Q}_0, \vec{Q}'_0) = \prod_k \exp \left\{ \frac{-m_k \omega_k}{2\hbar \sinh(\beta \hbar \omega_k)} \left[ (q_{k0}^2 + q_{k0}'^2) \cosh(\beta \hbar \omega_k) - 2q_{k0} q_{k0}' \right] \right\}$$

onde  $\beta = (k_B T)^{-1}$  sendo  $T$  a temperatura de equilíbrio. A expressão para o propagador do conjunto de oscilador é o produto dos propagadores dados por (2.31). Temos portanto que a integral  $I$  pode ser escrita como um produto de integrais, uma para cada oscilador "k" do banho,  $I = \prod_k I_k$ . Omitindo o índice  $k$  das coordenadas, massas e freqüências de cada um dos osciladores,

$$I_k = \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 dq'_0 dq_f \exp \left\{ \frac{-m\omega}{2\hbar \sinh(\beta \hbar \omega)} \left[ (q_0^2 + q_0'^2) \cosh(\beta \hbar \omega) - 2q_0 q_0' \right] + \right.$$

$$\left. + i \frac{m\omega}{2\hbar \sin(\omega \Delta t)} \left[ \cos(\omega \Delta t) (q_f^2 + q_0^2) - 2q_f q_0 + \right. \right.$$

$$\left. + \frac{2Cq_f}{m\omega} \int_{t_0}^{t_f} dt Q_{t_1}(t) \sin[\omega(t - t_0)] + \frac{2Cq_0}{m\omega} \int_{t_0}^{t_f} dt Q_{t_1}(t) \sin[\omega(t_f - t)] + \right.$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{2C^2}{m^2\omega^2} \int_{t_0}^{t_f} dt \int_{t_0}^t ds Q_{i_1}(t) Q_{i_1}(s) \text{sen}[\omega(t_f - t)] \text{sen}[\omega(s - t_0)] \Big] + \\
& -i \frac{m\omega}{2\hbar \text{sen}(\omega\Delta t)} \left[ \cos(\omega\Delta t)(q_f^2 + q_0'^2) - 2q_f q_0' + \right. \\
& + \frac{2Cq_f}{m\omega} \int_{t_0}^{t_f} dt Q_{i_2}^*(t) \text{sen}[\omega(t - t_0)] + \frac{2Cq_0'}{m\omega} \int_{t_0}^{t_f} dt Q_{i_2}^*(t) \text{sen}[\omega(t_f - t)] + \\
& \left. - \frac{2C^2}{m^2\omega^2} \int_{t_0}^{t_f} dt \int_{t_0}^t ds Q_{i_2}^*(t) Q_{i_2}^*(s) \text{sen}[\omega(t_f - t)] \text{sen}[\omega(s - t_0)] \right] \Big\}
\end{aligned}$$

onde, uma vez resolvida a integral, devemos tomar o limite de  $t_f \rightarrow +\infty$  e  $t_0 \rightarrow -\infty$

Vamos fazer a seguinte mudança de variáveis:

$$q_0 = x + \frac{y}{2} \quad \text{e} \quad q_0' = x - \frac{y}{2},$$

cujo Jacobiano é unitário. Se omitimos o índice  $f$  de  $q_f$  podemos reescrever

$$\begin{aligned}
I_k = \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dq \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar \text{senh}(\beta\hbar\omega)} \left[ \cosh(\beta\hbar\omega) \left( 2x^2 + \frac{y^2}{2} \right) + \right. \right. \\
\left. \left. - 2 \left( x^2 - \frac{y^2}{4} \right) \right] + \frac{i m \omega}{2\hbar \text{sen}(\omega\Delta t)} \left[ \cos(\omega\Delta t) 2xy - 2qy + \right. \right. \\
\left. \left. + \frac{2Cq}{m\omega} \int_{t_0}^{t_f} dt |Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)| \text{sen}[\omega(t - t_0)] + \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2C}{m\omega} \left( x + \frac{y}{2} \right) \int_{t_0}^{t_f} dt Q_{i_1}(t) \text{sen}[\omega(t_f - t)] + \\
& - \frac{2C}{m\omega} \left( x - \frac{y}{2} \right) \int_{t_0}^{t_i} dt Q_{i_2}^*(t) \text{sen}[\omega(t_f - t)] + \\
& - \frac{2C^2}{m^2\omega^2} \int_{t_0}^{t_f} dt \int_{t_0}^t ds [Q_{i_1}(t)Q_{i_1}(s) + \\
& - Q_{i_2}^*(t)Q_{i_2}^*(s)] \text{sen}[\omega(t_f - t)] \text{sen}[\omega(s - t_0)] \Big] \Big\}
\end{aligned}$$

Fazemos primeiramente a integral em  $q$ , ela nos fornece uma  $\delta(y - \Gamma)$  onde

$$\Gamma = \frac{C}{m\omega} \int_{t_0}^{t_f} dt [Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)] \text{sen}[\omega(t - t_0)].$$

Podemos fazer automaticamente a integral em  $y$  e nos resta então:

$$\begin{aligned}
I_k = \exp \left\{ \frac{-m\omega}{2\hbar \text{senh}(\beta\hbar\omega)} \frac{\Gamma^2}{2} \left[ \cosh(\beta\hbar\omega) + 1 \right] + \right. \\
+ i \frac{m\omega}{2\hbar \text{sen}(\omega\Delta t)} \left[ \frac{C}{m\omega} \Gamma \int_{t_0}^{t_f} dt [Q_{i_1}(t) + Q_{i_2}^*(t)] \text{sen}[\omega(t_f - t)] + \right. \\
- \frac{2C^2}{m^2\omega^2} \int_{t_0}^{t_f} dt \int_{t_0}^t ds [Q_{i_1}(t)Q_{i_1}(s) - Q_{i_2}^*(t)Q_{i_2}^*(s)] \dots \\
\left. \left. \text{sen}[\omega(t_f - t)] \text{sen}[\omega(s - t_0)] \right] \right\} \dots
\end{aligned}$$

$$\dots \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ \frac{-m\omega}{2\hbar \operatorname{senh}(\beta\hbar\omega)} [\cosh(\beta\hbar\omega) - 1] 2x^2 + \right. \\ \left. + i \frac{m\omega}{\hbar \operatorname{sen}(\omega\Delta t)} \left[ \Gamma \cos(\omega\Delta t) + \frac{C}{m\omega} \int_{t_0}^{t_f} dt [Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)] \operatorname{sen}[\omega(t_f - t)] \right] x \right\}$$

Podemos agora integrar diretamente  $x$  e substituir posteriormente a expressão de  $\Gamma$ .

Usando a relação

$$\int_{t_0}^{t_f} dt \int_{t_0}^{t_f} ds f(t, s) = \int_{t_0}^{t_f} dt \int_{t_0}^t ds [f(t, s) + f(s, t)]$$

e as relações conhecidas para as funções trigonométricas e hiperbólicas obtemos finalmente:

$$I_k = \exp \left\{ \frac{-C^2}{2\hbar m\omega} \operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t ds [Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)] [Q_{i_1}(s) + \right. \\ \left. - Q_{i_2}^*(s)] \cos[\omega(t - s)] + \right. \\ \left. + i \frac{C^2}{2\hbar m\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t ds [Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)] [Q_{i_1}(s) + Q_{i_2}^*(s)] \operatorname{sen}[\omega(t - s)] \right\}.$$

A integral total  $I$  é então o produto das exponenciais dos osciladores e escrevemos finalmente

$$I = \exp \left\{ \sum_k \frac{C_k^2}{2\hbar m_k \omega_k} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t ds \left[ i [Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)] [Q_{i_1}(s) + \right. \right. \\ \left. \left. + Q_{i_2}^*(s)] \operatorname{sen}[\omega_k(t - s)] + \right. \right. \\ \left. \left. - \operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta\hbar\omega_k}{2} \right) [Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)] [Q_{i_1}(s) - Q_{i_2}^*(s)] \cos[\omega_k(t - s)] \right] \right\}$$

como aparece na expressão (2.34).

## Apêndice B

Temos a integral

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t ds \left\{ i[Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)][Q_{i_1}(s) + Q_{i_2}^*(s)] \operatorname{sen}[\omega(t-s)] + \right. \\ \left. - \operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) [Q_{i_1}(t) - Q_{i_2}^*(t)][Q_{i_1}(s) - Q_{i_2}^*(s)] \cos[\omega(t-s)] \right\}$$

onde  $Q_{i_1}(t)$  é dado por (2.20), a saber

$$Q_{i_1}(t) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dv g(v) e^{-iv(t-t')}.$$

Substituindo,

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t ds \int_{-\infty}^{\infty} dv du g(v)g(u) \left\{ -i [e^{-iv(t-t_1)} + \right. \\ \left. + e^{iv(t-t_2)}] [e^{-iu(s-t_1)} - e^{iu(s-t_2)}] \operatorname{sen}[\omega(t-s)] + \right. \\ \left. + \operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) [e^{-iv(t-t_1)} + e^{iv(t-t_2)}] [e^{-iu(t-t_1)} + \right. \\ \left. + e^{iu(t-t_2)}] \cos [\omega(t-s)] \right\}.$$

Fazendo a mudança de variável  $t'=t-s$ , reescrevemos

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dv du g(v)g(u) \dots \\
&\dots \left\{ -i \operatorname{sen}(\omega t') \left[ e^{i(v+u)t} e^{i(v+u)t_1} e^{iut'} + \right. \right. \\
&\quad - e^{-i(v-u)t} e^{iut_1} e^{-iut_2} e^{-iut'} + e^{i(v-u)t} e^{-iut_2} e^{iut_1} e^{iut'} + \\
&\quad \left. \left. - e^{i(v+u)t} e^{-i(v+u)t_2} e^{-iut'} \right] + \operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) \cos(\omega t') \dots \right. \\
&\quad \dots \left[ e^{-i(v+u)t} e^{i(v+u)t_1} e^{iut'} + e^{-i(v-u)t} e^{iut_1} e^{-iut_2} e^{-iut'} + \right. \\
&\quad \left. \left. + e^{i(v-u)t} e^{-iut_2} e^{iut_1} e^{iut'} + e^{i(v+u)t} e^{-i(v+u)t_2} e^{-iut'} \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Podemos integrar em  $t$  obtendo  $2\pi\delta(v \pm u)$  e depois integrar em  $v$ .  
Obtemos

$$\begin{aligned}
I &= -\pi \int_0^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} du \left[ -g(u)g(-u) + g^2(u)e^{iu(t_1-t_2)} \right] \left[ e^{iut'} + \right. \\
&\quad \left. - e^{-iut'} \right] \left[ e^{i\omega t'} - e^{-i\omega t'} \right] + \\
&\quad -\operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) \left[ g(u)g(-u) + g^2(u)e^{iu(t_1-t_2)} \right] \left[ e^{iut'} + e^{-iut'} \right] \left[ e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'} \right].
\end{aligned}$$

Novamente integramos em  $t'$  obtendo  $2\pi\delta(u \pm \omega)$  e posteriormente em  $u$ .  
O resultado é

$$I = 2\pi^2 \left\{ \left[ g^2(\omega)e^{i\omega(t_1-t_2)} - g^2(-\omega)e^{-i\omega(t_1-t_2)} \right] + \right.$$

$$+\operatorname{cotgh}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\left[g^2(\omega)e^{i\omega(t_1-t_2)}+2g(\omega)g(-\omega)+g^2(-\omega)e^{-i\omega(t_1-t_2)}\right]\} ]$$

Queremos reescrever a seguinte expressão:

$$\sum_k \frac{C_k^2}{2\hbar m_k \omega_k} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t ds \left\{ i|Q_{t_1}(t) - Q_{t_2}^*(t)| |Q_{t_1}(s) + Q_{t_2}^*(s)| \operatorname{sen}[\omega_k(t-s)] + \right. \\ \left. -\operatorname{cotgh}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) |Q_{t_1}(t) - Q_{t_2}^*(t)| |Q_{t_1}(s) - Q_{t_2}^*(s)| \cos[\omega_k(t-s)] \right\}.$$

Se usamos a função espectral  $J(\omega)$  como definida em (2.35)

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

e também o resultado encontrado acima para a integral, obtemos que a expressão desejada pode ser escrita como

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) I = \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^{\infty} d\omega \left\{ |g^2(\omega)e^{i\omega(t_1-t_2)} - g^2(-\omega)e^{-i\omega(t_1-t_2)}| + \right. \\ \left. +\operatorname{cotgh}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) [g^2(\omega)e^{i\omega(t_1-t_2)} + 2g(\omega)g(-\omega) + g^2(-\omega)e^{-i\omega(t_1-t_2)}] \right\}$$

Finalmente o que queremos é calcular:

$$P_{E,E'} = T_E N \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 e^{i(E'-E)(t_1-t_2)} \dots$$

$$\dots \exp \left\{ \sum_k \frac{C_k}{2\hbar m_k \omega_k} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t ds \left\{ i[Q_{t_1}(t) - Q_{t_2}^*(t)][Q_{t_1}(s) + \right. \right. \\ \left. \left. + Q_{t_2}^*(s)] \operatorname{sen}[\omega_k(t-s)] + \right. \right. \\ \left. \left. - \operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) |Q_{t_1}(t) - Q_{t_2}^*(t)| |Q_{t_1}(s) - Q_{t_2}^*(s)| \cos[\omega_k(t-s)] \right\} \right\}$$

Se fizermos ainda a mudança de variáveis

$$t = t_1 - t_2 \quad e \quad t' = \frac{t_1 + t_2}{2},$$

$$P_{E,E'} = T_E \Delta t' N \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t} \exp \left\{ \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \left\{ |g^2(\omega) e^{i\omega t} + \right. \right. \\ \left. \left. - g^2(-\omega) e^{-i\omega t} \right\} + \operatorname{cotgh} \left( \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) [g^2(\omega) e^{i\omega t} + 2g(\omega)g(-\omega) + g^2(-\omega) e^{-i\omega t}] \right\}$$

onde  $\Delta t'$  veio da integral em  $dt'$ . Dividindo por  $\Delta t'$  obtemos a probabilidade por unidade de tempo que é dada por (2.36).

## Apêndice C

Temos que

$$\begin{aligned} \tau &= \int_0^{\ell} dq \frac{m}{\sqrt{2m\eta' \Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2}} = \\ &= \frac{m}{\sqrt{2m\eta' \Omega}} \ln \left( \frac{\sqrt{2m\eta' \Omega \ell^2 + \hbar^2 k_0^2} + \sqrt{2m\eta' \Omega \ell^2}}{\hbar k_0} \right) \end{aligned}$$

e estamos interessados no cálculo da integral

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{\ell} dq \frac{m\omega q}{\sqrt{2m\eta' \Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2}} \dots \\ \dots \exp \left\{ \frac{m\omega}{\sqrt{2m\eta' \Omega}} \ln \left( \frac{\sqrt{2m\eta' \Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2} + \sqrt{2m\eta' \Omega q^2}}{\hbar k_0} \right) \right\} \end{aligned}$$

pois temos, de acordo com (3.25), que

$$g(\omega) = \frac{e^{-\omega\tau}}{2\pi\omega} I.$$

Vamos resolver inicialmente a integral indefinida. Utilizando o método de integração por partes vamos fazer primeiramente

$$u = q$$

e

$$dv = \frac{m\omega dq}{\sqrt{2m\eta' \Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2}} \dots$$

$$\dots \exp \left\{ \frac{m\omega}{\sqrt{2m\eta'\Omega}} \ln \left( \frac{\sqrt{2m\eta'\Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2} + \sqrt{2m\eta'\Omega q^2}}{\hbar k_0} \right) \right\}$$

Se chamamos

$$f(q) = \exp \left\{ \frac{m\omega}{\sqrt{2m\eta'\Omega}} \ln \left( \frac{\sqrt{2m\eta'\Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2} + \sqrt{2m\eta'\Omega q^2}}{\hbar k_0} \right) \right\},$$

temos que

$$I = qf(q) - \int dq' f(q').$$

Ainda utilizando o método de integração por partes, fazemos agora

$$u = f(q)$$

e

$$dv = \frac{m\omega q dq}{\sqrt{2m\eta'\Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2}}.$$

Obtemos

$$I = \frac{m\omega}{2m\eta'\Omega} \left[ \sqrt{2m\eta'\Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2} f(q) - m\omega \int dq' f(q') \right].$$

Podemos igualar as duas identidades para I,

$$\begin{aligned} qf(q) - \int dq' f(q') &= \\ &= \frac{m\omega}{2m\eta'\Omega} \left[ \sqrt{2m\eta'\Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2} f(q) - m\omega \int dq' f(q') \right] \end{aligned}$$

e calcular

$$\int dq' f(q') = \frac{2\eta' \Omega q - \omega \sqrt{2m\eta' \Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2}}{2\eta' \Omega - m\omega^2} f(q).$$

Substituindo novamente em qualquer uma das expressões para I,

$$I = \frac{m\omega^2 q - \omega \sqrt{2m\eta' \Omega q^2 + \hbar^2 k_0^2}}{m\omega^2 - 2\eta' \Omega} f(q)$$

Os limites de integração são  $q = 0$  e  $q = \ell$ . No caso de  $q=0$  temos  $f(0)=1$  e para  $q = \ell$  temos  $f(\ell) = \exp\{\omega\tau\}$ . Assim

$$I = \left[ \frac{(m\omega^2 \ell - \omega \sqrt{2m\eta' \Omega \ell^2 + \hbar^2 k_0^2}) e^{\omega\tau} + \omega \hbar k_0}{m\omega^2 - 2\eta' \Omega} \right].$$

Finalmente escrevemos

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{m\omega\ell - \sqrt{2m\eta' \Omega \ell^2 + \hbar^2 k_0^2} + \hbar k_0 e^{-\omega\tau}}{m\omega^2 - 2\eta' \Omega} \right]$$

que é a expressão (3.26) desejada.

## Referências

1. E.U. Condon, "Quantum Mechanics of Collision Processes", *Rev. Mod. Phys.* **3**, 43 (1931).
2. L.A. MacColl, "Note on the Transmission And Reflection of Wave Packets by Potencial Barriers", *Phys. Rev.* **40**, 621 (1932).
3. N.W. Ashcroft e N.D. Mermin, "Solid State Physics", Holt, Nova Iorque (1976).
4. B.D. Josephson, "Possible New Effects in Superconductive Tunneling", *Phys. Lett.* **1**, 251 (1962)  
B.D. Josephson, "Supercurrents Through Barriers", *Advan. Phys.* **14**, 419 (1965).
5. R.P. Feynman e F.L. Vernon, "The Theory of a General Quantum System Interacting With a Linear Dissipative System", *Ann. Phys.* **24**, 118 (1963).
6. A.O. Caldeira e A.J. Leggett, "Quantum Tunneling in a Dissipative System", *Ann. Phys.* **149**, 374 (1983).
7. E.Kanai, "On The Quantization of the Dissipative Systems", *Prog. Theor. Phys.* **3**, 440 (1948),  
E.Nelson, "Derivation of the Schrödinger Equation from Newtonian Mechanics", *Phys. Rev.* **150**, 1079 (1966).  
M.D. Kostin, "On The Schrödinger - Langevin Equation", *J. Chem. Phys.* **57**, 3589 (1972).  
H. Dekker, "Quantization of the Linearly Damped Harmonic Oscillator", *Phys. Rev. A* **16**, 2126 (1977).  
K. Yasue, "Quantum Mechanics of Nonconservative Systems", *Ann. Phys.* **114**, 479 (1978).
8. I.R. Senitzky, "Dissipation in Quantum Mechanics: The Harmonic Oscillator", *Phys. Rev.* **119**, 670 (1960).
9. Ver, por exemplo, volume II, complemento AXIII  
C. Cohen Tannoudji et.al., "Mechanique Quantique", Herman, Paris (1977).

10. A.O. Caldeira e A.J. Leggett, "Path Integral Approach to Quantum Brownian Motion", *Physica* **121A**, 587 (1983).
11. A.O. Caldeira, "Macroscopic Quantum Tunneling and Related Topics",  
D. Phil. Thesis, Univ. of Sussex (1980) - não publicada.
12. A.O. Caldeira, "Interference and Coherent Tunneling in Dissipative Quantum Systems", *Helv. Phys. Acta.* **61**, 611 (1988).
13. Nelson Wax, "Selected Paper on Noise And Stochastic Process",  
Dover, Nova Iorque (1954).
14. R. Bruinsma e P. Bak, "Quantum Tunneling, Dissipation and Fluctuations", *Phys. Rev. Lett.* **56**, 420 (1986).
15. Ver por exemplo,  
E. Merzbacher, "Quantum Mechanics", John Wiley and Sons, Nova Iorque (1970).
16. M. Büttiker e R. Landauer, "Traversal Time for Tunneling", *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1739 (1982).
17. R.P. Feynman e A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integral", McGraw-Hill, Nova Iorque (1965).
18. E.W. Ford et.al, "Statistical Mechanics of Assemblies of Coupled Oscilators", *J. Math. Phys.* **6**, 504 (1965).
19. V. Hakim e V. Ambegaokar, "Quantum Theory of a Free Particle Interacting with a Linearly Dissipative Environment", *Phys. Rev.* **A32**, 423 (1985).
20. Ver seção 2.476  
I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik, "Table of Integral Series and Products", Academic Press, Nova Iorque (1981) - 2ª edição.
21. Ver seção 8.2 da referência anterior.
22. Ver capítulo 5  
M. Abramowitz e I.A. Steguim, "Handbook of Mathematical Functions" Dover, Nova Iorque (1965).

23. Ver por exemplo

G. Baym, "Lectures on Quantum Mechanics", Benjamin, Massachusetts (1969).

24. R.P. Feynman, "Statistical Mechanics: A Set of Lectures", Benjamin, Nova Iorque (1972).