

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ABORDAGEM VIA INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA DO  
PROCESSO DE TROCA E DISSIPACÃO DE ENERGIA NUM  
SISTEMA COMPOSTO POR DOIS OSCILADORES  
HARMÔNICOS DISSIPATIVOS ACOPLADOS - O MODELO  
DUPLICADO DE CALDEIRA & LEGGETT

Alexandre Cacheffo

Orientador: Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-  
Graduação em Física como parte dos requisitos  
para a obtenção do título de Mestre em Física

São Carlos - 2005

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da  
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

C119av

Cacheffo, Alexandre.

Abordagem via integrais de trajetória do processo de troca e dissipação de energia num sistema composto por dois osciladores harmônicos dissipativos acoplados – o modelo duplicado de Caldeira & Leggett / Alexandre Cacheffo. -- São Carlos : UFSCar, 2005.

99 p.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2005.

1. Mecânica quântica. 2. Dissipação de energia. 3. Decoerência (decoherence). 4. Integrais de trajetória. 5. Óptica quântica.I. Título.

CDD: 530.12 (20<sup>a</sup>)

*“Por mais que na batalha se vença a um ou mais inimigos, a vitória sobre si mesmo é a maior de todas as vitórias.”*

*Siddharta Gautama (563-483 a.C.)*

*“Dedico este trabalho aos meus pais Admir e Esmeralda que tanto lutaram para que eu pudesse estudar e às minhas irmãs Walkíria e Patrícia.”*

# Agradecimentos

É difícil falar em agradecimentos nesse momento, pois foram muitas as pessoas envolvidas em minha vida nesse período e seria muito injusto se eu esquecesse o nome de alguém. Assim, peço perdão antecipadamente àqueles que por ventura eu esquecer de citar aqui.

Gostaria de agradecer, primeiro, Àquele que espero compreender quem seja um dia: Deus, que de uma forma ou de outra está sempre presente em minha vida, ora me enchendo de alegria, ora de tristeza, mas sempre me fazendo ver que a vida é maravilhosa, mesmo tendo seus momentos altos e baixos.

Também quero agradecer a meus pais, Admir e Esmeralda, que desde o começo de minha vida não mediram esforços para que eu tivesse sempre o melhor em tudo, às minhas irmãs, Walkíria e Patrícia que sempre estão ao meu lado e aos demais familiares. A eles o meu mais profundo agradecimento.

Ainda agradeço aos grandes amigos, que hoje considero como irmãos, Rodrigo Garcia Amorim e Hélio Tsuzuki, que me ensinaram muitas coisas boas sobre a vida. Apesar de termos convivido tão pouco tempo, parece que é como se nos conhecêssemos a vida inteira. Ao Rodrigo, um agradecimento especial, por ter me acolhido quando mudei de casa, pela convivência nas “festas da vida”, em São Carlos, por ter me ajudado com algumas figuras dessa dissertação e por todo o resto. Também ao Hélio, que está sempre me ajudando com todos os problemas que aparecem.

Quero agradecer, ainda, ao meu orientador Miled, que me confiou uma tarefa tão árdua, mas tão honrada e que me proporcionou um grande salto, tanto

na vida profissional, quanto na pessoal. Agradeço pela paciência que teve quando eu estava passando por momentos difíceis nesse trabalho, por toda a orientação dispensada e também pela amizade.

Não posso deixar de citar aqui os nomes de muitos amigos que sei que sempre posso contar com eles. Um desses é Lucival R. Volpe, que desde quando vim para São Carlos, sempre me deu a maior força. Agradeço a ele pelas inumeráveis “caronas” para Ribeirão dos Índios, pelas conversas na pizzaria e por todo o resto. Ainda tem os vários amigos da UFSCar e de outras instituições: Rita de Cássia M. T. Oliveira, Denilson S. Borges, Fabiano O. Prado, Ricardo L. Rodrigues (Prancha), Eduardo I. Duzzioni, Roberto M. Serra, Liliana Sanz, Rômulo R. Moraes, Vívian V. França, Alexandre Dodonov, Ariano De Giovanni Rodrigues, Mickel A. Ponte, Alexandre C. Yoshida, Patrícia C. Venturini, Mirian R. Joya, William F. Silva, Marcelo Gamba, Lucas C. Céleri, Gustavo E. Arruda, Wellington Galléas, Mario Kapp, Juliana S. Nunes, Paulo Sérgio S. Jr., Ailton M. Watanabe, Alan B. Pavan, Fábio H. M. Cavalcante, Luciano Fabrício D. Pereira, Luis Juracy R. Lemos, Leonélio Chiquetto Jr., Alan Gualberto (Parasita), Antonio H. A. Pereira, Elton M. S. Santos, Anderson A. Ferreira, Eduardo J. Miola, Marcos D. Manfrinato, Marcelo Miki Mine, Marcos V. Alves, Gilberto Prataviera, Andrei J. Merlin, Hércules C. N. Filho, Maria das Graças R. Martins, Gisele M. Cecato, o pessoal da república “La Vida Loca”, a Dona Rosa (in memoriam), o vizinho e querido amigo Bráulio A. Ferreira, que sempre aparece com um doce ou uma garrafa de vinho, para alegrar o dia, e a todos aqueles que eu esqueci de citar aqui, mas que estão em meu coração.

Quero agradecer, ainda a todos os professores e funcionários do Departamento de Física da UFSCar, citando alguns: Terezinha Gagliardi da BSF, Prof. Salomon S. Mizhari, Prof. Márcio Martins, Prof. César Constantino, Prof. Sylvio Dionysio de Souza, Profa. Maristela O. M. D. de Souza, Prof. Paulo Daniel Emmel, Prof. Paulo Sérgio Pisani, Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Boas, que me proporcionaram a formação (intelectual e moral) necessária não apenas para

a conclusão desta dissertação, mas para toda a vida e também pela amizade de muitos deles. Agradeço, ainda, aos membros da Banca Examinadora (Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Boas e Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano), por terem aceitado o convite.

Finalmente, quero agradecer a todas aquelas pessoas cujos nomes não citei, mas que contribuíram de alguma forma para este trabalho e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq, pela concessão da Bolsa de Mestrado no País.

# Resumo

Tratamos, neste trabalho, os processos de troca e dissipação de energia num sistema composto por dois osciladores harmônicos cada qual associado a um reservatório térmico.

Para isso, empregamos a abordagem de Caldeira & Leggett, baseada na formulação de integrais de trajetória, para a obtenção da evolução temporal do operador densidade reduzido do sistema composto por ambos os osciladores.



# Abstract

In this work, we analyse the dissipation and interchange of energy in a system composed by two harmonic oscillators, each one associated with a thermal reservoir.

To this end, we employ the Caldeira & Leggett approach, based on path integral formulation, to obtain the time evolution of the reduced density operator of the system composed by both oscillators.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução.</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>O Modelo de Caldeira &amp; Leggett</b>	<b>16</b>
2.1	A Equação de Langevin e o Movimento Browniano. . . . .	16
2.2	A Formulação Clássica e a obtenção da Equação de Langevin. . .	18
2.3	A Formulação Quântica e o cálculo do Superpropagador do Sistema.	24
2.4	O Limite de Altas Temperaturas e a Obtenção da Equação Mestra para o Operador Densidade Reduzido do Sistema. . . . .	30
2.5	Decoerência e Dissipação de Energia no Modelo de Caldeira & Leggett. . . . .	35
2.5.1	Decoerência. . . . .	35
2.5.2	O Processo de Dissipação de Energia. . . . .	40
<b>3</b>	<b>O Modelo Duplicado de Caldeira &amp; Leggett.</b>	<b>44</b>
3.1	Obtenção da Equação Mestra para Dois Osciladores Harmônicos Dissipativos Interagentes. . . . .	44
3.1.1	Formulação Clássica . . . . .	44
3.1.2	Formulação Quântica . . . . .	46
3.2	O Processo de Dissipação de Energia no Modelo Duplicado de Caldeira & Leggett. . . . .	55
<b>4</b>	<b>Conclusões</b>	<b>78</b>

<i>SUMÁRIO</i>	9
<b>A Cálculo do Funcional de Influência</b>	<b>80</b>
<b>B Cálculo do Superpropagador do Sistema</b>	<b>87</b>
<b>C Integrações do Modelo Duplicado</b>	<b>92</b>
Referências Bibliográficas . . . . .	96

# Lista de Figuras

2.1	Oscilador Harmônico Dissipativo. . . . .	19
2.2	Superposição de gaussianas . . . . .	36
2.3	Matriz densidade reduzida (2.83) . . . . .	37
2.4	Vista “por cima” da matriz densidade reduzida (2.83) . . . . .	39
2.5	Matriz densidade reduzida (2.83) após o tempo de decoerência. . .	40
2.6	Energia do Sistema de Interesse para $q_0 = 10$ . . . . .	43
3.1	Modelo Duplicado de Caldeira & Leggett. . . . .	45
3.2	Energias para $q = 10$ . . . . .	62
3.3	Energias para $q = 10$ e $\tilde{\xi} = 10^{-3}$ . . . . .	63
3.4	Energias para $q = 10$ e $\tilde{\xi} = 10^{-2}$ . . . . .	64
3.5	Energias para $q = 10$ e $\tilde{\lambda} = 10^{-3}$ . . . . .	65
3.6	Energias para $q = 10$ e $\tilde{\lambda} = 10^{-2}$ . . . . .	66
3.7	Energias para $q = 10$ e $\tilde{\chi} = 10^{-3}$ . . . . .	67
3.8	Energias para $q = 10$ e $\tilde{\chi} = 10^{-2}$ . . . . .	68
3.9	Energias para $q = 10$ e $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = 10^{-3}$ . . . . .	69
3.10	Energias para $q = 10$ , $\tilde{\xi} = 10^{-2}$ e $\tilde{\lambda} = 10^{-3}$ . . . . .	70
3.11	Energias para $q = 10$ , $\tilde{\xi} = 10^{-3}$ e $\tilde{\lambda} = 10^{-2}$ . . . . .	71
3.12	Energias para $q = 10$ e $\tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 10^{-3}$ . . . . .	72
3.13	Energias para $q = 10$ , $\tilde{\chi} = 10^{-2}$ e $\tilde{\delta} = 10^{-3}$ . . . . .	73
3.14	Energias para $q = 10$ , $\tilde{\chi} = 10^{-3}$ e $\tilde{\delta} = 10^{-2}$ . . . . .	74
3.15	Energias para $q = 10$ , $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 10^{-3}$ . . . . .	75

3.16	Energias para $q = 10$ , $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 10^{-2}$ . . . . .	76
3.17	Energias para $q = 10$ , $\tilde{\xi} = \tilde{\chi} = 10^{-2}$ e $\tilde{\lambda} = \tilde{\delta} = 10^{-3}$ . . . . .	77

# Capítulo 1

## Introdução.

A física dos sistemas quânticos abertos é alvo de renovada atenção desde o surgimento da mecânica quântica e das dificuldades inerentes à teoria em explicar os processos de medida e de transição da dinâmica micro para a macroscópica. A princípio, responsabilizava-se essencialmente o aparato de medida quântico pelo colapso da função de onda. É sintomático que na maioria dos livros-texto o “postulado da projeção” seja tratado (de forma quase que metafísica), como um dos axiomas da teoria [1]. Na segunda metade do século XX o aparato de medida foi substituído pela noção mais geral de meio ambiente. Em paralelo ao grande desenvolvimento da teoria quântica, décadas foram dispensadas ao tratamento de sistemas quânticos abertos em que o meio ambiente passou a ser modelado como um conjunto de osciladores harmônicos independentes. Apenas por volta de 1980 é que resultados seminais, acerca do processo de decoerência de estados quânticos [2, 3], levaram a uma compreensão mais detalhada do processo de medida e da transição da dinâmica micro para a macroscópica (para além do que fizera o experimento de pensamento conhecido como “O paradoxo do gato de Schrödinger” [4]). Contudo, os resultados obtidos em [2, 3] explicam apenas parcialmente os processos de medida e da transição da dinâmica micro para a macroscópica, dado que, afinal, concentram-se especificamente no processo de decoerência de estados quântico. A dinâmica do colapso da função de onda,

aparentemente um processo estocástico, é ainda um problema a ser resolvido apesar de resultados recentes importantes [5]. Neste trabalho, pretendemos, primeiramente, revisitar o modelo de Caldeira & Leggett [3,6,7] que trata o processo de dissipação de energia de um oscilador harmônico através do formalismo de integrais de trajetória. Este modelo logrou uma compreensão detalhada do processo de dissipação de energia de sistemas massivos, uma vez que as expressões por ele fornecidas abarcam apenas variáveis fenomenológicas e possibilitam, portanto, confirmações experimentais. Através deste modelo pôde-se estimar a influência da dissipação no tunelamento quântico em sistemas macroscópicos e, pela primeira vez, o tempo de decoerência de um estado de superposição associado a uma partícula massiva. Em seguida, devemos tratar o que denominamos o modelo duplicado de Caldeira & Leggett, que consiste em dois osciladores harmônicos dissipativos acoplados entre si. Devemos associar a cada oscilador um reservatório térmico modelado por um grande número de osciladores harmônicos independentes. À semelhança da abordagem original de Caldeira & Leggett, utilizamos o formalismo de integrais de trajetória para a obtenção da evolução temporal do operador densidade reduzido do sistema composto por ambos os osciladores. O objetivo deste tratamento reside no crescente interesse por processos de coerência e decoerência em sistemas quânticos interagentes, como em redes ópticas [8] ou de osciladores harmônicos. Afinal, se a investigação de sistemas quânticos abertos voltava-se basicamente para a compreensão dos processos de medida e de transição da dinâmica micro para a macroscópica, recentemente este enfoque tem sido radicalmente alterado pelo advento da Teoria da Informação Quântica. A descoberta de P. Shor [9], de que estados de superposição, utilizados como bits quânticos, podem ser empregados para a geração de algoritmos quânticos que permitem a fatoração de um número inteiro com  $N$  dígitos num intervalo de tempo (ou número de passos ou de operações lógicas) que cresce na escala polinomial  $O(N^3)$  (ao invés da superpolinomial  $\exp[N^{1/2}(\log N)^{2/3}]$  dos processadores lógicos convencionais), imprimiu novas expectativas à investigação dos processos

fundamentais da mecânica quântica. Uma compreensão detalhada do processo de decoerência é agora fundamental para se estimar a fidelidade de processos lógicos quânticos. Por fidelidade compreende-se o “overlap” entre os estados resultantes de uma interação quântica nos casos ideal - em que o meio ambiente é desconsiderado - e real - em que flutuações fazem-se presentes [10]. Portanto, com a Teoria da informação Quântica, os fenômenos antes associados, numa perspectiva puramente teórica, à fundamentação da mecânica quântica, constituem as condições de possibilidade de uma nova tecnologia centrada no controle de interações quânticas em nível dos constituintes fundamentais da matéria e da radiação. Para mencionar alguns dos trabalhos relacionados a sistemas acoplados, na Ref. [11] os autores descrevem uma proposta para a implementação do processo de decoerência reversível de uma superposição mesoscópica de estados do campo de radiação. Esta proposta baseia-se na possibilidade de realização de um acoplamento reversível entre duas cavidades de Fabry-Perot. Um modelo teórico para a proposta experimental apresentada em [11] é desenvolvido na Ref. [12], em que os fatores de qualidade finitos das cavidades são levados em conta para o tratamento do processo de decoerência reversível. Um sistema de duas cavidades acopladas é também apresentado na Ref. [13], em que se considera que apenas uma das cavidades encontra-se acoplada a um reservatório térmico. Em [13], no entanto, deriva-se uma equação mestra para o caso em que as cavidades encontram-se fortemente acopladas e mostra-se que neste caso as dinâmicas de relaxação das cavidades individuais são alteradas pelo acoplamento entre as cavidades. Na Ref. [14] tratou-se do processo de decoerência reversível considerando-se a situação na qual ambas as cavidades encontram-se acopladas a seus respectivos reservatórios. Tratou-se também das dinâmicas de coerência e decoerência de estados da rede nos regimes de acoplamento forte e fraco entre os osciladores. No que diz respeito à rede com um grande número de osciladores acoplados, tem-se analisado as dinâmicas de emaranhamento [15,16] e as dinâmicas de coerência e decoerência de estados [17,18], considerando-se dife-



rentes configurações das redes e diferentes interações entre os osciladores vizinhos. Em vista do cenário acima delineado, pretendemos neste trabalho fornecer uma abordagem mais abrangente do problema de dois osciladores harmônicos dissipativos acoplados. De fato, com o emprego do formalismo de integrais de trajetória, devemos obter resultados válidos além do regime de acoplamento fraco entre os osciladores e seus respectivos reservatórios. Dentro de uma perspectiva mais geral, apresentamos aqui apenas resultados relativos às dinâmicas de troca e dissipação de energia entre os osciladores. Para a finalização deste trabalho devemos analisar o processo de decoerência de estados dos osciladores em diferentes regimes de acoplamento dos mesmos. Além disso, devemos estudar a dinâmica de coerência de estados neste sistema, ou seja, o processo de transferência de estados entre os osciladores da rede e a consequente recorrência destes estados aos osciladores onde foram originalmente preparados. Pretendemos analisar os efeitos deste processo, resultante do acoplamento entre os osciladores da rede, na decoerência de estados quânticos.

# Capítulo 2

## O Modelo de Caldeira & Leggett

### 2.1 A Equação de Langevin e o Movimento Browniano.

Na Natureza, existem muitos sistemas que podem ser descritos, no regime clássico, por uma equação fenomenológica do tipo

$$M\ddot{q}(t) + \eta\dot{q}(t) + \frac{\partial V(q)}{\partial q} = F(t). \quad (2.1)$$

Um exemplo é o de uma partícula de massa  $M$  imersa em um líquido com um fator de amortecimento (coeficiente de viscosidade)  $\eta$ , sujeita à uma força viscosa proporcional à sua velocidade, a um potencial externo  $V(q)$  e a forças de caráter aleatório  $F(t)$  devidas ao impacto da partícula com as moléculas do líquido. A força  $F(t)$  tem as seguintes características

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad (2.2)$$

pois, em média, a força devida às moléculas é nula, e

$$\langle F(t)F(t') \rangle = A\delta(t - t'), \quad (2.3)$$

pois estamos considerando que os impactos sejam independentes. Tal partícula é chamada partícula Browniana e descreve o tipo de movimento que em Física é conhecido como Movimento Browniano. No caso citado, temos  $A = 2\eta k_B T$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura do sistema de interesse [19].

A equação (2.1), acompanhada das condições (2.2) e (2.3) é conhecida como equação de Langevin e está sujeita a algumas restrições quanto à descrição do movimento Browniano:

1) A massa  $M$  deve ser muito maior que a massa das moléculas do líquido em que está imersa.

2) Os tempos considerados para o estudo do comportamento da partícula devem ser suficientemente longos comparados com o tempo das colisões moleculares.

Com o avanço da Física de Supercondutores, surgiu uma gama de dispositivos que exibem efeitos quânticos em escala macroscópica, entre eles o SQUID (superconducting quantum interference device), que é um anel supercondutor fechado por um contato fraco, onde o fluxo do campo magnético é descrito por uma equação de Langevin com um potencial  $U(\phi)$  [20]. Este potencial pode ser controlado de maneira a assumir formas variadas que são próprias para a observação de diversos efeitos quânticos, entre eles, o decaimento do valor inicial do fluxo magnético  $\phi$  através de tunelamento quântico.

Sabendo da existência desses diversos dispositivos, podemos nos perguntar o seguinte: Como é possível conciliar o processo de quantização usual com equações dissipativas do tipo da de Langevin, ou seja, é possível descrever um sistema não isolado com os métodos usuais da Mecânica Quântica?

É conhecido que não existe uma Hamiltoniana  $H(p, q, t)$ , cujas equações canônicas de Hamilton reproduzam a equação de Langevin. Sendo assim, não é possível aplicar a formulação usual da quantização canônica para sistemas não isolados [20].

Para contornar esse problema, considera-se o acoplamento do sistema

de interesse a um reservatório, e então, quantiza-se o sistema conjunto dentro do esquema usual. Após esse passo, eliminam-se as variáveis do reservatório e estuda-se a dinâmica efetiva do sistema de interesse.

O que vamos fazer nos próximos passos é encontrar um sistema quântico cujo limite clássico reproduza a equação de Langevin e resolver o problema quântico no caso de interesse.

## 2.2 A Formulação Clássica e a obtenção da Equação de Langevin.

Vamos considerar um sistema conjunto (sistema de interesse  $S$  + reservatório  $R$ ) descrito pela seguinte Hamiltoniana [6, 7, 20]

$$H = H_S + H_R + H_I, \quad (2.4)$$

onde as Hamiltonianas do sistema  $S$ , do reservatório  $R$  e da interação sistema-reservatório  $I$  são dadas, respectivamente, por

$$H_S = \frac{p^2}{2M} + V_0(q), \quad (2.5)$$

$$H_R = \sum_{k=1}^N \left[ \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 q_k^2 \right] \quad (2.6)$$

e, por fim,

$$H_I = \sum_{k=1}^N C_k q q_k. \quad (2.7)$$

Note que o reservatório é modelado por um conjunto de osciladores harmônicos independentes, com coordenadas  $q_k$ , massas  $m_k$  e frequências  $\omega_k$ . As constantes  $C_k$  são as constantes de acoplamento entre o sistema e o reservatório.

Fazendo uso das equações de Hamilton, da Mecânica Clássica, podemos escrever a Lagrangeana [6, 20]

$$L = L_S + L_R + L_I, \quad (2.8)$$

onde as Lagrangeanas do sistema  $S$ , do reservatório  $R$  e da interação  $I$  são descritas, respectivamente, por

$$L_S = \frac{1}{2}M\dot{q}^2 - V_0(q), \quad (2.9)$$

$$L_R = \sum_{k=1}^N \left[ \frac{1}{2}m_k\dot{q}_k^2 - \frac{1}{2}m_k\omega_k^2 q_k^2 \right] e \quad (2.10)$$

$$L_I = - \sum_{k=1}^N C_k q q_k \quad (2.11)$$

Uma representação de um oscilador harmônico dissipativo encontra-se na figura 2.1

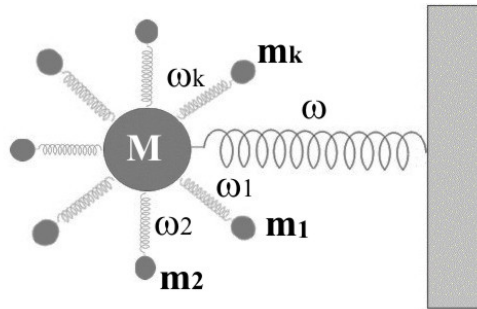


Figura 2.1: Oscilador Harmônico Dissipativo.

Vamos estudar as equações de movimento clássicas das variáveis  $q(t)$  e  $q_k(t)$ , quando o sistema está em contato com o reservatório. Fazendo uso das equações de Euler-Lagrange, chegamos às seguintes equações de movimento para

$q(t)$  e  $q_k(t)$ , respectivamente,

$$M\ddot{q}(t) + \frac{\partial V_0(q)}{\partial q} + \sum_{k=1}^N C_k q_k(t) = 0, \quad (2.12)$$

$$\ddot{q}_k(t) + \omega_k^2 + \frac{C_k}{m_k} q(t) = 0. \quad (2.13)$$

Fazendo uso de transformadas de Laplace, chegamos à seguinte equação para  $q(t)$

$$\begin{aligned} M\ddot{q}(t) + \frac{\partial V_0(q)}{\partial q} - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q(t) &= - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \frac{s^2 e^{st}}{s^2 + \omega_k^2} \tilde{q}(s) ds \\ &- \sum_{k=1}^N \frac{C_k}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} [\dot{q}_k^2(0) + s q_k(0)] \frac{e^{st}}{s^2 + \omega_k^2} ds. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Denotando

$$V(q) = V_0(q) + \Delta V, \quad (2.15)$$

com

$$\Delta V = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q^2(t), \quad (2.16)$$

temos que

$$\frac{\partial V(q)}{\partial q} = \frac{\partial V_0(q)}{\partial q} - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q(t). \quad (2.17)$$

Aqui,  $\Delta V$  é uma correção dada ao potencial do sistema de interesse devido à sua interação com o reservatório. Assim, quando acoplamos uma partícula sujeita a um potencial  $V_0(q)$  a um banho (reservatório) de osciladores harmônicos, ocorre uma renormalização do potencial por um termo  $\Delta V$ , de modo que ficamos com um potencial efetivo  $V(q)$ , dado por (2.15).

Ainda, usando o Teorema da Convolução para transformadas de Laplace, podemos escrever o primeiro termo do lado direito da equação (2.14) como

$$\sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \frac{s^2 e^{st}}{s^2 + \omega_k^2} \tilde{q}(s) ds = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{d}{dt} \int_0^t q(t') \cos[\omega_k(t-t')] dt'. \quad (2.18)$$

Cabe aqui fazer uma pequena discussão [21, 22]. A origem microscópica da dissipação, na prática, não é claramente entendida. Mas, sabe-se que, no limite clássico, o sistema evolui segundo a equação de Langevin. Assim, formulamos a Hamiltoniana (2.4) de maneira que a evolução do sistema seja dada pela equação de Langevin no limite clássico apropriado. Como estamos considerando um reservatório macroscópico, que absorve a energia do sistema de interesse, vamos considerá-lo como sendo composto por um número infinito de osciladores harmônicos. Para isto, vamos tomar o limite do contínuo nas frequências dos osciladores, através do uso da densidade espectral de modos do reservatório [3, 6, 7, 20–22, 25, 29, 30]

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k). \quad (2.19)$$

Esta quantidade contém as informações relevantes sobre as frequências dos osciladores do reservatório e do acoplamento do mesmo com o sistema e está diretamente associada ao coeficiente de dissipação  $\eta$  que aparece na equação de Langevin. Sendo assim, escolhendo  $J(\omega)$ , estamos escolhendo o tipo de dissipação que queremos estudar.

Com essa densidade espectral, podemos escrever

$$\sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \cos[\omega_k(t-t')] = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega(t-t')] d\omega. \quad (2.20)$$

A dissipação Ôhmica ou Markoviana, na qual o coeficiente de dissipação não depende das frequências dos osciladores, é descrita por uma densidade espec-

tral da forma

$$J(\omega) = \begin{cases} \eta\omega, & \text{se } \omega < \Omega \\ 0, & \text{se } \omega > \Omega \end{cases} \quad (2.21)$$

onde  $\Omega$  é uma frequência de corte (cutoff) muito maior que as frequências características do sistema. O modelo ôhmico representa um protótipo de amortecimento, e é, portanto, usado. Ele não é muito realista em sua forma estrita, porque a densidade espectral de modos diverge para altas frequências, a depender do sistema físico. Porém, sempre considera-se um cutoff  $\Omega$  que pode tomar diferentes formas ou valores [3, 6, 7, 20–22, 29, 30]. Assim, como  $J(\omega)$  deve ir a zero no limite  $\omega \rightarrow \infty$ , usamos esse cutoff, como mostrado na definição em (2.21). A escolha dessa densidade espectral de modos ôhmica é que nos levará a uma dinâmica do sistema descrita pela equação de Langevin, como mostraremos mais adiante.

Com a definição (2.21), podemos escrever

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega(t-t')] d\omega = \frac{2}{\pi} \int_0^\Omega \eta \cos[\omega(t-t')] d\omega \cong 2\eta \delta(t-t'). \quad (2.22)$$

E desse modo, a relação (2.18) transforma-se exatamente no termo dissipativo da equação de Langevin

$$\sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{d}{dt} \int_0^t q(t') \cos[\omega_k(t-t')] dt' = 2\eta \frac{d}{dt} \int_0^t q(t') \delta(t-t') dt' = \eta \dot{q}(t). \quad (2.23)$$

A equação (2.14) torna-se, então, já com o potencial efetivo

$$M\ddot{q}(t) + \frac{\partial V(q)}{\partial q} = -\eta \dot{q}(t) - \sum_{k=1}^N \frac{C_k}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} [\dot{q}_k^2(0) + s q_k(0)] \frac{e^{st}}{s^2 + \omega_k^2} ds. \quad (2.24)$$

O último termo do lado direito da equação (2.24) pode ser interpretado como a força flutuante  $F(t)$  definida em (2.2) e (2.3), que depende das condições iniciais impostas aos osciladores do reservatório. Assim, ficamos com uma equação de



Langevin

$$M\ddot{q}(t) + \eta\dot{q}(t) + \frac{\partial V(q)}{\partial q} = F(t).$$

com  $F(t)$  dada por

$$F(t) = \sum_{k=1}^N \frac{C_k}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} [\dot{q}_k^2(0) + sq_k(0)] \frac{e^{st}}{s^2 + \omega_k^2} ds. \quad (2.25)$$

Se considerarmos que o reservatório esteja em equilíbrio termodinâmico em  $t = 0$ , temos, no limite clássico, lembrando do teorema da equipartição da energia generalizado [20, 28, 29], que

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

$$\langle \dot{q}_k(0)q_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k} \delta_{k,k'} \quad e \quad \langle q_k(0)q_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k \omega_k^2} \delta_{k,k'}. \quad (2.26)$$

Com essas relações e com o uso da densidade espectral (2.21), temos, após algumas manipulações matemáticas com transformadas de Laplace, os valores médios relacionados com a força flutuante (2.25)

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad (2.27)$$

e

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 2\eta k_B T \delta(t - t'), \quad (2.28)$$

que são iguais àqueles (2.2) e (2.3). Portanto, conseguimos, até agora, introduzir um sistema conjunto ( $S+R$ ) cuja dinâmica clássica de  $S$  seja descrita pela equação de Langevin. Agora, o que pretendemos estudar é o comportamento quântico de tal sistema conjunto a partir da quantização de  $H$ , dado por (2.4).

## 2.3 A Formulação Quântica e o cálculo do Superpropagador do Sistema.

Vamos estudar a dinâmica quântica do sistema descrito pela Hamiltoniana (2.4) [6, 20, 25]. Em princípio, o operador densidade do sistema conjunto correspondente a (2.4) no tempo  $t$  é obtido através da expressão

$$\hat{\rho}_{S+R}(t) = \hat{U}(t, 0)\hat{\rho}_{S+R}(0)\hat{U}^\dagger(t, 0), \quad (2.29)$$

onde  $\hat{U}(t, 0)$  é o operador de evolução temporal usual correspondente a  $H$ . O espaço de Hilbert para esse problema é  $(N + 1)$  dimensional, já que estamos considerando um sistema de interesse interagindo com  $N$  osciladores do reservatório.

Vamos associar ao sistema de interesse as coordenadas  $x', y'$  no instante  $t = 0$  e  $x, y$  no instante  $t$ . Da mesma forma, associamos ao  $k$ -ésimo oscilador de reservatório as coordenadas  $R'_k, Q'_k$  em  $t = 0$  e  $R_k, Q_k$  em  $t$ . Desse modo, podemos representar as coordenadas dos osciladores do reservatório pelo vetor

$$\vec{R} = (R_1, R_2, \dots, R_N), \quad (2.30)$$

tal que o estado do mesmo escreve-se:

$$|\vec{R}\rangle = |R_1\rangle \otimes |R_2\rangle \otimes \dots \otimes |R_N\rangle = |R_1, R_2, \dots, R_N\rangle. \quad (2.31)$$

Assim, na representação de coordenadas, temos a relação de completeza

$$\iint dx' d\vec{R}' |x', \vec{R}'\rangle \langle x', \vec{R}'| = 1. \quad (2.32)$$

a partir da qual escreveremos o operador densidade do sistema conjunto na forma

$$\begin{aligned} \langle x, \vec{R} | \hat{\rho}_{S+R}(t) | y, \vec{Q} \rangle &= \langle x, \vec{R} | \hat{U}(t, 0) \hat{\rho}_{S+R}(0) \hat{U}^\dagger(t, 0) | y, \vec{Q} \rangle \\ &= \iiint dx' dy' d\vec{R}' d\vec{Q}' \langle x, \vec{R} | \hat{U}(t, 0) | x', \vec{R}' \rangle \langle x', \vec{R}' | \hat{\rho}_{S+R}(0) | y', \vec{Q}' \rangle \langle y', \vec{Q}' | \hat{U}^\dagger(t, 0) | y, \vec{Q} \rangle. \end{aligned} \quad (2.33)$$

A partir da definição dos propagadores do sistema conjunto,

$$K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) = \langle x, \vec{R} | \hat{U}(t, 0) | x', \vec{R}' \rangle, \quad (2.34)$$

podemos escrever a Eq. (2.33) como

$$\begin{aligned} \langle x, \vec{R} | \hat{\rho}_{S+R}(t) | y, \vec{Q} \rangle &= \iiint \int dx' dy' d\vec{R}' d\vec{Q}' \langle x', \vec{R}' | \hat{\rho}_{S+R}(0) | y', \vec{Q}' \rangle \\ &\times K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) K^*(y, \vec{Q}, t; y', \vec{Q}', 0). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Como estamos interessados em observar o comportamento do sistema de interesse, vamos tomar o traço de  $\hat{\rho}_{S+R}(t)$  com respeito às variáveis do reservatório, de forma a obter o operador densidade reduzido do sistema  $S$

$$\hat{\rho}_S(t) = \text{Tr}_R \hat{\rho}_{S+R}(t) = \int d\vec{R} \langle \vec{R} | \hat{\rho}_{S+R}(t) | \vec{R} \rangle. \quad (2.36)$$

Assim, podemos escrever o elemento de matriz do operador densidade reduzido do sistema  $S$  como

$$\rho_S(x, y, t) = \int d\vec{R} \langle x, \vec{R} | \hat{\rho}_{S+R}(t) | y, \vec{R} \rangle. \quad (2.37)$$

Usando relações de completeza e reconhecendo as expressões para os propagadores, como na Eq. (2.35), temos

$$\begin{aligned} \rho_S(x, y, t) &= \iiint \int dx' dy' d\vec{R}' d\vec{R} d\vec{Q}' \langle x', \vec{R}' | \hat{\rho}_{S+R}(0) | y', \vec{Q}' \rangle \\ &\times K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) K^*(y, \vec{R}, t; y', \vec{Q}', 0). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Neste ponto, vamos introduzir a primeira condição particular a ser imposta em nosso cálculo do operador densidade reduzido. Vamos supor que a interação entre o sistema de interesse e o reservatório possa estar inicialmente “desligada” em  $t = 0$  e que a mesma seja “ligada” subitamente em um intervalo

de tempo imediatamente posterior, digamos, em  $t = 0^+$  [6, 20]. Isto nos permite fazer a seguinte consideração no elemento de matriz densidade reduzido inicial do sistema conjunto ( $S + R$ )

$$\langle x', \vec{R}' | \hat{\rho}_{S+R}(0) | y', \vec{Q}' \rangle = \rho_S(x', y', 0) \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0), \quad (2.39)$$

ou seja, estamos considerando que os sistemas são separáveis em  $t = 0$ . Esta hipótese simplifica bastante os nossos cálculos posteriores, como veremos.

Com a consideração (2.39), vamos definir a função

$$\begin{aligned} J(x, y, t; x', y', 0) = & \iiint d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) \\ & \times K^*(y, \vec{R}, t; y', \vec{Q}', 0), \end{aligned} \quad (2.40)$$

de forma a podermos escrever a Eq. (2.38) da seguinte maneira

$$\rho_S(x, y, t) = \iint dx' dy' J(x, y, t; x', y', 0) \rho_S(x', y', 0). \quad (2.41)$$

Desta expressão, podemos ver que  $J(x, y, t; x', y', 0)$  nada mais é que um superpropagador, responsável pela evolução do elemento de matriz densidade reduzido do sistema  $S$ . Notemos aqui que  $J(x, y, t; x', y', 0)$  contém a influência do reservatório, como visto na Eq. (2.40).

Resta-nos calcular o propagador  $K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0)$ . Para tal, vamos adotar a representação de Feynman para os propagadores, em termos de integrais funcionais, como segue [21, 27]

$$K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) = \int_{x'}^x \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D_F x(t') D_F \vec{R}(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t'), \vec{R}(t')] \right\}, \quad (2.42)$$

onde  $S[x(t'), \vec{R}(t')]$  é a ação clássica correspondente ao sistema conjunto ( $S + R$ ) representado pela Lagrangeana (2.8) e as integrais são tais que os seus extremos

são dados, de acordo com a notação que adotamos até agora, por

$$\begin{aligned} x(0) &= x', & x(t) &= x \\ \vec{R}(0) &= \vec{R}', & \vec{R}(t) &= \vec{R}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

A ação clássica correspondente à Lagrangeana (2.8) é dada por

$$\begin{aligned} S[x(t'), \vec{R}(t')] &= \int dt' L(x(t'), \vec{R}(t'), \dot{x}(t'), \dot{\vec{R}}(t')) \\ &= S_S[x(t')] + S_R[\vec{R}(t')] + S_I[x(t'), \vec{R}(t')]. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Substituindo as relações (2.42) e (2.44) na Eq. (2.40), ficamos com a seguinte expressão para o superpropagador

$$J(x, y, t; x', y', 0) = \int_{x'}^x \int_{y'}^y D_F x(t') D_F y(t') \exp\left\{\frac{i}{\hbar} [S_S[x(t')] - S_S[y(t')]]\right\} F[x, y], \quad (2.45)$$

onde  $F[x, y]$  é conhecido como *funcional de influência* do reservatório [6, 20, 25] e é dado por

$$\begin{aligned} F[x, y] &= \iiint d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} \int_{\vec{Q}'}^{\vec{R}} D_F \vec{R}(t') D_F \vec{Q}(t') \\ &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} [S_R[\vec{R}(t')] - S_R[\vec{Q}(t')] + S_I[x(t'), \vec{R}(t')] - S_I[y(t'), \vec{Q}(t')]]\right\}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

O funcional de influência descreve, como o próprio nome diz, a influência do reservatório de osciladores harmônicos sobre o sistema  $S$ , quando estes estão sujeitos a forças externas associadas às coordenadas  $x(t)$  e  $y(t)$ , ou seja, o funcional de influência acopla as trajetórias  $x(t)$  e  $y(t)$  via reservatório.

O que temos que fazer agora, é calcular o funcional de influência para o nosso modelo, que é descrito pela Lagrangeana (2.8). Esse cálculo é bastante

trabalhoso e está apresentado em detalhes no Apêndice A. O resultado é o seguinte

$$\begin{aligned}
F[x, y] = & \exp\left\{\frac{-1}{\hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_R(\tau - \sigma) [x(\sigma) - y(\sigma)]\right\} \\
& \times \exp\left\{\frac{-i}{\hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_I(\tau - \sigma) [x(\sigma) + y(\sigma)]\right\},
\end{aligned} \tag{2.47}$$

com:

$$\alpha_R(\tau - \sigma) = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \coth\left(\frac{\omega_k \hbar \beta}{2}\right) \cos[\omega_k(\tau - \sigma)], \tag{2.48}$$

e

$$\alpha_I(\tau - \sigma) = - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \sin[\omega_k(\tau - \sigma)]. \tag{2.49}$$

Se fizermos uso da densidade espectral  $J(\omega)$  na forma (2.19), podemos escrever

$$\alpha_R(\tau - \sigma) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right) \cos[\omega(\tau - \sigma)], \tag{2.50}$$

e

$$\alpha_I(\tau - \sigma) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin[\omega(\tau - \sigma)], \tag{2.51}$$

já que estamos tomando o limite do contínuo nas frequências. Como estamos considerando dissipação ôhmica, dada por (2.21), onde temos uma frequência de corte  $\Omega$  muito maior que as frequências características do sistema, podemos escrever as expressões acima na seguinte forma [6, 20]

$$\alpha_R(\tau - \sigma) = \frac{1}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \eta \omega \coth\left(\frac{\omega \hbar \beta}{2}\right) \cos[\omega(\tau - \sigma)], \tag{2.52}$$

e

$$\begin{aligned}
\alpha_I(\tau - \sigma) &= -\frac{1}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \eta \omega \sin[\omega(\tau - \sigma)] \\
&= \frac{\eta \Omega}{\pi(\tau - \sigma)} \cos[\Omega(\tau - \sigma)] - \frac{\eta}{\pi(\tau - \sigma)^2} \sin[\Omega(\tau - \sigma)].
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Substituindo essas relações no funcional de influência e este no superpropagador, temos que o mesmo escreve-se na forma

$$\begin{aligned}
J(x, y, t; x', y', 0) &= \int_{x'}^x \int_{y'}^y D_F x(t') D_F y(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ S_S[x(t')] - S_S[y(t')] \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\eta\Omega}{\pi} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\cos[\Omega(\tau - \sigma)]}{(\tau - \sigma)} [x(\sigma) + y(\sigma)] \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{\eta}{\pi} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\sin[(\Omega(\tau - \sigma)]}{(\tau - \sigma)^2} [x(\sigma) + y(\sigma)] \right] \right\} \\
&\times \exp \left\{ \frac{-\eta}{\pi\hbar} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \int_0^\Omega d\omega \omega \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos[\omega(\tau - \sigma)] [x(\sigma) - y(\sigma)] \right\}.
\end{aligned} \tag{2.54}$$

O que temos que fazer agora é calcular as integrais que compõem o funcional de influência, a fim de escrevermos o superpropagador em uma forma mais simples. Esses cálculos estão apresentados no Apêndice B. Temos, então, o resultado para o superpropagador

$$\begin{aligned}
J(x, y, t; x', y', 0) &= \exp \left[ \frac{-i}{\hbar} f(x, x'; y, y') \right] \int_{x'}^x \int_{y'}^y D_F x(t') D_F y(t') \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \tilde{S}_S[x(t')] - \tilde{S}_S[y(t')] - M\gamma \int_0^t dt' [x(t')\dot{y}(t') - \dot{x}(t')y(t')] \right] \right\} \\
&\times \exp \left\{ \frac{-2M\gamma}{\pi\hbar} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \int_0^\Omega d\omega \omega \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos[\omega(\tau - \sigma)] [x(\sigma) - y(\sigma)] \right\},
\end{aligned} \tag{2.55}$$

onde  $\gamma = \frac{\eta}{2M}$  é a constante de relaxação do sistema, definida em (B.22).

O superpropagador dado pela Eq. (2.55) é quem governa a evolução do sistema  $S$ , sujeito ao potencial  $V_0$ , quando em contato com o reservatório. Assim, para um dado potencial  $V_0$ , basta encontrarmos o superpropagador através do cálculo da Eq. (2.55) para obtermos a evolução do sistema. Entretanto, poucos são os casos em que o superpropagador pode ser calculado exatamente, numa forma analítica fechada. Os casos que podem ser resolvidos exatamente são aqueles para os quais  $V_0(q) = aq^n$ , com  $n = 0, 1$  ou  $2$ . Na maioria das vezes, é necessário recorrer a algum tipo de aproximação. Essa “deficiência” vem da

própria formulação de Feynman, que requer que as integrais para o cálculo do propagador sejam gaussianas, mas nada impede que tais integrais sejam calculadas numericamente.

Nosso próximo passo será encontrar uma equação que rege a dinâmica do operador densidade reduzido do sistema no limite de altas temperaturas (limite clássico).

## 2.4 O Limite de Altas Temperaturas e a Obtenção da Equação Mestra para o Operador Densidade Reduzido do Sistema.

Vamos, agora, analisar a Eq. (2.55) no limite de altas temperaturas (limite clássico) [6, 7, 20, 21, 29], onde temos

$$k_B T \gg \hbar \omega, \text{ para } \omega \ll \Omega. \quad (2.56)$$

Usando o fato de que  $\coth \alpha \approx \alpha^{-1}$  para  $\alpha \rightarrow 0$ , integrando em  $\omega$  e usando a aproximação (B.13), podemos reescrever o argumento da segunda exponencial do integrando na Eq. (2.55) como

$$\begin{aligned} & \frac{-2M\gamma}{\pi\hbar} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \int_0^\Omega d\omega \omega \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos[\omega(\tau - \sigma)] [x(\sigma) - y(\sigma)] \\ & = \frac{-2M\gamma k_B T}{\hbar^2} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)]^2, \end{aligned} \quad (2.57)$$



de modo que o superpropagador pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}
 J(x, y, t; x', y', 0) &= \exp\left[\frac{-i}{\hbar}f(x, x'; y, y')\right] \int_{x'}^x \int_{y'}^y D_F x(t') D_F y(t') \\
 &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\tilde{S}_S[x(t')] - \tilde{S}_S[y(t')] - M\gamma \int_0^t dt' [x(t')\dot{y}(t') - \dot{x}(t')y(t')]\right]\right\} \\
 &\times \exp\left\{\frac{-2M\gamma k_B T}{\hbar^2} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)]^2\right\}.
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

Considerando as expressões (2.41) e (2.58) é possível encontrar uma equação diferencial para  $\rho_S(x, y, t)$ , pois ao longo de um intervalo de tempo infinitesimal  $t \rightarrow t + \varepsilon$ , temos, através de (2.41), que

$$\rho_S(x, y, t + \varepsilon) = \iint dx' dy' J(x, y, t + \varepsilon; x', y', t) \rho_S(x', y', t). \tag{2.59}$$

Dessa forma, o propagador  $J(x, y, t + \varepsilon; x', y', t)$  pode ser escrito em uma maneira mais simples. Para isso, vamos usar o fato de que a integração funcional em intervalos de tempo infinitesimais pode ser aproximada multiplicando-se o valor do integrando por uma constante de normalização, como segue [26, 27]

$$\int_{x'}^x D_F x(t') \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S_{Cl}\right\} \approx \frac{1}{A} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S_{Cl}\right\}. \tag{2.60}$$

Assim, lembrando que:

$$\tilde{S}_S[x(t')] = \int \left(\frac{1}{2}M\dot{x}^2 - V(x)\right) dt', \tag{2.61}$$

onde  $V(x)$  é o potencial efetivo devido à frequência renormalizada  $\tilde{\omega}$ , podemos escrever o superpropagador como

$$\begin{aligned}
 J(x, y, t + \varepsilon; x', y', t) &\approx \frac{1}{A} \exp\left[\frac{-i}{\hbar}f(x, x'; y, y')\right] \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\int_t^{t+\varepsilon} dt' \left(\frac{1}{2}M\dot{x}^2 - V(x)\right) \right. \right. \\
 &\left. \left. - \int_t^{t+\varepsilon} dt' \left(\frac{1}{2}M\dot{y}^2 - V(y)\right) - M\gamma \int_t^{t+\varepsilon} dt' (x\dot{y} - \dot{x}y)\right]\right\} \exp\left\{\frac{-2M\gamma k_B T}{\hbar^2} \int_t^{t+\varepsilon} d\tau (x-y)^2\right\},
 \end{aligned} \tag{2.62}$$

e é claro, todas essas integrais podem ser aproximadas quando  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Então, denotando

$$\begin{aligned}
 x &= x(t + \varepsilon) & e & \quad y = y(t + \varepsilon) \\
 x' &= x(t) & e & \quad y' = y(t),
 \end{aligned} \tag{2.63}$$

e efetuando as seguintes aproximações

$$\dot{x} \approx \frac{x - x'}{\varepsilon}, \quad \dot{y} \approx \frac{y - y'}{\varepsilon} \quad e \quad \int_t^{t+\varepsilon} f(x(t')) dt' \approx \varepsilon f\left(\frac{x + x'}{2}\right), \quad (2.64)$$

podemos escrever a Eq. (2.59) como

$$\begin{aligned} \rho_S(x, y, t + \varepsilon) = & \frac{1}{A} \iint d\beta_1 d\beta_2 \exp \left\{ \frac{iM}{2\hbar\varepsilon} \beta_1^2 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V\left(x - \frac{\beta_1}{2}\right) - \frac{iM}{2\hbar\varepsilon} \beta_2^2 \right. \\ & + \frac{i\varepsilon}{\hbar} V\left(y - \frac{\beta_2}{2}\right) - \frac{iM\gamma}{\hbar} \left(x - \frac{\beta_1}{2}\right) \beta_2 + \frac{iM\gamma}{\hbar} \left(y - \frac{\beta_2}{2}\right) \beta_1 \\ & - \frac{iM\gamma}{\hbar} \left(x - \frac{\beta_1}{2}\right) \beta_1 + \frac{iM\gamma}{\hbar} \left(y - \frac{\beta_2}{2}\right) \beta_2 - \frac{2M\gamma k_B T \varepsilon}{\hbar^2} (x - y)^2 \\ & \left. + \frac{2M\gamma k_B T \varepsilon}{\hbar^2} (x - y)(\beta_1 - \beta_2) - \frac{M\gamma k_B T \varepsilon}{2\hbar^2} (\beta_1 - \beta_2)^2 \right\} \rho_S(x - \beta_1, y - \beta_2, t), \end{aligned} \quad (2.65)$$

onde

$$\beta_1 = x - x' \quad e \quad \beta_2 = y - y'. \quad (2.66)$$

Em seguida, calculamos a integral (2.65) no limite  $\varepsilon \rightarrow 0$ , em que as exponenciais com termos proporcionais a  $\varepsilon^{-1}$  tornam-se muito grandes, e oscilam muito rapidamente. Assim, para que a integral assuma um valor finito, temos que ter  $\beta_1$  e  $\beta_2$  muito pequenos. Mais especificamente, devemos ter

$$\beta_1 \approx \beta_2 \approx \sqrt{\frac{\varepsilon \hbar}{M}}, \quad (2.67)$$

dado que nessa região de integração, a fase de ambas as exponenciais com termos proporcionais a  $\varepsilon^{-1}$  devem mudar por uma quantidade aproximadamente igual à unidade. Portanto, vamos considerar nos cálculos futuros

$$\beta_1 \approx \beta_2 \approx \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}}). \quad (2.68)$$

Definindo duas novas variáveis

$$\beta'_1 = \beta_1 - \gamma(x - y)\varepsilon \quad e \quad \beta'_2 = \beta_2 + \gamma(x - y)\varepsilon \quad (2.69)$$

e expandindo todos os termos do integrando, exceto aqueles proporcionais a  $\varepsilon^{-1}$  em  $\beta_1$ ,  $\beta_2$ ,  $t$  e  $\varepsilon$  até  $\mathcal{O}(\varepsilon)$ , podemos escrever a Eq. (2.65) na seguinte forma

$$\begin{aligned} \rho_S + \varepsilon \frac{\partial \rho_S}{\partial t} = & \frac{1}{A} \iint d\beta'_1 d\beta'_2 \exp \left[ \frac{iM}{2\hbar\varepsilon} (\beta_1'^2 - \beta_2'^2) \right] \left[ \rho_S - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x) \rho_S + \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(y) \rho_S \right. \\ & - \frac{2M\gamma k_B T \varepsilon}{\hbar^2} (x-y)^2 \rho_S - \beta_1' \frac{\partial \rho_S}{\partial x} - \beta_2' \frac{\partial \rho_S}{\partial y} - \gamma \varepsilon (x-y) \frac{\partial \rho_S}{\partial x} \\ & \left. + \gamma \varepsilon (x-y) \frac{\partial \rho_S}{\partial y} + \frac{\beta_1'^2}{2} \frac{\partial^2 \rho_S}{\partial x^2} + \frac{\beta_2'^2}{2} \frac{\partial^2 \rho_S}{\partial y^2} + \beta_1' \beta_2' \frac{\partial^2 \rho_S}{\partial x \partial y} \right], \end{aligned} \quad (2.70)$$

onde estamos denotando o elemento de matriz densidade reduzido do sistema como  $\rho_S = \rho_S(x, y, t)$ .

As integrais que aparecem na equação acima, do tipo das integrais de Fresnel, podem ser extendidas de  $-\infty$  a  $+\infty$ , já que sabemos que as principais contribuições para as mesmas provêm das regiões em que a relação (2.67) é respeitada. Efetuando as integrações temos, finalmente, que

$$\begin{aligned} \rho_S + \varepsilon \frac{\partial \rho_S}{\partial t} = & \frac{1}{A} \frac{2\pi\hbar\varepsilon}{M} \left[ \rho_S - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x) \rho_S + \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(y) \rho_S - \frac{2M\gamma k_B T \varepsilon}{\hbar^2} (x-y)^2 \rho_S \right. \\ & \left. - \gamma \varepsilon (x-y) \frac{\partial \rho_S}{\partial x} + \gamma \varepsilon (x-y) \frac{\partial \rho_S}{\partial y} \right] - \frac{1}{A} \frac{\pi\hbar^2\varepsilon^2}{iM^2} \left[ \frac{\partial^2 \rho_S}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \rho_S}{\partial y^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.71)$$

A partir dessa equação, se igualarmos os termos correspondentes de cada lado, chegamos à seguinte conclusão:

a) O termo independente de  $\varepsilon$  nos dá a constante de normalização  $A$

$$A = \frac{2\pi\hbar\varepsilon}{M}, \quad (2.72)$$

b) O termo em primeira ordem em  $\varepsilon$  nos dá a equação de movimento para  $\rho_S(x, y, t)$  no limite de altas temperaturas (região clássica)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_S}{\partial t} = & -\frac{\hbar}{2Mi} \frac{\partial^2 \rho_S}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2Mi} \frac{\partial^2 \rho_S}{\partial y^2} + \frac{1}{i\hbar} [V(x) - V(y)] \rho_S \\ & - \gamma (x-y) \left( \frac{\partial \rho_S}{\partial x} - \frac{\partial \rho_S}{\partial y} \right) - \frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} (x-y)^2 \rho_S. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Convém ressaltar que a Eq. (2.73) não é a mais geral para  $\rho_S(x, y, t)$ , uma vez que é válida quando  $k_B T \gg \hbar\omega$ . Para obtermos alguma equação mais geral é preciso trabalhar o superpropagador (2.55). A Eq. (2.73) pode, ainda, ser escrita na representação de operadores. Para isto, basta nos lembrarmos das seguintes relações

$$\rho_S(x, y, t) = \langle x | \hat{\rho}_S(t) | y \rangle, \quad \langle x | y \rangle = \delta(x - y), \quad (2.74)$$

$$\langle x | V(\hat{x}) | y \rangle = V(y)\delta(x - y) \quad e \quad \langle x | \hat{p} | y \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} \delta(x - y).$$

Manipulando as expressões (2.74) e denotando o Hamiltoniano renormalizado do sistema devido ao potencial efetivo como  $\hat{H}_S$ , temos, finalmente, a seguinte equação de operadores

$$\frac{\partial \hat{\rho}_S}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] - \frac{i\gamma}{\hbar} [\hat{x}, \{\hat{p}, \hat{\rho}_S\}] - \frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} [\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}_S]]. \quad (2.75)$$

Ou ainda, usando a igualdade

$$[\hat{x}, \{\hat{p}, \hat{\rho}_S\}] = \frac{1}{2} [\{\hat{p}, \hat{x}\}, \hat{\rho}_S] + [\hat{x}, \hat{\rho}_S \hat{p}] - [\hat{p}, \hat{\rho}_S \hat{x}], \quad (2.76)$$

ficamos com

$$\frac{\partial \hat{\rho}_S}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] - \frac{i\gamma}{2\hbar} [\{\hat{p}, \hat{x}\}, \hat{\rho}_S] - \frac{i\gamma}{\hbar} [\hat{x}, \hat{\rho}_S \hat{p}] + \frac{i\gamma}{\hbar} [\hat{p}, \hat{\rho}_S \hat{x}] - \frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} [\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}_S]]. \quad (2.77)$$

Vamos considerar a transformada de Wigner do operador densidade reduzido do sistema a fim de estudar a Eq. (2.73) no limite clássico. A função de Wigner é utilizada nesse caso porque ela se reduz à função distribuição no espaço de fase da partícula quando  $\hbar \rightarrow 0$ . Invertendo a transformada de Wigner, definida como

$$W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp\left(\frac{ipy}{\hbar}\right) \left\langle x - \frac{y}{2} \left| \hat{\rho}_S(t) \right| x + \frac{y}{2} \right\rangle, \quad (2.78)$$

obtemos o operador densidade reduzido do sistema de interesse

$$\rho_S(x, y, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp W\left(\frac{x+y}{2}, p, t\right) \exp\left[-\frac{ip}{\hbar}(x-y)\right], \quad (2.79)$$

e substituindo essa expressão na Eq. (2.73), obtemos a equação para a transformada de Wigner

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}pW + \frac{\partial}{\partial p}V'(x)W + 2\gamma\frac{\partial}{\partial p}pW + 2M\gamma k_B T \frac{\partial^2 W}{\partial p^2}. \quad (2.80)$$

Essa nada mais é que a equação de Fokker-Planck, puramente quântica, que descreve a evolução temporal da transformada de Wigner de  $\rho_S(x, y, t)$ . Porém, apenas o seu limite clássico faz sentido aqui, já que a Eq. (2.73) foi deduzida nesse limite. Como a função de Wigner tende à função distribuição no espaço de fase no limite clássico, podemos concluir que a Eq. (2.80) descreve a evolução temporal da distribuição no espaço de fase de uma partícula Browniana clássica, quando  $\hbar \rightarrow 0$  [6, 20].

## 2.5 Decoerência e Dissipação de Energia no Modelo de Caldeira & Leggett.

### 2.5.1 Decoerência.

A fim de estudar o processo de decoerência através do modelo de Caldeira & Leggett, vamos considerar, por exemplo, que o sistema esteja em um estado de superposição [23]

$$|\Psi_S\rangle = |\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle, \quad (2.81)$$

de forma tal que se projetarmos esse estado na base das posições, ficamos com a superposição coerente de duas gaussianas

$$\Psi_S(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x) = N \left[ e^{-\frac{(x+q_0)^2}{2\delta^2}} + e^{-\frac{(x-q_0)^2}{2\delta^2}} \right], \quad (2.82)$$

onde  $N$  é uma constante de normalização. Como mostra a Fig. 2.2, estas gaussianas possuem largura  $\delta$ , centram-se em  $-q_0$  e  $q_0$ , e estão separadas por uma distância  $\Delta x \approx 2q_0$ . Para o caso em que a separação é grande ( $\Delta x \gg \delta$ ), a matriz

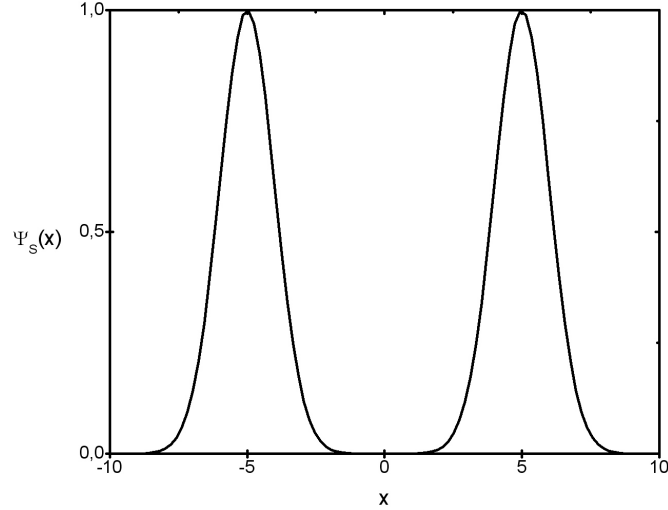


Figura 2.2: Superposição de gaussianas

densidade reduzida correspondente

$$\begin{aligned}
 \rho_S(x, y) &= \langle x | \hat{\rho}_S | y \rangle = \langle x | \Psi_S \rangle \langle \Psi_S | y \rangle \\
 &= \Psi_1(x) \Psi_1^*(y) + \Psi_2(x) \Psi_2^*(y) + \Psi_1(x) \Psi_2^*(y) + \Psi_2(x) \Psi_1^*(y) \\
 &= N^2 \left[ e^{-\frac{(x+q_0)^2}{2\delta^2}} e^{-\frac{(y+q_0)^2}{2\delta^2}} + e^{-\frac{(x-q_0)^2}{2\delta^2}} e^{-\frac{(y-q_0)^2}{2\delta^2}} \right. \\
 &\quad \left. + e^{-\frac{(x+q_0)^2}{2\delta^2}} e^{-\frac{(y-q_0)^2}{2\delta^2}} + e^{-\frac{(x-q_0)^2}{2\delta^2}} e^{-\frac{(y+q_0)^2}{2\delta^2}} \right], \tag{2.83}
 \end{aligned}$$

possui quatro picos bem definidos, dois na diagonal (reta  $x = y$ ) e dois fora da diagonal, como na Fig. 2.3

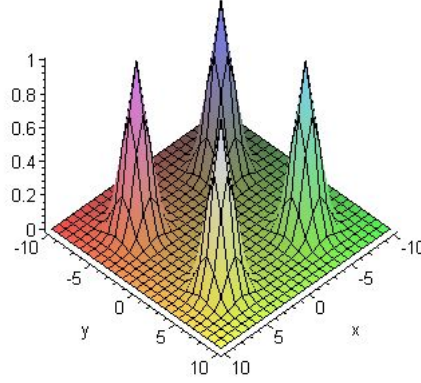


Figura 2.3: Matriz densidade reduzida (2.83)

Os picos da diagonal correspondem às duas possíveis localizações da partícula. A coerência quântica é devida aos picos fora da diagonal. A existência desses picos evidencia o fato de que a partícula não está, especificamente, em nenhuma das duas localizações aproximadas, mas sim em uma superposição coerente delas, demonstrando assim, seu caráter quântico. Para os picos da diagonal, temos que  $x \approx y$  (na verdade:  $x \approx y \approx x \pm \delta \approx y \pm \delta$ , tal que  $x - y \approx \delta$ ), e na região fora da diagonal, temos que  $x \approx -y$ , tal que  $x - y \approx 2q_0 \approx \Delta x$ .

Através da Eq. (2.73), que pode ainda ser reescrita na forma

$$\frac{\partial \rho_S}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \langle x | [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] | y \rangle - \gamma(x-y) \left( \frac{\partial \rho_S}{\partial x} - \frac{\partial \rho_S}{\partial y} \right) - \frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} (x-y)^2 \rho_S, \quad (2.84)$$

podemos analisar o efeito do reservatório sobre o operador densidade reduzido descrito pela Eq. (2.83). Notamos que a Eq. (2.84) separa-se em três termos. O primeiro é correspondente à equação de von Neumann, que pode ser obtida a partir da equação de Schrödinger e representa a evolução livre (coerente) do sistema reduzido. Classicamente, ela gera as equações de movimento de Newton para as médias dos observáveis. O segundo termo é responsável pela dissipação: a perda de energia por parte do sistema e um decréscimo do momento médio.

O último termo é responsável pela difusão e causa as flutuações que levam ao movimento Browniano.

Vamos estimar o tempo de decoerência para  $|\psi_S\rangle$ . Nesse caso, temos que estudar a influência da dinâmica descrita pela Eq. (2.84) sobre os picos fora da diagonal em (2.83), que representam coerência de fase quântica. O primeiro termo pode ser desprezado, pois, como já foi dito, o mesmo representa a evolução livre (coerente) do sistema. No caso em questão, não estamos interessados na dinâmica do sistema de interesse governada por este termo. Mudanças significativas do estado (misto) do sistema  $S$  devem ocorrer numa escala de tempo muito maior que o tempo de decoerência, que desejamos estimar. Cabe observar, contudo, que no problema por nós abordado, em que dois osciladores harmônicos dissipativos são acoplados, dinâmicas coerentes de transferência de estados entre os osciladores, e conseqüente recorrência destes estados, fazem-se presentes e merecem atenção especial.

O segundo termo na Eq. (2.84) também pode ser desprezado, pois se o compararmos com o terceiro termo, vemos que  $(x - y)^2 \gg |x - y|$ , ou ainda  $(\Delta x)^2 \gg (\Delta x)$ , já que para os picos fora da diagonal, temos que  $x \approx -y$ , tal que  $x - y \approx 2q_0 \approx \Delta x$ , conforme está esquematizado na Fig. 2.4, que corresponde a uma vista “por cima” da matriz densidade reduzida, representada na Fig. 2.3.

Com todas essas considerações, podemos fazer a seguinte aproximação com relação à Eq. (2.84)

$$\frac{\partial \rho_S}{\partial t} \approx -\frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} (x - y)^2 \rho_S \approx -\frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} (\Delta x)^2 \rho_S, \quad (2.85)$$

tal que, resolvendo a equação diferencial, obtemos

$$\rho_S(\tau) \approx \rho_S(0) \exp\left[-\frac{2M\gamma k_B T (\Delta x)^2}{\hbar^2} \tau\right]. \quad (2.86)$$

A partir desta expressão é possível fazer uma estimativa do tempo de decoerência para o estado  $|\Psi_S\rangle$ . Com a imposição

$$\exp\left[-\frac{2M\gamma k_B T (\Delta x)^2}{\hbar^2} \tau\right] \approx e^{-1}, \quad (2.87)$$



temos, finalmente, que os termos fora da diagonal decaem com um tempo de decoerência que é dado como segue

$$\tau_D \approx \tau_R \frac{\hbar^2}{2Mk_B T (\Delta x)^2} = \frac{1}{\gamma} \left( \frac{\lambda_T}{\Delta x} \right)^2, \quad (2.88)$$

onde  $\lambda_T = \frac{\hbar}{\sqrt{2Mk_B T}}$  é o comprimento de onda térmico de de Broglie e  $\tau_R = \gamma^{-1}$  é o tempo de relaxação do sistema. Notamos que a expressão (2.88) guarda os principais ingredientes que espera-se, estejam associados à transição da dinâmica quântica para a clássica. Conforme se observa, o tempo de decoerência é tanto menor quanto maior a energia do sistema de interesse, associada às quantidades  $M$  e  $k_B T$ , e também quanto maior a separação  $\Delta x$  entre os pacotes de onda. Portanto, toda quantidade física que evidencia o caráter quântico do sistema, conspira contra esse mesmo caráter, induzindo um tempo de decoerência cada vez menor, comparado com o tempo de relaxação  $\tau_R$ . O Princípio da Correspondência está, portanto, notadamente presente na expressão obtida por Caldeira & Leggett para o tempo de decoerência.

A Fig. (2.5) ilustra a matriz densidade após decorrido o tempo de decoerência. Temos, praticamente, apenas os picos da diagonal. Assim, esta pode

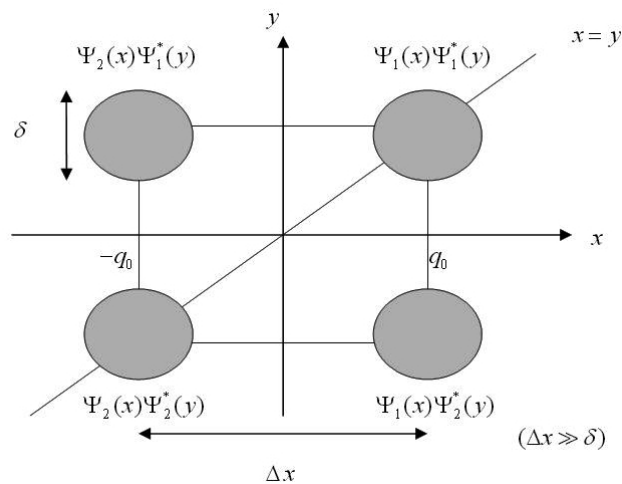


Figura 2.4: Vista “por cima” da matriz densidade reduzida (2.83)

ser considerada uma distribuição de probabilidade clássica, com igual probabilidade de encontrarmos a partícula em ambas as localizações correspondentes aos pacotes de onda gaussianos.

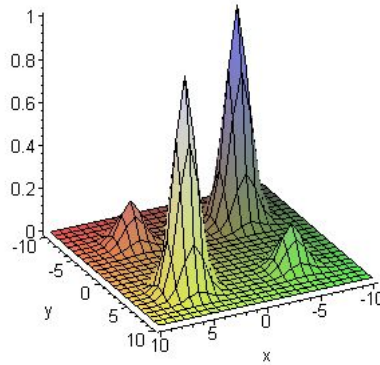


Figura 2.5: Matriz densidade reduzida (2.83) após o tempo de decoerência.

Considerando, por exemplo, um objeto macroscópico com massa  $M = 1g$  à temperatura ambiente ( $T = 300K$ ) e descrito inicialmente por um estado de superposição da forma (2.82) com separação  $\Delta x = 1cm$ , temos que [20]

$$\tau_D \approx 10^{-40} \tau_R. \quad (2.89)$$

Mesmo considerando um tempo de relaxação extravagante, da ordem da idade do Universo  $\tau_R \approx 10^{17} seg$ , a coerência quântica desse sistema deve ser destruída em  $\tau_D \approx 10^{-23} seg$  [23].

### 2.5.2 O Processo de Dissipação de Energia.

A fim de observarmos como a energia do sistema se comporta, vamos fazer um cálculo qualitativo da energia média do mesmo através do uso da equação mestra (2.75). Temos que, para um operador  $\hat{O}$  vale a seguinte expressão

$$\langle \hat{O} \rangle = Tr(\hat{\rho} \hat{O}). \quad (2.90)$$

Substituindo esta expressão (2.90) na equação mestra e observando a propriedade cíclica do traço, temos, após alguns cálculos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{H}_S] \hat{\rho}_S) - \frac{i\gamma}{2\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{p}\hat{x}] \hat{\rho}_S + [\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}\hat{p}] \hat{\rho}_S) \\ &- \frac{i\gamma}{\hbar} \text{Tr}(\{\hat{p}\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}\} \hat{\rho}_S - \{\hat{p}, \hat{x}\hat{\mathcal{O}}\} \hat{\rho}_S) - \frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2} \text{Tr}(\{\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}^2\} \hat{\rho}_S - 2\hat{x}\hat{\mathcal{O}}\hat{x} \hat{\rho}_S). \end{aligned} \quad (2.91)$$

Considerando, agora, que o sistema de interesse seja um oscilador harmônico, temos que

$$\hat{H}_S = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 \hat{x}^2, \quad (2.92)$$

onde não estamos considerando a frequência renormalizada  $\tilde{\omega}$ , pois só estamos interessados em observar o comportamento da energia média dada por

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle. \quad (2.93)$$

Temos, então, que calcular os valores médios  $\langle \hat{p}^2 \rangle$  e  $\langle \hat{x}^2 \rangle$ . Para isto, vamos usar a Eq. (2.91), da qual obtemos as três equações acopladas

$$\frac{\partial \langle \hat{x}^2 \rangle}{\partial t} = \frac{1}{M} \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle, \quad (2.94)$$

$$\frac{\partial \langle \hat{p}^2 \rangle}{\partial t} = -4\gamma \langle \hat{p}^2 \rangle + 4M\gamma k_B T - M\omega^2 \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle \quad (2.95)$$

e

$$\frac{\partial \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle}{\partial t} = \frac{2}{M} \langle \hat{p}^2 \rangle - 2M\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle - 2\gamma \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle. \quad (2.96)$$

Antes de resolver esse conjunto de equações diferenciais, fazemos uma mudança de escala na energia e no tempo, para que todos os parâmetros se tornem adimensionais, tal que

$$\tilde{E} = \frac{E}{k_B T}, \quad \tilde{p}^2 = \frac{\hat{p}^2}{M k_B T}, \quad \tilde{x}^2 = \frac{M\omega^2 \hat{x}^2}{k_B T} \quad e \quad \tilde{t} = \gamma t. \quad (2.97)$$

Com essas expressões, temos que a energia média renormalizada e as equações (2.94) a (2.96) ficam escritas na forma

$$\langle \tilde{E} \rangle = \frac{1}{2} \left( \langle \tilde{p}^2 \rangle + \langle \tilde{x}^2 \rangle \right), \quad (2.98)$$

$$\frac{\partial \langle \hat{x}^2 \rangle}{\partial \tilde{t}} = \frac{\omega}{\gamma} \langle \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \rangle, \quad (2.99)$$

$$\frac{\partial \langle \hat{p}^2 \rangle}{\partial \tilde{t}} = -4 \left( \langle \hat{p}^2 \rangle - 1 \right) - \frac{\omega}{\gamma} \langle \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \rangle \quad (2.100)$$

e

$$\frac{\partial \langle \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \rangle}{\partial \tilde{t}} = \frac{2\omega}{\gamma} \left( \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{x}^2 \rangle \right) - 2 \langle \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \rangle. \quad (2.101)$$

Agora, vamos considerar que em  $t = 0$  a função de onda do sistema seja da forma (2.82). Temos a função de onda normalizada

$$\Psi(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{[2\delta(1 + e^{-\frac{q_0^2}{\delta^2}})]^{\frac{1}{2}}} \left[ e^{-\frac{(x+q_0)^2}{2\delta^2}} + e^{-\frac{(x-q_0)^2}{2\delta^2}} \right], \quad (2.102)$$

Com isso, encontramos as condições iniciais do problema

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_{t=0} = \left( \frac{\hbar^2}{2Mk_B T} \right) \left\{ \frac{1}{2\delta^2} - \frac{q_0^2 \exp(\frac{-q_0^2}{\delta^2})}{\delta^4 [1 + \exp(\frac{-q_0^2}{\delta^2})]} \right\}, \quad (2.103)$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_{t=0} = \left( \frac{M\omega^2}{2k_B T} \right) \left\{ \frac{\delta^2}{2} + \frac{q_0^2}{[1 + \exp(\frac{-q_0^2}{\delta^2})]} \right\} \quad (2.104)$$

e

$$\langle \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \rangle_{t=0} = 0. \quad (2.105)$$

Apresentamos na Fig. (2.6) o comportamento típico do processo de equilíbrio térmico entre o sistema e o reservatório. Nesta figura, acompanhamos a evolução da quantidade física  $E_S/k_B T$  contra  $\gamma t$ , em que  $E_S$  indica a energia do sistema de interesse. Assumimos que as quantidades  $\hbar, M, \omega$  e  $\delta$  igualam-se à unidade, enquanto que  $k_B T = 10\hbar\omega$ . Escolhendo-se  $q_0 = 10$ , notamos o processo de relaxação do sistema, de forma que a energia do mesmo equilibra-se com a energia de cada oscilador do reservatório, que corresponde a

$$\langle \tilde{E}_{eq} \rangle = \frac{\hbar\omega}{k_B T (e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1)}, \quad (2.106)$$

quando assumimos a distribuição térmica para os osciladores do reservatório. Podemos ver, a partir desse gráfico, que o sistema parte de um dado valor da

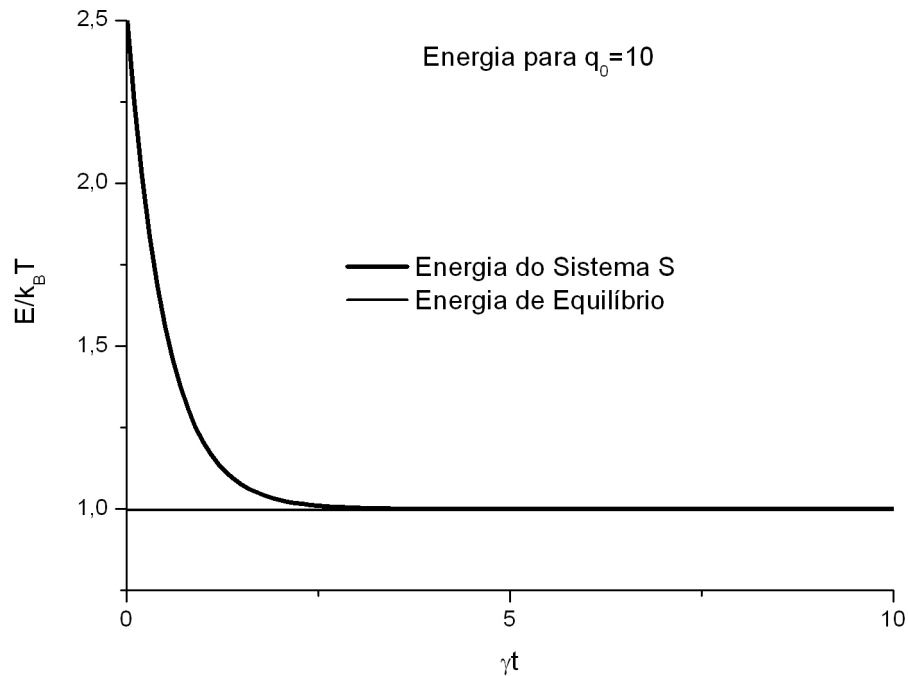


Figura 2.6: Energia do Sistema de Interesse para  $q_0 = 10$ .

energia inicial, escolhido através da separação  $q_0$  entre as gaussianas e evolui em direção ao equilíbrio com o reservatório. No próximo capítulo, vamos aplicar o modelo de Caldeira & Leggett ao estudo de um sistema composto por dois osciladores harmônicos dissipativos interagentes.

# Capítulo 3

## O Modelo Duplicado de Caldeira & Leggett.

### 3.1 Obtenção da Equação Mestra para Dois Osciladores Harmônicos Dissipativos Interagentes.

#### 3.1.1 Formulação Clássica

Vamos considerar agora, dois sistemas,  $S_1$  e  $S_2$ , que correspondem a dois osciladores harmônicos acoplados na seguinte forma:

$$H_{S_1S_2} = \xi q_1 q_2 + \lambda p_1 p_2 + \delta p_1 q_2 + \chi q_1 p_2, \quad (3.1)$$

em que  $\xi$ ,  $\lambda$ ,  $\delta$  e  $\chi$  representam parâmetros de interação com diferentes dimensões. Assumindo que cada oscilador esteja, por sua vez acoplado a um reservatório, como esboça a Fig. 3.1, temos, então

$$H = H_{CL_1} + H_{CL_2} + H_{S_1S_2}, \quad (3.2)$$

em que  $H_{CL_1}$  e  $H_{CL_2}$  representam as Hamiltonianas dos sistemas de Caldeira & Leggett 1 e 2, respectivamente. Assim,  $H$  pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{j=1}^2 \left[ \frac{p_j^2}{2M_j} + V_{0j}(q_j) \right] + \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^N \left[ \frac{p_{jk}^2}{2m_{jk}} + \frac{1}{2} m_{jk} \omega_{jk}^2 q_{jk}^2 \right] \\
 & + \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^N C_{jk} q_j q_{jk} + \xi q_1 q_2 + \lambda p_1 p_2 + \delta p_1 q_2 + \chi q_1 p_2.
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Como no caso anterior, podemos encontrar a Lagrangeana correspondente à Hamiltoniana (3.3)

$$\begin{aligned}
 L = & \sum_{j=1}^2 \left[ \frac{1}{2} \mu_j \dot{q}_j^2 - V_{0j}(q_j) \right] + \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^N \left[ \frac{1}{2} m_{jk} \dot{q}_{jk}^2 - \frac{1}{2} m_{jk} \omega_{jk}^2 q_{jk}^2 \right] - \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^N C_{jk} q_j q_{jk} \\
 & - \xi q_1 q_2 - \mu_1 \delta q_2 \left( \dot{q}_1 - \frac{\delta}{2} q_2 \right) - \mu_2 \chi q_1 \left( \dot{q}_2 - \frac{\chi}{2} q_1 \right) - \mu_{12} (\dot{q}_1 - \delta q_2) (\dot{q}_2 - \chi q_1),
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

onde

$$\mu_j = \frac{M_j}{(1 - \lambda^2 M_1 M_2)} \quad e \quad \mu_{12} = \frac{\lambda M_1 M_2}{(1 - \lambda^2 M_1 M_2)} \tag{3.5}$$

são as “massas reduzidas”, que aparecem devido ao acoplamento entre os sistemas  $S_1$  e  $S_2$ . Note que o aparecimento da massa reduzida decorre do acoplamento momentum-momentum entre os osciladores.

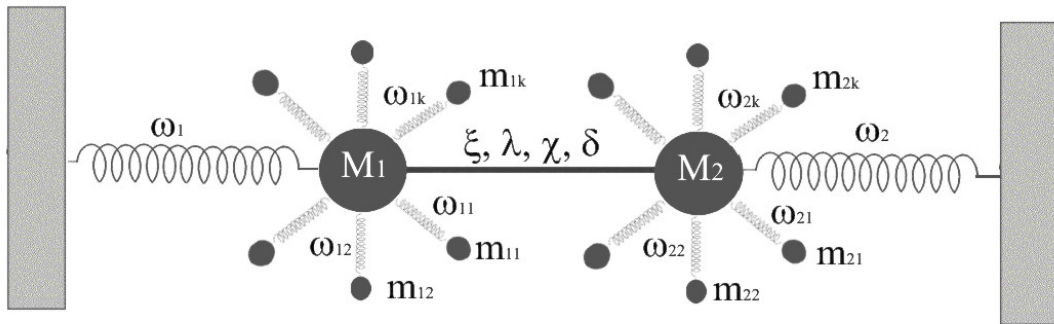


Figura 3.1: Modelo Duplicado de Caldeira & Leggett.

### 3.1.2 Formulação Quântica

À semelhança do Cap. 2, devemos obter a equação mestra para o operador densidade reduzido do sistema conjunto  $(S_1 + S_2)$ , constituído por ambos os osciladores harmônicos. Para isso, partimos do operador densidade para o sistema total, que se escreve na forma

$$\hat{\rho}_{S_1+R_1+S_2+R_2}(t) = \hat{U}(t, 0)\hat{\rho}_{S_1+R_1+S_2+R_2}(0)\hat{U}^\dagger(t, 0). \quad (3.6)$$

Com a relação de completeza

$$\iiint dx'_1 dx'_2 d\vec{R}'_1 d\vec{R}'_2 |x'_1, x'_2; \vec{R}'_1, \vec{R}'_2\rangle \langle x'_1, x'_2; \vec{R}'_1, \vec{R}'_2| = 1, \quad (3.7)$$

escrevemos o operador densidade em (3.6) na representação de coordenadas e, reconhecendo os propagadores, temos que

$$\begin{aligned} \langle x_1, x_2; \vec{R}_1, \vec{R}_2 | \hat{\rho}_{S_1+R_1+S_2+R_2}(t) | y_1, y_2; \vec{Q}_1, \vec{Q}_2 \rangle &= \int dx'_1 dx'_2 dy'_1 dy'_2 d\vec{R}'_1 d\vec{R}'_2 d\vec{Q}'_1 d\vec{Q}'_2 \\ &\times \langle x'_1, x'_2; \vec{R}'_1, \vec{R}'_2 | \hat{\rho}_{S_1+R_1+S_2+R_2}(0) | y'_1, y'_2; \vec{Q}'_1, \vec{Q}'_2 \rangle K(x_1, x_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2, t; x'_1, x'_2, \vec{R}'_1, \vec{R}'_2, 0) \\ &\times K^*(y_1, y_2, \vec{Q}_1, \vec{Q}_2, t; y'_1, y'_2, \vec{Q}'_1, \vec{Q}'_2, 0), \end{aligned} \quad (3.8)$$

onde o símbolo único de integração do lado direito da igualdade refere-se, de fato, às integrações realizadas nas coordenadas  $x'_1, x'_2, y'_1$  e  $y'_2$  do sistema conjunto  $(S_1 + S_2)$  e  $\vec{R}'_1, \vec{R}'_2, \vec{Q}'_1, \vec{Q}'_2$  dos reservatórios  $R_1$  e  $R_2$ .

Para observarmos somente o comportamento do sistema conjunto  $(S_1 + S_2)$ , vamos tomar o traço de  $\hat{\rho}_{S_1+R_1+S_2+R_2}(t)$  com respeito às variáveis dos reservatórios, de forma que

$$\hat{\rho}_{S_1+S_2}(t) = Tr_{R_1+R_2} \hat{\rho}_{S_1+R_1+S_2+R_2}(t) = \iint d\vec{R}_1 d\vec{R}_2 \langle \vec{R}_1, \vec{R}_2 | \hat{\rho}_{S_1+R_1+S_2+R_2}(t) | \vec{R}_1, \vec{R}_2 \rangle. \quad (3.9)$$

Assim, o elemento de matriz do operador densidade reduzido em (3.9) torna-se,



portanto,

$$\begin{aligned}
 \rho_{S_1+S_2}(x_1, x_2, y_1, y_2, t) &= \int dx'_1 dx'_2 dy'_1 dy'_2 d\vec{R}_1 d\vec{R}_2 d\vec{R}'_1 d\vec{R}'_2 d\vec{Q}'_1 d\vec{Q}'_2 \\
 &\times \langle x'_1, x'_2; \vec{R}'_1, \vec{R}'_2 | \hat{\rho}_{S_1+R_1+S_2+R_2}(0) | y'_1, y'_2; \vec{Q}'_1, \vec{Q}'_2 \rangle K(x_1, x_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2, t; x'_1, x'_2, \vec{R}'_1, \vec{R}'_2, 0) \\
 &\times K^*(y_1, y_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2, t; y'_1, y'_2, \vec{Q}'_1, \vec{Q}'_2, 0).
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Como no problema de Caldeira & Leggett, vamos considerar a aproximação de acoplamento súbito entre os osciladores e seus respectivos reservatórios e, em nosso problema, dos osciladores entre si. Assim, o elemento de matriz do operador densidade do sistema total ( $S_1 + S_2 + R_1 + R_2$ ) pode ser fatorado na seguinte forma

$$\begin{aligned}
 &\rho_{S_1+R_1+S_2+R_2}(x'_1, x'_2, \vec{R}'_1, \vec{R}'_2, y'_1, y'_2, \vec{Q}'_1, \vec{Q}'_2, 0) \\
 &= \rho_{S_1+S_2}(x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, 0) \rho_{R_1+R_2}(\vec{R}'_1, \vec{R}'_2, \vec{Q}'_1, \vec{Q}'_2, 0).
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Definindo o superpropagador que governa a evolução da matriz densidade reduzida do sistema conjunto ( $S_1 + S_2$ )

$$\begin{aligned}
 J(x_1, x_2, y_1, y_2, t; x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, 0) &= \int d\vec{R}_1 d\vec{R}_2 d\vec{R}'_1 d\vec{R}'_2 d\vec{Q}'_1 d\vec{Q}'_2 \\
 &\times \rho_{R_1+R_2}(\vec{R}'_1, \vec{R}'_2, \vec{Q}'_1, \vec{Q}'_2, 0) K(x_1, x_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2, t; x'_1, x'_2, \vec{R}'_1, \vec{R}'_2, 0) \\
 &\times K^*(y_1, y_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2, t; y'_1, y'_2, \vec{Q}'_1, \vec{Q}'_2, 0),
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

reescrevemos a expressão (3.10) na forma

$$\begin{aligned}
 \rho_{S_1+S_2}(x_1, x_2, y_1, y_2, t) &= \int dx'_1 dx'_2 dy'_1 dy'_2 J(x_1, x_2, y_1, y_2, t; x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, 0) \\
 &\times \rho_{S_1+S_2}(x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, 0).
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Em seguida, usando a representação de integrais funcionais para os

propagadores de Feynman, podemos reescrever o superpropagador como

$$\begin{aligned}
 J(x_1, x_2, y_1, y_2, t; x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, 0) &= \int_{x'_1}^{x_1} D_F x_1(t') \int_{x'_2}^{x_2} D_F x_2(t') \int_{y'_1}^{y_1} D_F y_1(t') \int_{y'_2}^{y_2} D_F y_2(t') \\
 &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ S_{S_1}[x_1(t')] + S_{S_2}[x_2(t')] - S_{S_1}[y_1(t')] - S_{S_2}[y_2(t')] \right. \right. \\
 &\left. \left. + S_{S_1 S_2}[x_1(t'), x_2(t')] - S_{S_1 S_2}[y_1(t'), y_2(t')] \right] \right\} F[x_1, x_2, y_1, y_2],
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

onde

$$F[x_1, x_2, y_1, y_2] = F[x_1, y_1] F[x_2, y_2] \tag{3.15}$$

é o funcional de influência dos osciladores dos reservatórios  $R_1$  e  $R_2$ , em que

$$\begin{aligned}
 F[x_j, y_j] &= \iiint d\vec{R}_j d\vec{R}'_j d\vec{Q}'_j \rho_{R_j}(\vec{R}'_j, \vec{Q}'_j, 0) \int_{\vec{R}'_j}^{\vec{R}_j} \int_{\vec{Q}'_j}^{\vec{Q}_j} D_F \vec{R}_j(t') D_F \vec{Q}_j(t') \\
 &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ S_{R_j}[\vec{R}_j(t')] - S_{R_j}[\vec{Q}_j(t')] + S_{S_j R_j}[x_j(t'), \vec{R}_j(t')] - S_{S_j R_j}[y_j(t'), \vec{Q}_j(t')] \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

é o funcional de influência devido à interação do  $j$ -ésimo sistema com o  $j$ -ésimo reservatório ( $j = 1, 2$ ).

O cálculo desse funcional de influência é idêntico àquele efetuado no Apêndice A. O resultado é, como vimos:

$$\begin{aligned}
 F[x_j, y_j] &= \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma [x_j(\tau) - y_j(\tau)] \alpha_{R_j}(\tau - \sigma) [x_j(\sigma) - y_j(\sigma)] \right\} \\
 &\times \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma [x_j(\tau) - y_j(\tau)] \alpha_{I_j}(\tau - \sigma) [x_j(\sigma) + y_j(\sigma)] \right\},
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

com:

$$\alpha_{R_j}(\tau - \sigma) = \sum_{k=1}^N \frac{C_{jk}^2}{2m_{jk}\omega_{jk}} \coth\left(\frac{\omega_{jk}\hbar\beta}{2}\right) \cos[\omega_{jk}(\tau - \sigma)], \tag{3.18}$$

e

$$\alpha_{I_j}(\tau - \sigma) = - \sum_{k=1}^N \frac{C_{jk}^2}{2m_{jk}\omega_{jk}} \sin[\omega_{jk}(\tau - \sigma)]. \tag{3.19}$$

Neste ponto, vamos fazer uso das densidades espectrais de modos dos reservatórios, idênticas àquelas do Capítulo 2, ou seja

$$J_j(\omega_j) = \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^N \frac{C_{jk}^2}{m_{jk}\omega_{jk}} \delta(\omega - \omega_{jk}) \tag{3.20}$$

e

$$J_j(\omega_j) = \begin{cases} \eta_j \omega_j, & \text{se } \omega_j < \Omega_j \\ 0, & \text{se } \omega_j > \Omega_j, \end{cases} \quad (3.21)$$

de forma a podermos escrever o superpropagador como:

$$\begin{aligned} J(x_1, x_2, y_1, y_2, t; x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, 0) &= \int_{x'_1}^{x_1} D_F x_1(t') \int_{x'_2}^{x_2} D_F x_2(t') \int_{y'_1}^{y_1} D_F y_1(t') \int_{y'_2}^{y_2} D_F y_2(t') \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ S_{S_1 S_2}[x_1(t'), x_2(t')] - S_{S_1 S_2}[y_1(t'), y_2(t')] \right] \right\} \\ &\times \prod_{j=1}^2 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \tilde{S}_{S_j}[x_j(t')] - \tilde{S}_{S_j}[y_j(t')] - \frac{\eta_j}{\pi} (x'_j + y'_j) \int_0^t d\tau \frac{\sin \Omega_j \tau}{\tau} [x_j(\tau) - y_j(\tau)] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\eta_j}{\pi} \int_0^t d\tau [x_j(\tau) - y_j(\tau)] \int_0^\tau d\sigma [\dot{x}_j(\sigma) - \dot{y}_j(\sigma)] \frac{\sin[\Omega_j(\tau - \sigma)]}{(\tau - \sigma)} \right] \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{-\eta_j}{\pi \hbar} \int_0^t d\tau [x_j(\tau) - y_j(\tau)] \int_0^\tau d\sigma [x_j(\sigma) - y_j(\sigma)] \int_0^{\Omega_j} d\omega_j \omega_j \coth\left(\frac{\omega_j \hbar \beta}{2}\right) \cos[\omega_j(\tau - \sigma)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde  $\tilde{S}_{S_j}$  representam as ações clássicas renormalizadas devido aos potenciais efetivos. Vamos, ainda, usar os resultados:

$$\int_{0^+}^t d\tau \frac{\sin[\Omega_j \tau]}{\pi \tau} [x_j(\tau) - y_j(\tau)] = 0 \quad (3.23)$$

e

$$\int_0^t d\tau [x_j(\tau) - y_j(\tau)] [\dot{x}_j(\tau) + \dot{y}_j(\tau)] = \frac{1}{2} [(x_j^2 - x_j'^2) - (y_j^2 - y_j'^2)] + \int_0^t d\tau [x_j(\tau) \dot{y}_j(\tau) - \dot{x}_j(\tau) y_j(\tau)], \quad (3.24)$$

com  $x_j = x_j(t)$ ,  $y_j = y_j(t)$ ,  $x'_j = x_j(0)$  e  $y'_j = y_j(0)$  e definir as constantes de relaxação, como no Apêndice B

$$\gamma_j = \frac{\eta_j}{2M_j} \quad (3.25)$$

e usar a seguinte denotação

$$f_j(x_j, x'_j; y_j, y'_j) = \frac{-\mu_j \gamma_j}{2} [(x_j^2 - x_j'^2) - (y_j^2 - y_j'^2)], \quad (3.26)$$

de maneira que o superpropagador pode ser finalmente escrito como

$$\begin{aligned}
 J(x_1, x_2, y_1, y_2, t; x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, 0) &= \int_{x'_1}^{x_1} D_F x_1(t') \int_{x'_2}^{x_2} D_F x_2(t') \int_{y'_1}^{y_1} D_F y_1(t') \int_{y'_2}^{y_2} D_F y_2(t') \\
 &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \tilde{S}_{S_1 S_2}[x_1(t'), x_2(t')] - \tilde{S}_{S_1 S_2}[y_j(t'), y_2(t')] \right] \right\} \prod_{j=1}^2 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ f_j(x_j, x'_j; y_j, y'_j) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \tilde{S}_{S_j}[x_j(t')] - \tilde{S}_{S_j}[y_j(t')] - \gamma_j \mu_j \int_0^t d\tau [x_j(\tau) \dot{y}_j(\tau) - y_j(\tau) \dot{x}_j(\tau)] \right] \right\} \\
 &\times \exp \left\{ \frac{-2\mu_j \gamma_j}{\pi \hbar} \int_0^t d\tau [x_j(\tau) - y_j(\tau)] \int_0^\tau d\sigma [x_j(\sigma) - y_j(\sigma)] \int_0^{\Omega_j} d\omega_j \omega_j \coth\left(\frac{\omega_j \hbar \beta}{2}\right) \cos[\omega_j(\tau - \sigma)] \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

Agora, vamos considerar o limite de altas temperaturas, onde temos

$$k_B T \gg \hbar \omega_j, \text{ para } \omega_j \ll \Omega_j, \tag{3.28}$$

de modo que o superpropagador (3.28) escreve-se:

$$\begin{aligned}
 J(x_1, x_2, y_1, y_2, t; x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, 0) &= \int_{x'_1}^{x_1} D_F x_1(t') \int_{x'_2}^{x_2} D_F x_2(t') \int_{y'_1}^{y_1} D_F y_1(t') \int_{y'_2}^{y_2} D_F y_2(t') \\
 &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \tilde{S}_{S_1 S_2}[x_1(t'), x_2(t')] - \tilde{S}_{S_1 S_2}[y_j(t'), y_2(t')] \right] \right\} \prod_{j=1}^2 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ f_j(x_j, x'_j; y_j, y'_j) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \tilde{S}_{S_j}[x_j(t')] - \tilde{S}_{S_j}[y_j(t')] - \gamma_j \mu_j \int_0^t d\tau [x_j(\tau) \dot{y}_j(\tau) - y_j(\tau) \dot{x}_j(\tau)] \right] \right\} \times \\
 &\quad \times \exp \left\{ \frac{-2\mu_j \gamma_j k_B T}{\hbar^2} \int_0^t d\tau [x_j(\tau) - y_j(\tau)]^2 \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

Nosso próximo passo será considerar o cálculo do superpropagador para um intervalo de tempo infinitesimal. Temos, denotando os potenciais efetivos como  $\tilde{V}_j(x_j)$ , efetuando a produtória e reagrupando os termos, além de usarmos as aproximações:

$$\dot{x}_j \approx \frac{x_j - x'_j}{\varepsilon}, \quad \dot{y}_j \approx \frac{y_j - y'_j}{\varepsilon} \quad e \quad \int_t^{t+\varepsilon} f(x_j(t')) dt' \approx \varepsilon f\left(\frac{x_j + x'_j}{2}\right), \tag{3.30}$$

com:

$$\begin{aligned}
 x_j &= x_j(t + \varepsilon) \quad e \quad y_j = y_j(t + \varepsilon) \\
 x'_j &= x_j(t) \quad e \quad y'_j = y_j(t),
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

que o superpropagador escreve-se na forma seguinte

$$\begin{aligned}
 J(x_1, x_2, y_1, y_2, t; x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, 0) = & \frac{1}{A} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\mu_1 \gamma_1}{2} [(x_1^2 - x'_1{}^2) - (y_1^2 - y'_1{}^2)] \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\mu_2 \gamma_2}{2} [(x_2^2 - x'_2{}^2) - (y_2^2 - y'_2{}^2)] \right] \right\} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\mu_1}{2\varepsilon} (x_1 - x'_1)^2 + \frac{\mu_2}{2\varepsilon} (x_2 - x'_2)^2 \right. \right. \\
 & - \frac{\mu_1}{2\varepsilon} (y_1 - y'_1)^2 - \frac{\mu_2}{2\varepsilon} (y_2 - y'_2)^2 - \varepsilon \tilde{V}_1 \left( \frac{x_1 + x'_1}{2} \right) - \varepsilon \tilde{V}_2 \left( \frac{x_2 + x'_2}{2} \right) + \varepsilon \tilde{V}_1 \left( \frac{y_1 + y'_1}{2} \right) \\
 & + \varepsilon \tilde{V}_2 \left( \frac{y_2 + y'_2}{2} \right) - \frac{\gamma_1 \mu_1}{2} (x_1 + x'_1)(y_1 - y'_1) + \frac{\gamma_1 \mu_1}{2} (x_1 - x'_1)(y_1 + y'_1) \\
 & - \frac{\gamma_2 \mu_2}{2} (x_2 + x'_2)(y_2 - y'_2) + \frac{\gamma_2 \mu_2}{2} (x_2 - x'_2)(y_2 + y'_2) - \frac{\xi \varepsilon}{4} (x_1 + x'_1)(x_2 + x'_2) \\
 & + \frac{\xi \varepsilon}{4} (y_1 + y'_1)(y_2 + y'_2) - \frac{\mu_1 \delta}{2} (x_1 - x'_1)(x_2 + x'_2) + \frac{\mu_1 \delta}{2} (y_1 - y'_1)(y_2 + y'_2) \\
 & - \frac{\mu_2 \chi}{2} (x_1 + x'_1)(x_2 - x'_2) + \frac{\mu_2 \chi}{2} (y_1 + y'_1)(y_2 - y'_2) + \frac{\mu_1 \delta^2 \varepsilon}{8} (x_2 + x'_2)^2 \\
 & - \frac{\mu_1 \delta^2 \varepsilon}{8} (y_2 + y'_2)^2 + \frac{\mu_2 \chi^2 \varepsilon}{8} (x_1 + x'_1)^2 - \frac{\mu_2 \chi^2 \varepsilon}{8} (y_1 + y'_1)^2 - \frac{\mu_{12}}{\varepsilon} (x_1 - x'_1)(x_2 - x'_2) \\
 & - \frac{\mu_{12}}{\varepsilon} (y_1 - y'_1)(y_2 - y'_2) + \frac{\mu_{12} \chi}{2} (x_1 - x'_1)(x_1 + x'_1) - \frac{\mu_{12} \chi}{2} (y_1 - y'_1)(y_1 + y'_1) \\
 & + \frac{\mu_{12} \delta}{2} (x_2 - x'_2)(x_2 + x'_2) - \frac{\mu_{12} \delta}{2} (y_2 - y'_2)(y_2 + y'_2) - \frac{\mu_{12} \delta \chi \varepsilon}{4} (x_1 + x'_1)(x_2 + x'_2) \\
 & \left. \left. + \frac{\mu_{12} \delta \chi \varepsilon}{4} (y_1 + y'_1)(y_2 + y'_2) \right] \right\} \exp \left\{ -\frac{\mu_1 \gamma_1 k_B T \varepsilon}{2 \hbar^2} [(x_1 + x'_1) - (y_1 + y'_1)]^2 \right. \\
 & \left. - \frac{\mu_2 \gamma_2 k_B T \varepsilon}{2 \hbar^2} [(x_2 + x'_2) - (y_2 + y'_2)]^2 \right\}. \tag{3.32}
 \end{aligned}$$

A equação que governa a evolução do operador densidade reduzido do sistema é, nesse caso:

$$\begin{aligned} \rho_{S_1+S_2}(x_1, x_2, y_1, y_2, t + \varepsilon) &= \iiint \iiint dx'_1 dx'_2 dy'_1 dy'_2 \rho_{S_1+S_2}(x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, t) \\ &\times J(x_1, x_2, y_1, y_2, t + \varepsilon; x'_1, x'_2, y'_1, y'_2, t) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Efetuando a mudança de variáveis

$$\beta_{1j} = x_j - x'_j \quad e \quad \beta_{2j} = y_j - y'_j \quad (3.34)$$

e considerando que

$$\beta_{1j} \approx \beta_{2j} \approx \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}}), \quad (3.35)$$

vamos fazer uma expansão em série de Taylor de todos os termos da Eq. (3.32), exceto aqueles proporcionais a  $\varepsilon^{-1}$  em  $\beta_{1j}$ ,  $\beta_{2j}$ ,  $t$  e  $\varepsilon$  até  $\mathcal{O}(\varepsilon)$ . Finalmente, vamos definir, novamente, novas variáveis

$$\beta'_{1j} = \beta_{1j} - \gamma_j(x_j - y_j)\varepsilon \quad e \quad \beta'_{2j} = \beta_{2j} + \gamma_j(x_j - y_j)\varepsilon, \quad (3.36)$$

de forma a obtermos a seguinte equação

$$\begin{aligned}
 \rho_{S_1+S_2} + \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial t} &= \frac{1}{A} \iiint d\beta'_{11} d\beta'_{12} d\beta'_{21} d\beta'_{22} \left[ \rho_{S_1+S_2} - \gamma_1(x_1 - y_1) \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} \right. \\
 &- \gamma_2(x_2 - y_2) \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} + \gamma_1(x_1 - y_1) \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} + \gamma_2(x_2 - y_2) \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} - \beta'_{11} \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} \\
 &- \beta'_{12} \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} - \beta'_{21} \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} - \beta'_{22} \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} + \frac{\beta'^2_{11}}{2} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1^2} + \frac{\beta'^2_{12}}{2} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2^2} \\
 &+ \frac{\beta'^2_{21}}{2} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1^2} + \frac{\beta'^2_{22}}{2} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2^2} + \beta'_{11} \beta'_{12} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1 \partial x_2} + \beta'_{11} \beta'_{21} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1 \partial y_1} + \beta'_{11} \beta'_{22} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1 \partial y_2} \\
 &+ \beta'_{12} \beta'_{21} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2 \partial y_1} + \beta'_{12} \beta'_{22} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2 \partial y_2} + \beta'_{21} \beta'_{22} \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1 \partial y_2} \left. \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \beta'^2_{11} \left( \frac{\mu_1 \gamma_1}{2} + \frac{\mu_1}{2\varepsilon} - \frac{\mu_{12} \chi}{2} \right) \right. \right. \\
 &+ \beta'^2_{12} \left( \frac{\mu_2 \gamma_2}{2} + \frac{\mu_2}{2\varepsilon} - \frac{\mu_{12} \delta}{2} \right) + \beta'^2_{21} \left( -\frac{\mu_1 \gamma_1}{2} - \frac{\mu_1}{2\varepsilon} + \frac{\mu_{12} \chi}{2} \right) + \beta'^2_{22} \left( -\frac{\mu_2 \gamma_2}{2} - \frac{\mu_2}{2\varepsilon} + \frac{\mu_{12} \delta}{2} \right) \\
 &+ \beta'_{11} [\mu_{12} \chi x_1 - \mu_1 \delta x_2 - \mu_{12} \gamma_2 (x_2 - y_2)] + \beta'_{12} [\mu_{12} \delta x_2 - \mu_2 \chi x_1 - \mu_{12} \gamma_1 (x_1 - y_1)] \\
 &+ \beta'_{21} [-\mu_{12} \chi y_1 + \mu_1 \delta y_2 - \mu_{12} \gamma_2 (x_2 - y_2)] + \beta'_{22} [-\mu_{12} \delta y_2 - \mu_2 \chi y_1 - \mu_{12} \gamma_1 (x_1 - y_1)] \\
 &+ \beta'_{11} \beta'_{12} \left( \frac{\mu_1 \delta}{2} + \frac{\mu_2 \chi}{2} - \frac{\mu_{12}}{\varepsilon} \right) + \beta'_{21} \beta'_{22} \left( \frac{-\mu_1 \delta}{2} - \frac{\mu_2 \chi}{2} + \frac{\mu_{12}}{\varepsilon} \right) + \varepsilon \left( -\tilde{V}_1(x_1) - \tilde{V}_2(x_2) \right. \\
 &+ \tilde{V}_1(y_1) + \tilde{V}_2(y_2) - (\xi + \mu_{12} \delta \chi) (x_1 x_2 - y_1 y_2) - \mu_1 \delta \gamma_1 x_2 (x_1 - y_1) + \frac{\mu_1 \delta^2}{2} x_2^2 \\
 &- \mu_1 \delta \gamma_1 y_2 (x_1 - y_1) - \frac{\mu_1 \delta^2}{2} y_2^2 - \mu_2 \chi \gamma_2 x_1 (x_2 - y_2) - \frac{\mu_2 \chi^2}{2} x_1^2 - \mu_2 \chi \gamma_2 y_1 (x_2 - y_2) \\
 &- \frac{\mu_2 \chi^2}{2} y_1^2 + \mu_{12} \chi \gamma_1 x_1 (x_1 - y_1) + \mu_{12} \delta \gamma_2 x_2 (x_2 - y_2) + \mu_{12} \chi \gamma_1 y_1 (x_1 - y_1) \\
 &\left. \left. + \mu_{12} \delta \gamma_2 y_2 (x_2 - y_2) \right) \right] \exp \left\{ \left[ -\frac{2\mu_1 \gamma_1 k_B T}{\hbar^2} (x_1 - y_1)^2 - \frac{2\mu_2 \gamma_2 k_B T}{\hbar^2} (x_2 - y_2)^2 \right] \varepsilon \right\}, \tag{3.37}
 \end{aligned}$$

onde:

$$\rho_{S_1+S_2} = \rho_{S_1+S_2}(x_1, x_2, y_1, y_2, t). \tag{3.38}$$

Vamos, agora, efetuar as integrações gaussianas em (3.37). Esse cálculo é muito trabalhoso e está apresentado no Apêndice C. Após isso, obtemos, finalmente, a equação mestra que rege a dinâmica do elemento de matriz do operador densidade reduzido do sistema:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial t} = & -\frac{\hbar}{2iM_1} \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1^2} \right] - \frac{i}{\hbar} [\tilde{V}_1(x_1) - \tilde{V}_1(y_1)] \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \tilde{\gamma}_1(x_1 - y_1) \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} \right] - \frac{2M_1 \tilde{\gamma}_1 k_B T}{\hbar^2} (x_1 - y_1)^2 \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \frac{\hbar}{2iM_2} \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2^2} \right] - \frac{i}{\hbar} [\tilde{V}_2(x_2) - \tilde{V}_2(y_2)] \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \tilde{\gamma}_2(x_2 - y_2) \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} \right] - \frac{2M_2 \tilde{\gamma}_2 k_B T}{\hbar^2} (x_2 - y_2)^2 \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \frac{i\xi}{\hbar} (x_1 x_2 - y_1 y_2) \rho_{S_1+S_2} - \frac{iM_1 \tilde{\gamma}_1 \delta}{\hbar} (x_1 - y_1)(x_2 + y_2) \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \frac{iM_2 \tilde{\gamma}_2 \delta}{\hbar} (x_1 + y_1)(x_2 - y_2) \rho_{S_1+S_2} - \chi \left[ y_1 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} + x_1 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} \right] \\
 & - \delta \left[ y_2 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} + x_2 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} \right] - \lambda M_1 \tilde{\gamma}_1 (x_1 - y_1) \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} \right] \\
 & - \lambda M_2 \tilde{\gamma}_2 (x_2 - y_2) \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} \right] + i\lambda \hbar \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1 \partial y_2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1 \partial x_2} \right],
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

onde:

$$\tilde{\gamma}_j = \frac{\gamma_j}{(1 - \lambda^2 M_1 M_2)}, \quad j = 1, 2 \tag{3.40}$$

é a constante de relaxação correspondente ao  $j$ -ésimo reservatório, modificada devido ao acoplamento. Assim, uma primeira consequência do acoplamento entre os dois sistemas  $S_1$  e  $S_2$  é que a maneira com que ambos dissipam energia para os reservatórios é modificada, como vemos em (3.40). A equação (3.39) pode ainda



ser escrita como uma equação de operadores

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{S_1}, \hat{\rho}_{S_1+S_2}] + \frac{\tilde{\gamma}_1}{i\hbar} [\hat{x}_1, \{\hat{p}_1, \hat{\rho}_{S_1+S_2}\}] - \frac{2M_1\tilde{\gamma}_1 k_B T}{\hbar^2} [\hat{x}_1, [\hat{x}_1, \hat{\rho}_{S_1+S_2}]] \\
 &+ \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{S_2}, \hat{\rho}_{S_1+S_2}] + \frac{\tilde{\gamma}_2}{i\hbar} [\hat{x}_2, \{\hat{p}_2, \hat{\rho}_{S_1+S_2}\}] - \frac{2M_2\tilde{\gamma}_2 k_B T}{\hbar^2} [\hat{x}_2, [\hat{x}_2, \hat{\rho}_{S_1+S_2}]] \\
 &+ \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{S_1 S_2}, \hat{\rho}_{S_1+S_2}] + \frac{\lambda M_1 \tilde{\gamma}_1}{i\hbar} [\hat{x}_1, \{\hat{p}_2, \hat{\rho}_{S_1+S_2}\}] + \frac{\lambda M_2 \tilde{\gamma}_2}{i\hbar} [\hat{x}_2, \{\hat{p}_1, \hat{\rho}_{S_1+S_2}\}] \\
 &+ \frac{M_1 \tilde{\gamma}_1 \delta}{i\hbar} ([\hat{x}_1, \hat{x}_2 \hat{\rho}_{S_1+S_2}] + [\hat{x}_1, \hat{\rho}_{S_1+S_2} \hat{x}_2]) + \frac{M_2 \tilde{\gamma}_2 \chi}{i\hbar} ([\hat{x}_2, \hat{x}_1 \hat{\rho}_{S_1+S_2}] + [\hat{x}_2, \hat{\rho}_{S_1+S_2} \hat{x}_1]),
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

onde:

$$\hat{H}_{S_j} = \frac{\hat{p}_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} M_j \omega_j^2 \hat{x}_j^2, \quad j = 1, 2 \tag{3.42}$$

e

$$\hat{H}_{S_1 S_2} = \xi \hat{x}_1 \hat{x}_2 + \lambda \hat{p}_1 \hat{p}_2 + \delta \hat{p}_1 \hat{x}_2 + \chi \hat{x}_1 \hat{p}_2. \tag{3.43}$$

Essa é, portanto a equação mestra que rege a dinâmica do sistema descrito por (3.3). Podemos ver que quando eliminamos o acoplamento, recuperamos dois sistemas de Caldeira & Leggett isolados.

## 3.2 O Processo de Dissipação de Energia no Modelo Duplicado de Caldeira & Leggett.

A fim de observarmos como as energias do sistema conjunto ( $S_1+S_2$ ) e dos sistemas individuais  $S_1$  e  $S_2$  se comportam, vamos fazer um cálculo qualitativo da energia média desses sistemas através do uso da equação mestra (3.42), da mesma forma que fizemos no Cap. 2.

Vamos considerar que os dois sistemas são osciladores harmônicos com frequências  $\omega_1$  e  $\omega_2$ , respectivamente. Depois de um pouco de álgebra, vemos que,

para um operador  $\hat{\mathcal{O}}$  vale a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle}{\partial t} &= \frac{1}{2i\hbar M_1} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{p}_1^2] \hat{\rho}_{S_1+S_2}) + \frac{M_1 \omega_1^2}{2i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_1^2] \hat{\rho}_{S_1+S_2}) \\
 &+ \frac{1}{2i\hbar M_2} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{p}_2^2] \hat{\rho}_{S_1+S_2}) + \frac{M_2 \omega_2^2}{2i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_2^2] \hat{\rho}_{S_1+S_2}) + \frac{\xi}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_1 \hat{x}_2] \hat{\rho}_{S_1+S_2}) \\
 &+ \frac{\lambda}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{p}_1 \hat{p}_2] \hat{\rho}_{S_1+S_2}) + \frac{\chi}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_1 \hat{p}_2] \hat{\rho}_{S_1+S_2}) + \frac{\delta}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_2 \hat{p}_1] \hat{\rho}_{S_1+S_2}) \\
 &+ \frac{\tilde{\gamma}_1}{2i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{p}_1 \hat{x}_1] + [\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_1 \hat{p}_1]) \hat{\rho}_{S_1+S_2} + \frac{\tilde{\gamma}_2}{2i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}}, \hat{p}_2 \hat{x}_2] + [\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_2 \hat{p}_2]) \hat{\rho}_{S_1+S_2} \\
 &+ \frac{\tilde{\gamma}_1}{i\hbar} \text{Tr}(\{\hat{p}_1 \hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_1\} - \{\hat{p}_1, \hat{x}_1 \hat{\mathcal{O}}\}) \hat{\rho}_{S_1+S_2} + \frac{\tilde{\gamma}_2}{i\hbar} \text{Tr}(\{\hat{p}_2 \hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_2\} - \{\hat{p}_2, \hat{x}_2 \hat{\mathcal{O}}\}) \hat{\rho}_{S_1+S_2} \\
 &- \frac{2M_1 \tilde{\gamma}_1 k_B T}{\hbar^2} \text{Tr}(\{\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_1^2\} - 2\hat{x}_1 \hat{\mathcal{O}} \hat{x}_1) \hat{\rho}_{S_1+S_2} - \frac{2M_2 \tilde{\gamma}_2 k_B T}{\hbar^2} \text{Tr}(\{\hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_2^2\} - 2\hat{x}_2 \hat{\mathcal{O}} \hat{x}_2) \hat{\rho}_{S_1+S_2} \\
 &+ \frac{\lambda M_1 \tilde{\gamma}_1}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}} \hat{p}_2, \hat{x}_1] + [\hat{p}_2 \hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_1]) \hat{\rho}_{S_1+S_2} + \frac{\lambda M_2 \tilde{\gamma}_2}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}} \hat{p}_1, \hat{x}_2] + [\hat{p}_1 \hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_2]) \hat{\rho}_{S_1+S_2} \\
 &+ \frac{\delta M_1 \tilde{\gamma}_1}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}} \hat{x}_2, \hat{x}_1] + [\hat{x}_2 \hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_1]) \hat{\rho}_{S_1+S_2} + \frac{\chi M_2 \tilde{\gamma}_2}{i\hbar} \text{Tr}([\hat{\mathcal{O}} \hat{x}_1, \hat{x}_2] + [\hat{x}_1 \hat{\mathcal{O}}, \hat{x}_2]) \hat{\rho}_{S_1+S_2}.
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

A energia média do sistema conjunto é dada por:

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \hat{p}_1^2 \rangle}{2M_1} + \frac{1}{2} M_1 \omega_1^2 \langle \hat{x}_1^2 \rangle + \frac{\langle \hat{p}_2^2 \rangle}{2M_2} + \frac{1}{2} M_2 \omega_2^2 \langle \hat{x}_2^2 \rangle + \xi \langle \hat{x}_1 \hat{x}_2 \rangle + \lambda \langle \hat{p}_1 \hat{p}_2 \rangle + \chi \langle \hat{x}_1 \hat{p}_2 \rangle + \delta \langle \hat{x}_2 \hat{p}_1 \rangle. \tag{3.45}$$

Agora, vamos fazer o cálculo da energia média do sistema conjunto e das energias médias dos sistemas  $S_1$  e  $S_2$ . Vamos considerar, para isto, que os sistemas e os reservatórios sejam iguais, ou seja:

$$M_1 = M_2 = M, \quad \omega_1 = \omega_2 = \omega, \quad \tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2 = \tilde{\gamma}. \tag{3.46}$$

Usando a Eq. (3.45), podemos calcular os vários valores médios de (3.46). Temos, depois de uma boa dose de álgebra de comutadores, o sistema de 12 equações diferenciais de primeira ordem acopladas:

$$\begin{aligned}
 \frac{da_1}{d\tilde{t}} &= -16\tilde{\beta}a_1 - r\tilde{\chi}a_6 - 8\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_6 - r\tilde{\xi}a_8 - 8\tilde{\delta}\tilde{\beta}a_8 - ra_9 + 8\tilde{\beta} \\
 \frac{da_2}{d\tilde{t}} &= -16\tilde{\beta}a_2 - r\tilde{\delta}a_6 - 8\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_6 - r\tilde{\xi}a_7 - 8\tilde{\chi}\tilde{\beta}a_7 - ra_{10} + 8\tilde{\beta} \\
 \frac{da_3}{d\tilde{t}} &= r\tilde{\delta}a_5 + r\tilde{\lambda}a_7 + ra_9 \\
 \frac{da_4}{d\tilde{t}} &= r\tilde{\chi}a_5 + r\tilde{\lambda}a_8 + ra_{10} \\
 \frac{da_5}{d\tilde{t}} &= \frac{r\tilde{\chi}}{2}a_3 + \frac{r\tilde{\delta}}{2}a_4 + ra_7 + ra_8 + \frac{r\tilde{\lambda}}{2}a_{11} \\
 \frac{da_6}{d\tilde{t}} &= -r\frac{\tilde{\delta}}{2}a_1 - 4\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_1 - r\frac{\tilde{\chi}}{2}a_2 - 4\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_2 - 16\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_6 - ra_7 - ra_8 - 2\tilde{\delta}\tilde{\beta}a_{10} \\
 &\quad - r\frac{\tilde{\xi}}{2}a_{11} - 2\tilde{\chi}\tilde{\beta}a_{11} \\
 \frac{da_7}{d\tilde{t}} &= r\frac{\tilde{\lambda}}{2}a_2 - r\frac{\tilde{\xi}}{2}a_3 - 4\tilde{\chi}\tilde{\beta}a_3 - ra_5 + ra_6 - 8\tilde{\beta}a_7 - 2\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_9 - r\frac{\tilde{\delta}}{2}a_{12} \\
 \frac{da_8}{d\tilde{t}} &= r\frac{\tilde{\lambda}}{2}a_1 - r\frac{\tilde{\xi}}{2}a_4 - 4\tilde{\delta}\tilde{\beta}a_4 - ra_5 + ra_6 - 8\tilde{\beta}a_8 - 2\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_{10} - r\frac{\tilde{\chi}}{2}a_{12} \\
 \frac{da_9}{d\tilde{t}} &= 2ra_1 - 2ra_3 - r\tilde{\xi}a_5 - 8\tilde{\delta}\tilde{\beta}a_5 + r\tilde{\lambda}a_6 - r\tilde{\chi}a_7 - 8\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_7 + r\tilde{\delta}a_8 - 8\tilde{\beta}a_9 \\
 \frac{da_{10}}{d\tilde{t}} &= 2ra_2 - 2ra_4 - r\tilde{\xi}a_5 - 8\tilde{\delta}\tilde{\beta}a_5 + r\tilde{\lambda}a_6 - r\tilde{\delta}a_8 - 8\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_8 + r\tilde{\chi}a_7 - 8\tilde{\beta}a_{10} \\
 \frac{da_{11}}{d\tilde{t}} &= ra_1 + ra_2 - ra_3 - ra_4 - r\tilde{\xi}a_5 - 4\tilde{\delta}\tilde{\beta}a_5 - 4\tilde{\chi}\tilde{\beta}a_5 + r\tilde{\lambda}a_6 - 4\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_7 \\
 &\quad + 4\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_8 - 4\tilde{\beta}a_9 \\
 \frac{da_{12}}{d\tilde{t}} &= ra_1 - ra_2 - ra_3 + ra_4 - r\tilde{\chi}a_7 - 4\tilde{\delta}\tilde{\beta}a_5 + 4\tilde{\chi}\tilde{\beta}a_5 + r\tilde{\delta}a_8 - 4\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_7 \\
 &\quad + 4\tilde{\lambda}\tilde{\beta}a_8 - 4\tilde{\beta}a_9 + 4\tilde{\beta}a_{10},
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

onde:

$$\tilde{\xi} = \frac{2\xi}{M\omega^2}, \quad \tilde{\lambda} = 2\lambda M, \quad \tilde{\chi} = \frac{2\chi}{\omega} \quad e \quad \tilde{\delta} = \frac{2\delta}{\omega} \tag{3.48}$$

e ainda:

$$\begin{aligned}
 a_1 &= \langle \hat{p}_1^2 \rangle, \quad a_2 = \langle \hat{p}_2^2 \rangle, \quad a_3 = \langle \hat{x}_1^2 \rangle, \quad a_4 = \langle \hat{x}_2^2 \rangle \\
 a_5 &= \langle \hat{x}_1 \hat{x}_2 \rangle, \quad a_6 = \langle \hat{p}_1 \hat{p}_2 \rangle, \quad a_7 = \langle \hat{x}_1 \hat{p}_2 \rangle, \quad a_8 = \langle \hat{x}_2 \hat{p}_1 \rangle \\
 a_9 &= \langle \hat{x}_1 \hat{p}_1 + \hat{p}_1 \hat{x}_1 \rangle, \quad a_{10} = \langle \hat{x}_2 \hat{p}_2 + \hat{p}_2 \hat{x}_2 \rangle, \quad a_{11} = \langle \hat{x}_2 \hat{p}_2 + \hat{p}_1 \hat{x}_1 \rangle \\
 a_{12} &= \langle \hat{x}_1 \hat{p}_1 - \hat{x}_2 \hat{p}_2 \rangle, \quad \tilde{\beta} = \frac{1}{4 - \tilde{\lambda}^2}, \quad r = \frac{\omega}{\gamma},
 \end{aligned} \tag{3.49}$$

onde fizemos uma mudança na escala de energia, para que todos os parâmetros tornem-se adimensionais, como no Cap. 2

$$\tilde{E} = \frac{E}{k_B T}, \quad \hat{p}_j^2 = \frac{\hat{p}_j^2}{2Mk_B T}, \quad \hat{x}_j^2 = \frac{M\omega^2 \hat{x}_j^2}{2k_B T}, \tag{3.50}$$

de forma que a energia total renormalizada se escreve:

$$\langle \tilde{E} \rangle = \langle \hat{p}_1^2 \rangle + \langle \hat{x}_1^2 \rangle + \langle \hat{p}_2^2 \rangle + \langle \hat{x}_2^2 \rangle + \tilde{\xi} \langle \hat{x}_1 \hat{x}_2 \rangle + \tilde{\lambda} \langle \hat{p}_1 \hat{p}_2 \rangle + \tilde{\chi} \langle \hat{x}_1 \hat{p}_2 \rangle + \tilde{\delta} \langle \hat{x}_2 \hat{p}_1 \rangle. \tag{3.51}$$

Agora, vamos considerar que em  $t = 0$ , os sistemas estejam em estados iniciais tais que as funções de onda normalizadas sejam da forma:

$$\Psi_1(x_1) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{[2\delta_1(1 + e^{-\frac{q^2}{\delta_1^2}})]^{\frac{1}{2}}} \left[ e^{-\frac{(x_1+q)^2}{2\delta_1^2}} + e^{-\frac{(x_1-q)^2}{2\delta_1^2}} \right], \tag{3.52}$$

e

$$\Psi_2(x_2) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \delta_2^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{x_2^2}{2\delta_2^2}}, \tag{3.53}$$

de forma a encontrarmos as condições iniciais do problema:

$$\langle \hat{p}_1^2 \rangle_{t=0} = \left( \frac{\hbar^2}{2Mk_B T} \right) \left\{ \frac{1}{2\delta_1^2} - \frac{q^2 \exp(-\frac{q^2}{\delta_1^2})}{\delta_1^4 [1 + \exp(-\frac{q^2}{\delta_1^2})]} \right\}, \tag{3.54}$$

$$\langle \hat{x}_1^2 \rangle_{t=0} = \left( \frac{M\omega^2}{2k_B T} \right) \left\{ \frac{\delta_1^2}{2} + \frac{q^2}{[1 + \exp(-\frac{q^2}{\delta_1^2})]} \right\}, \tag{3.55}$$

$$\langle \hat{p}_2^2 \rangle_{t=0} = \frac{\hbar^2}{4Mk_B T \delta_2^2}, \tag{3.56}$$

$$\langle \hat{x}_2^2 \rangle_{t=0} = \frac{M\omega^2\delta_2^2}{4k_B T}, \quad (3.57)$$

$$\langle \hat{x}_1 \hat{x}_2 \rangle_{t=0} = \langle \hat{p}_1 \hat{p}_2 \rangle_{t=0} = \langle \hat{x}_1 \hat{p}_2 \rangle_{t=0} = \langle \hat{x}_2 \hat{p}_1 \rangle_{t=0} = 0 \quad (3.58)$$

e

$$\langle \hat{x}_1 \hat{p}_1 + \hat{p}_1 \hat{x}_1 \rangle_{t=0} = \langle \hat{x}_2 \hat{p}_2 + \hat{p}_2 \hat{x}_2 \rangle_{t=0} = \langle \hat{x}_2 \hat{p}_2 + \hat{p}_1 \hat{x}_1 \rangle_{t=0} = \langle \hat{x}_1 \hat{p}_1 - \hat{x}_2 \hat{p}_2 \rangle_{t=0} = 0. \quad (3.59)$$

Através da resolução numérica do conjunto de equações diferenciais acopladas em (3.47), analisamos, a seguir, os processos de troca de energia entre os sistemas individuais  $S_1$  e  $S_2$  e de dissipação de energia destes para seus respectivos reservatórios. Acompanhamos, nos próximos gráficos, a evolução das quantidades físicas  $E_{S_1+S_2}/k_B T$ ,  $E_{S_1}/k_B T$  e  $E_{S_2}/k_B T$  contra  $\gamma t$ , para a separação  $q = 10$  entre as gaussianas e para alguns valores de  $\tilde{\xi}$ ,  $\tilde{\lambda}$ ,  $\tilde{\chi}$  e  $\tilde{\delta}$ , em que  $E_{S_1+S_2}$  indica a energia do sistema conjunto  $S_1 + S_2$  enquanto que  $E_{S_1}$  e  $E_{S_2}$  indicam as energias dos sistemas  $S_1$  e  $S_2$ , respectivamente. Aqui, também estamos assumindo valores unitários para as quantidades  $\hbar$ ,  $M$ ,  $\omega$ ,  $\delta_1$  e  $\delta_2$  e  $k_B T = 10\hbar\omega$ .

Primeiramente, vamos considerar que os sistemas  $S_1$  e  $S_2$  estejam desacoplados, ou seja,  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 0$ . Na ausência de acoplamento, o gráfico representado na figura (3.2) mostra-nos a evolução livre de ambos os sistemas  $S_1$  e  $S_2$  em direção ao equilíbrio térmico com seus respectivos reservatórios. Esse equilíbrio é caracterizado pela energia média de cada oscilador do reservatório, de acordo com a Eq. (2.106), que para as quantidades definidas acima, fornece  $\tilde{E}_{eq} \sim 1$ .

Analisamos também a influência de cada termo do acoplamento separadamente. Para o caso em que  $\tilde{\xi} \neq 0$ , com  $\tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 0$ , temos os gráficos que seguem representados nas Figs. (3.3) e (3.4). Notamos que os sistemas  $S_1$  e  $S_2$  passam a trocar energia entre si, à medida que evoluem para o equilíbrio com seus respectivos reservatórios. Conforme esperado, à medida que aumentamos o valor da constante de acoplamento  $\tilde{\xi}$ , os sistemas  $S_1$  e  $S_2$  passam a trocar energia

com uma frequência maior.

Nos casos em que  $\tilde{\lambda} \neq 0$  (com  $\tilde{\xi} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 0$ ) e  $\tilde{\chi} \neq 0$  (com  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\delta} = 0$ ), cujos gráficos encontram-se nas Figs. (3.5), (3.6), (3.7) e (3.8), observamos comportamentos similares àqueles das Figs. (3.3) e (3.4). Notamos apenas que no caso do acoplamento  $\hat{x}_1\hat{p}_2$  das Figs. (3.7) e (3.8), a frequência de troca de energia é intensificada ainda que consideremos a intensidade do acoplamento igual aos casos anteriores, ou seja,  $\tilde{\chi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\xi} = 10^{-2}$ . Deixamos de apresentar os gráficos para o caso  $\tilde{\delta} = 0$  (com  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = 0$ ) dado que são exatamente iguais àqueles das Figs. (3.7) e (3.8).

Analizamos também o caso em que os termos de acoplamento atuam dois a dois. Para o caso em que  $\tilde{\xi} \neq 0$  e  $\tilde{\lambda} \neq 0$  com  $\tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 0$ , temos os gráficos apresentados nas Figs. (3.9), (3.10) e (3.11). Na Fig. (3.9), consideramos o caso em que  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda}$ . Observamos que a frequência de troca de energia entre os osciladores é duplicada com relação aos casos  $\tilde{\xi} \neq 0$  (com  $\tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 0$ ) e  $\tilde{\lambda} \neq 0$  (com  $\tilde{\xi} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 0$ ). Este comportamento deve-se ao fato de que a intensidade do acoplamento efetivo entre os osciladores é também duplicado, quando consideramos  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda}$ . Nas Figs. (3.10) e (3.11), que para  $\tilde{\xi} \gg \tilde{\lambda}$  ou  $\tilde{\xi} \ll \tilde{\lambda}$ , recuperamos, conforme esperado, os casos mostrados nas Figs. (3.4) e (3.6). Temos, ainda, o caso em que  $\tilde{\chi} \neq 0$  e  $\tilde{\delta} \neq 0$  e  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = 0$ , cujos gráficos encontram-se nas Figs.(3.12), (3.13) e (3.14). Observamos na Fig. (3.12) que a situação em que  $\tilde{\chi} = \tilde{\delta}$  não há troca de energia entre os sistemas  $S_1$  e  $S_2$ . A dinâmica desses sistemas em direção ao equilíbrio termodinâmico dá-se como se os mesmos estivessem desacoplados. Para uma melhor compreensão desse comportamento, é conveniente escrevermos o acoplamento  $\hat{x}_1\hat{p}_2 + \hat{p}_1\hat{x}_2$  através dos operadores  $\hat{a}_1^\dagger(\hat{a}_1)$  e  $\hat{a}_2^\dagger(\hat{a}_2)$  de criação (aniquilação) de um quanta de vibração. Através das expressões  $\hat{x}_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j)$  e  $\hat{p}_j = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j)$ ,  $j = 1, 2$ , obtemos

$$\tilde{\chi}\hat{x}_1\hat{p}_2 + \tilde{\delta}\hat{p}_1\hat{x}_2 = \frac{i}{2}[(\tilde{\chi} + \tilde{\delta})(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_1\hat{a}_2) + (\tilde{\chi} - \tilde{\delta})(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2 - \hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger)] \quad (3.60)$$

Para o caso  $\tilde{\chi} = \tilde{\delta}$ , ficamos apenas com a interação entre os osciladores da forma

$\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_1 \hat{a}_2$ . Esta interação indica que ambos os osciladores perdem (ganham) simultaneamente um quanta de vibração para seus respectivos reservatórios. Não se observa, portanto, a troca de energia entre os osciladores, que decorre do termo  $\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger$ .

Finalmente, nos resta estudar o caso em que todos os termos de acoplamento aparecem, ou seja,  $\tilde{\xi}, \tilde{\lambda}, \tilde{\chi}, \tilde{\delta} \neq 0$ , para o qual temos os gráficos representados nas Figs. (3.15) e (3.16). Observamos que a frequência de troca de energia no gráfico da Fig. (3.15) é novamente duplicada, como no caso  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda}$  ( $\tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 0$ ) da Fig. (3.9). Escrevendo a interação  $\tilde{\xi} \hat{x}_1 \hat{x}_2 + \tilde{\lambda} \hat{p}_1 \hat{p}_2 + \tilde{\delta} \hat{p}_1 \hat{x}_2 + \tilde{\chi} \hat{x}_1 \hat{p}_2$  em termos dos operadores  $\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_j$ , com  $j = 1, 2$ , obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\xi} \hat{x}_1 \hat{x}_2 + \tilde{\lambda} \hat{p}_1 \hat{p}_2 + \tilde{\delta} \hat{p}_1 \hat{x}_2 + \tilde{\chi} \hat{x}_1 \hat{p}_2 = & \frac{1}{2} \left\{ [\tilde{\xi} - \tilde{\lambda} + i(\tilde{\chi} + \tilde{\delta})] (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_1 \hat{a}_2) \right. \\ & \left. + (\tilde{\xi} + \tilde{\lambda}) (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger) + i(\tilde{\chi} - \tilde{\delta}) (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger) \right\}, \end{aligned} \quad (3.61)$$

da qual podemos constatar que no caso em que  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta}$ , a intensidade do acoplamento é igualmente duplicada com relação aos casos  $\tilde{\xi} \neq 0$  (com  $\tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 0$ ) e  $\tilde{\lambda} \neq 0$  (com  $\tilde{\xi} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 0$ ).

Nas Figs. (3.16) e (3.17), apresentamos os gráficos para os casos em que  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 10^{-2}$  e  $\tilde{\xi} = \tilde{\chi} = 10^{-2}$  e  $\tilde{\lambda} = \tilde{\delta} = 10^{-3}$ .

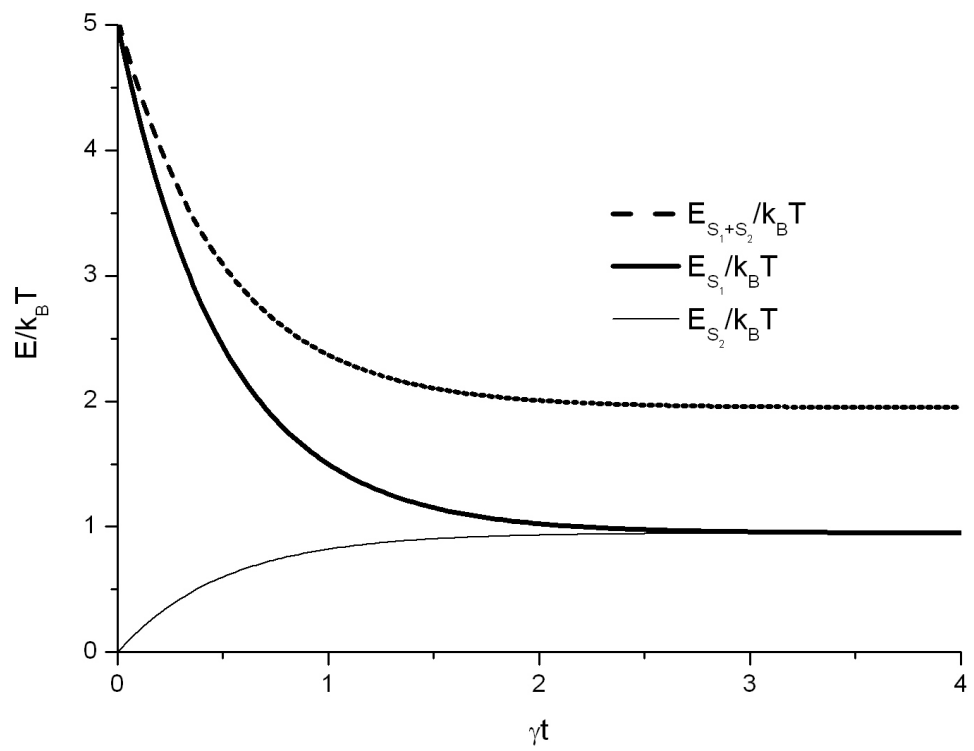


Figura 3.2: Energias para  $q = 10$



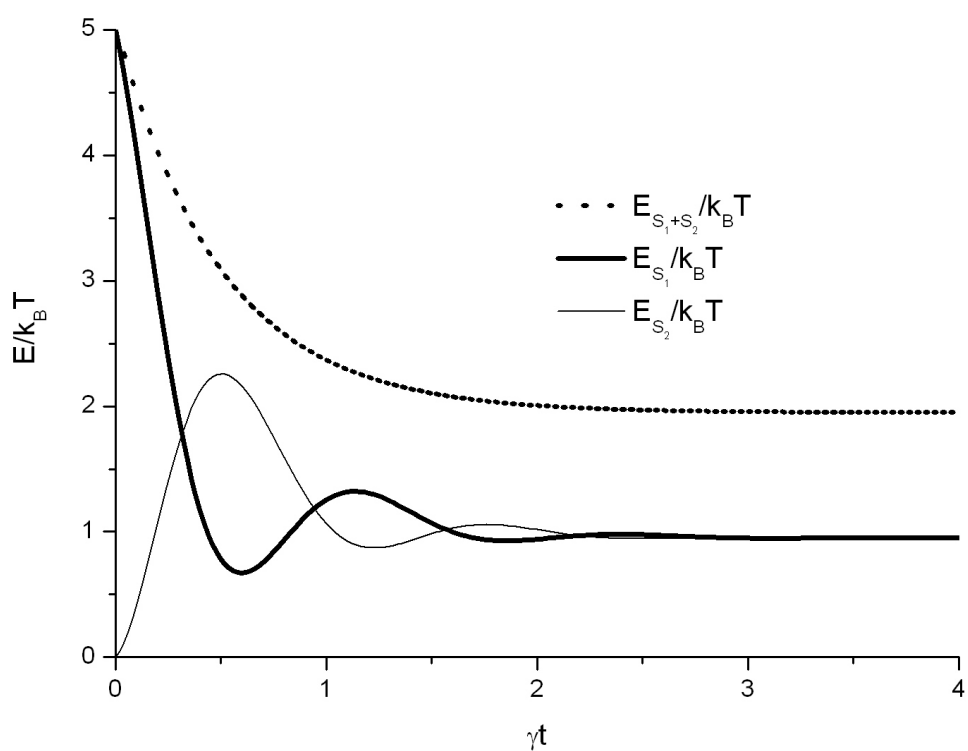


Figura 3.3: Energias para  $q = 10$  e  $\tilde{\xi} = 10^{-3}$

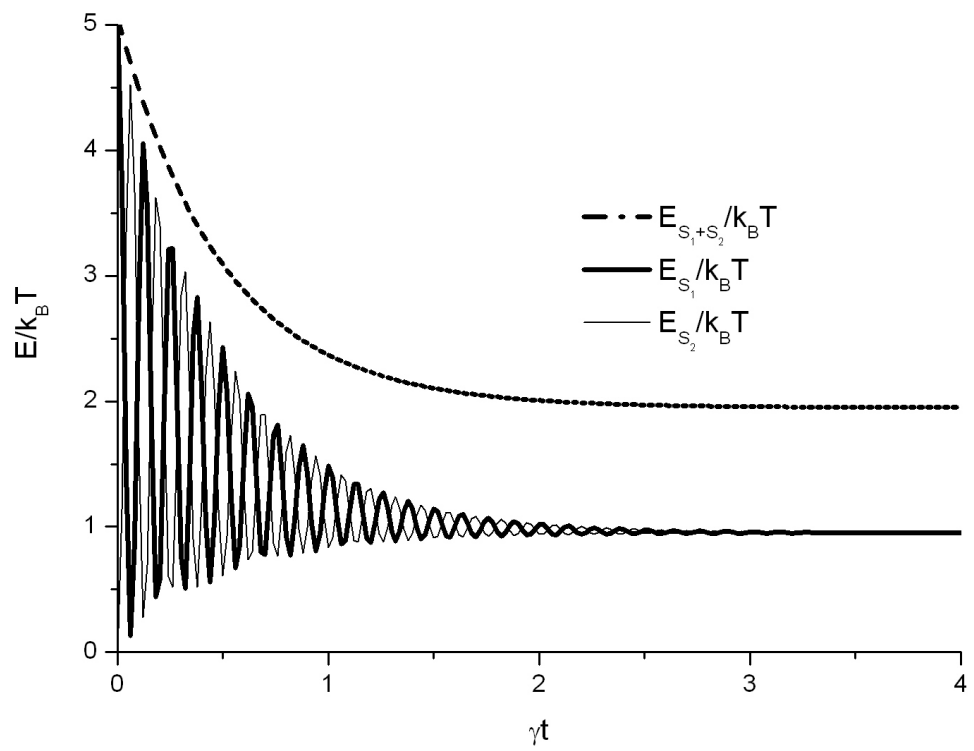


Figura 3.4: Energias para  $q = 10$  e  $\tilde{\xi} = 10^{-2}$

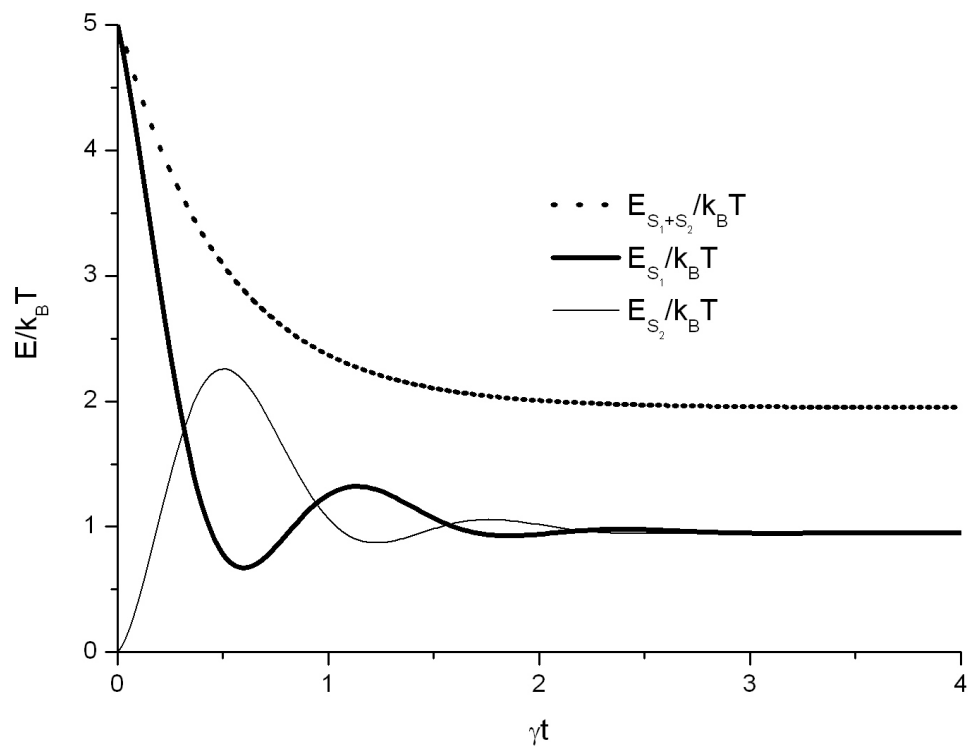


Figura 3.5: Energias para  $q = 10$  e  $\tilde{\lambda} = 10^{-3}$

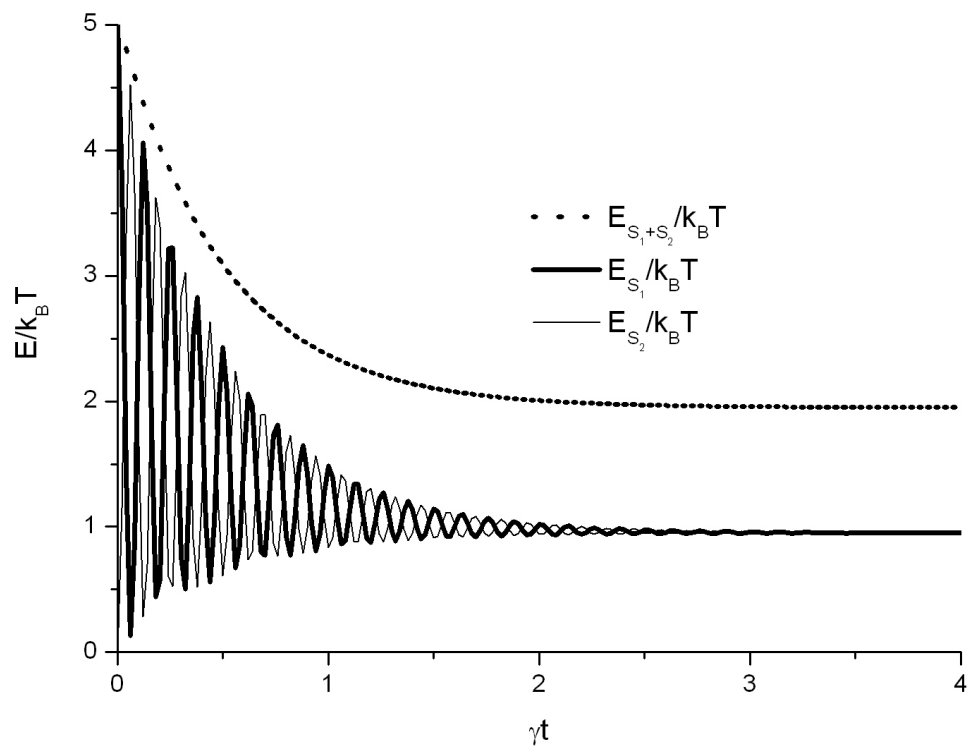


Figura 3.6: Energias para  $q = 10$  e  $\tilde{\lambda} = 10^{-2}$

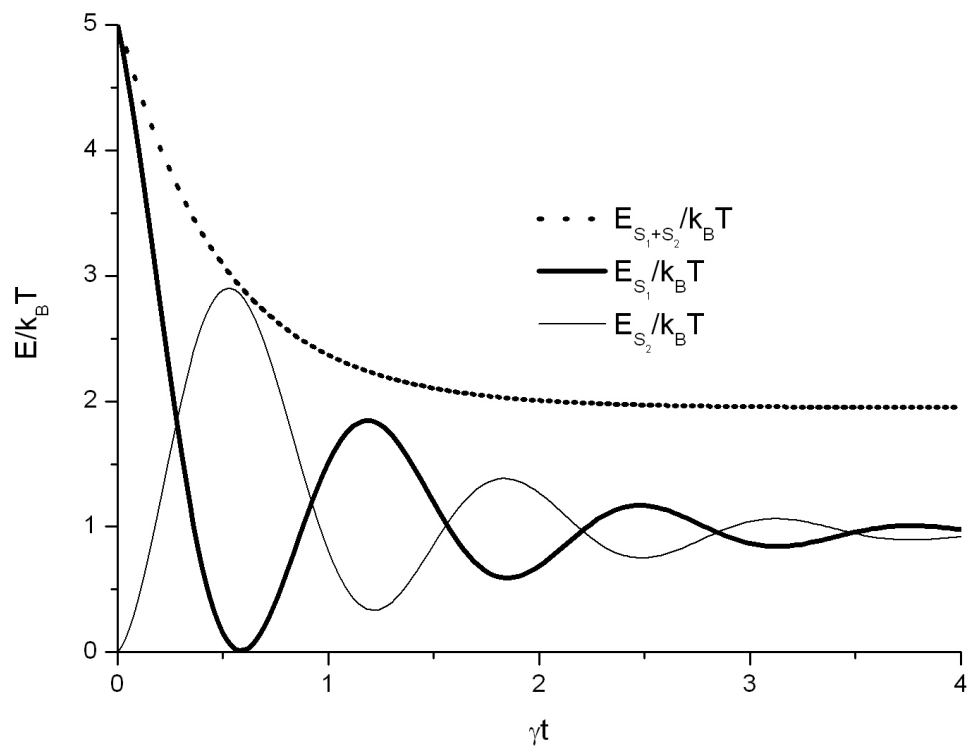


Figura 3.7: Energias para  $q = 10$  e  $\tilde{\chi} = 10^{-3}$

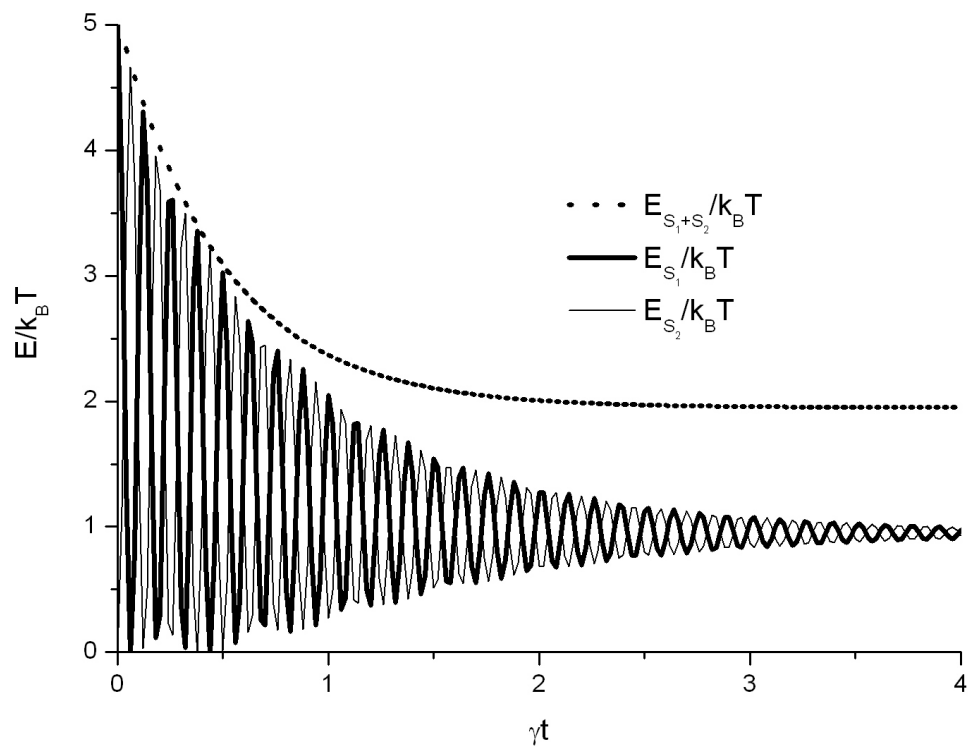


Figura 3.8: Energias para  $q = 10$  e  $\tilde{\chi} = 10^{-2}$

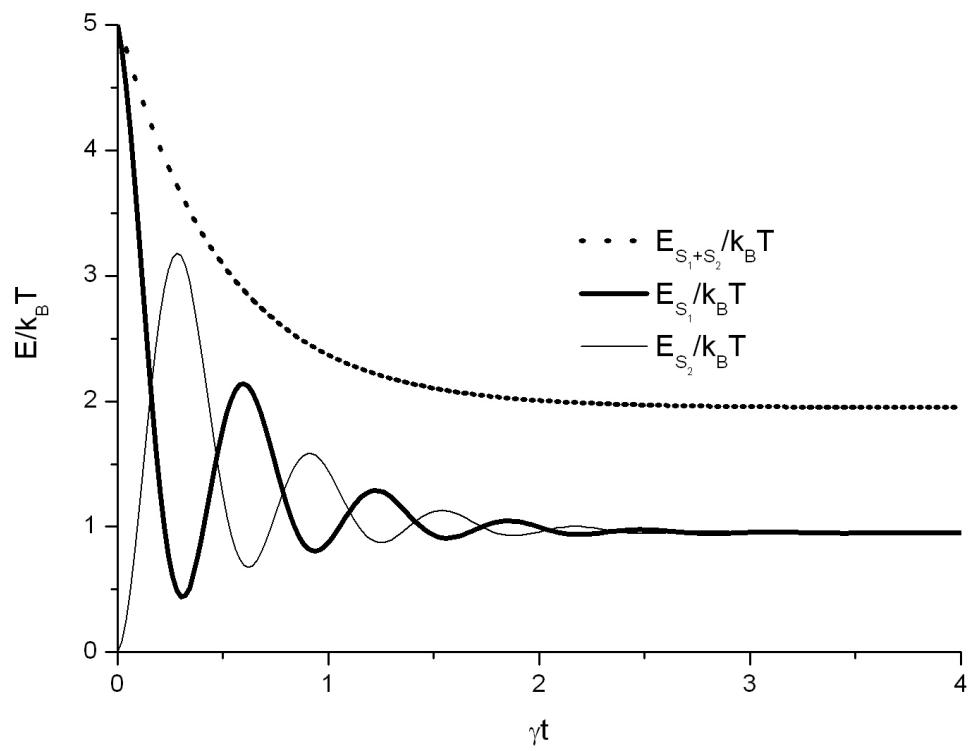


Figura 3.9: Energias para  $q = 10$  e  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = 10^{-3}$

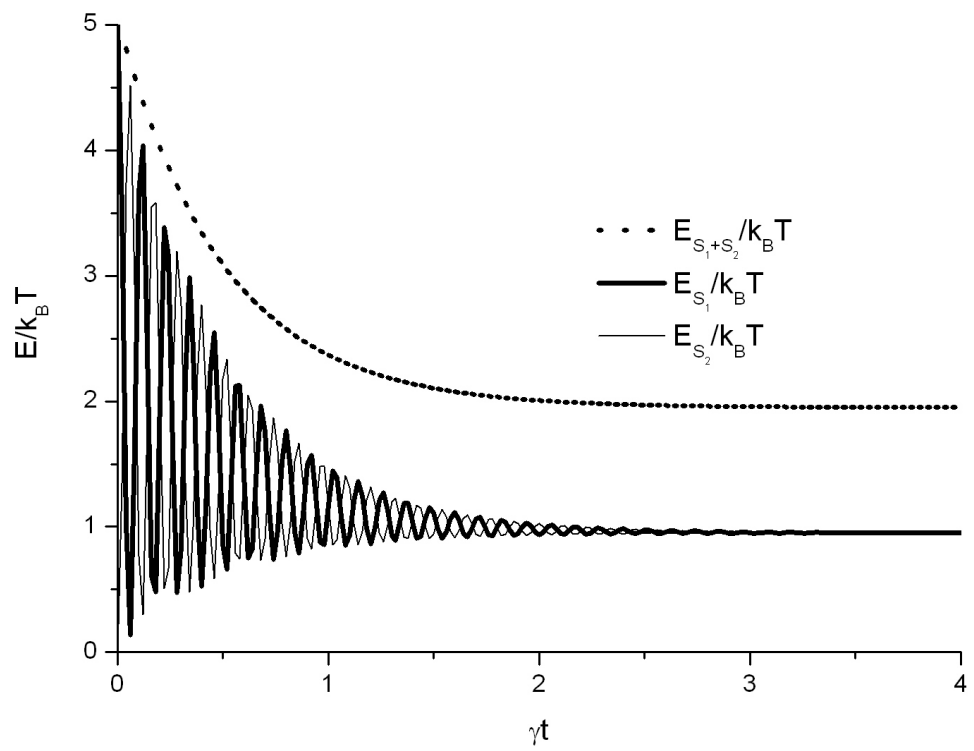


Figura 3.10: Energias para  $q = 10$ ,  $\tilde{\xi} = 10^{-2}$  e  $\tilde{\lambda} = 10^{-3}$



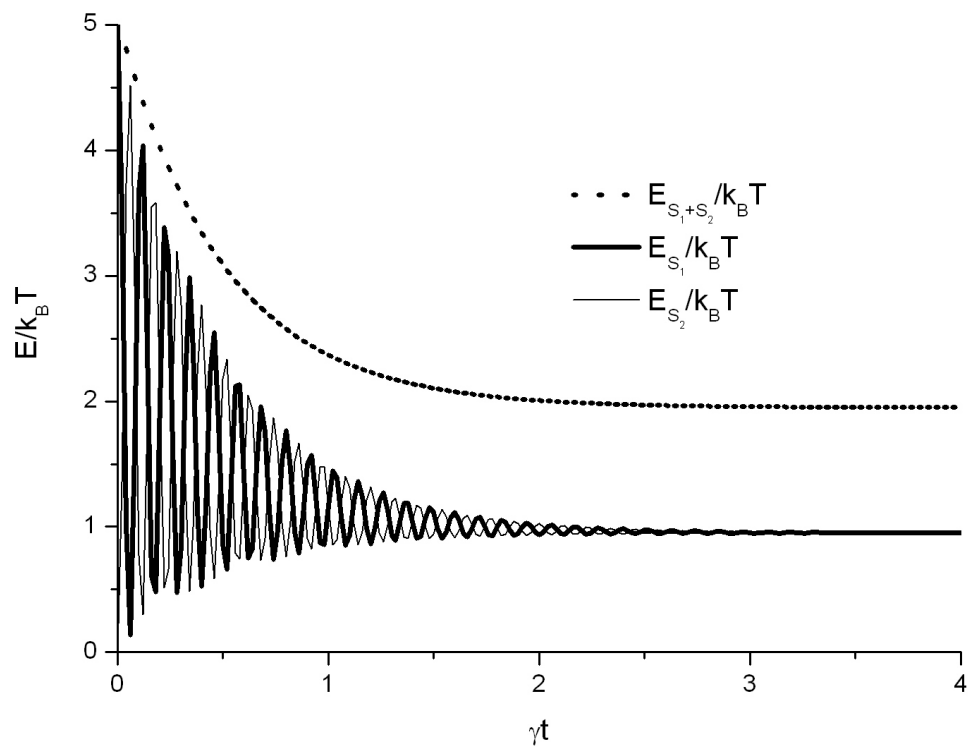


Figura 3.11: Energias para  $q = 10$ ,  $\tilde{\xi} = 10^{-3}$  e  $\tilde{\lambda} = 10^{-2}$

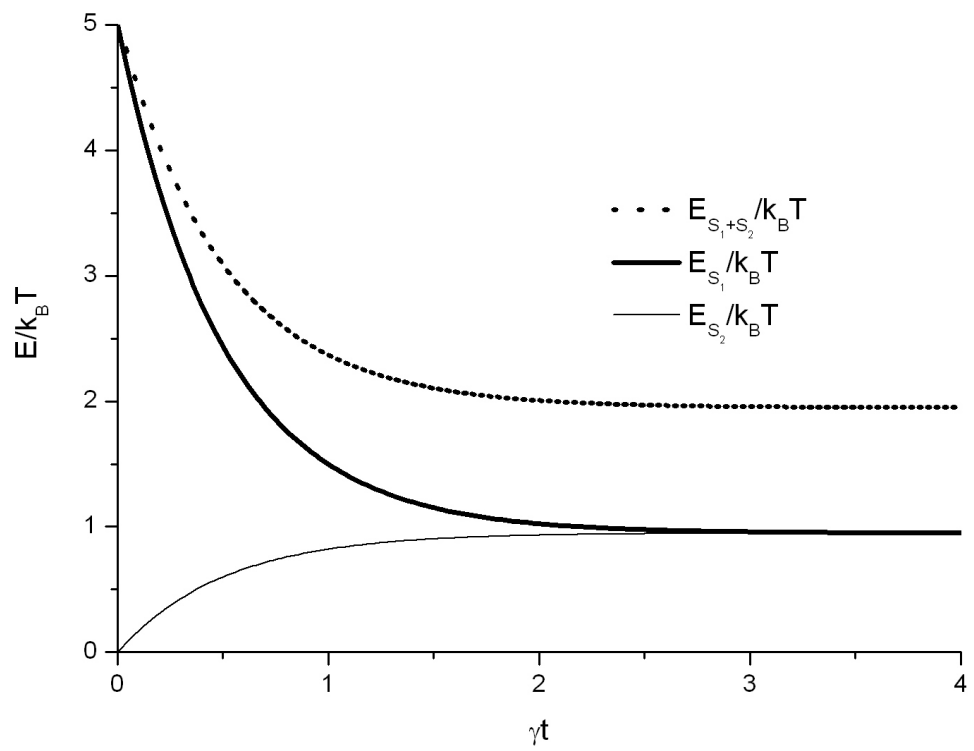


Figura 3.12: Energias para  $q = 10$  e  $\tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 10^{-3}$

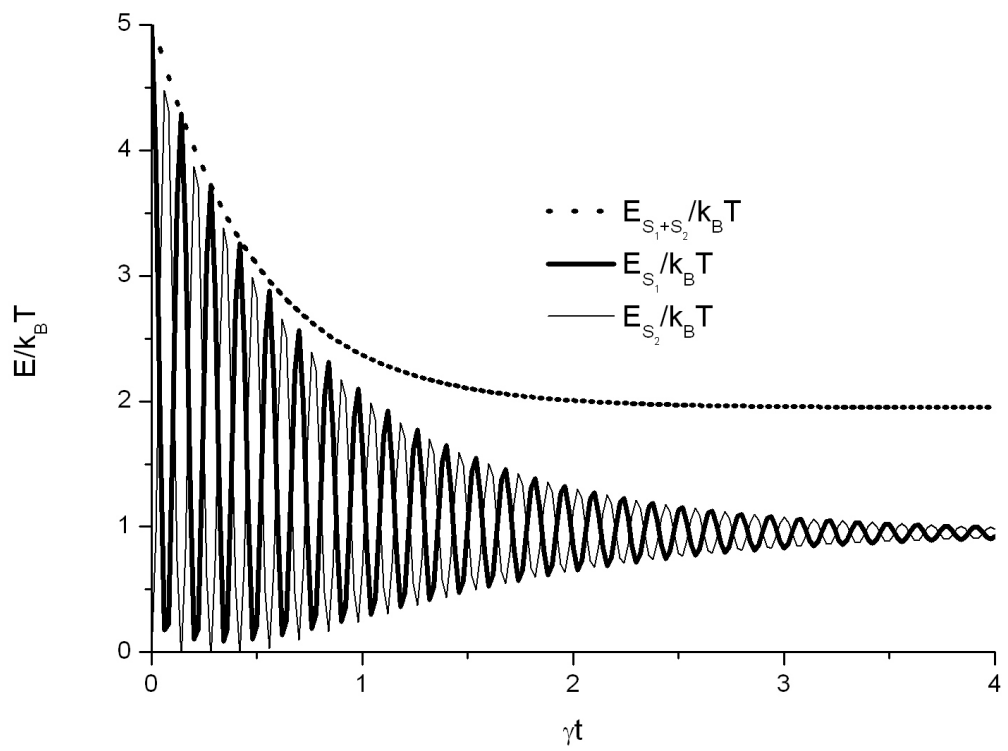


Figura 3.13: Energias para  $q = 10$ ,  $\tilde{\chi} = 10^{-2}$  e  $\tilde{\delta} = 10^{-3}$

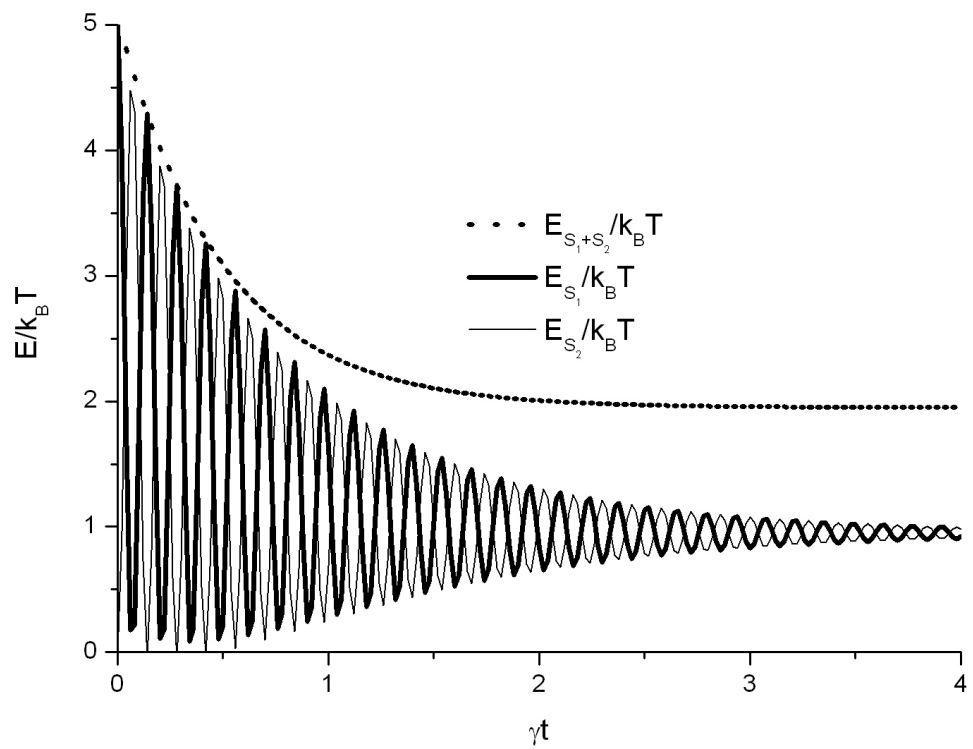


Figura 3.14: Energias para  $q = 10$ ,  $\tilde{\chi} = 10^{-3}$  e  $\tilde{\delta} = 10^{-2}$

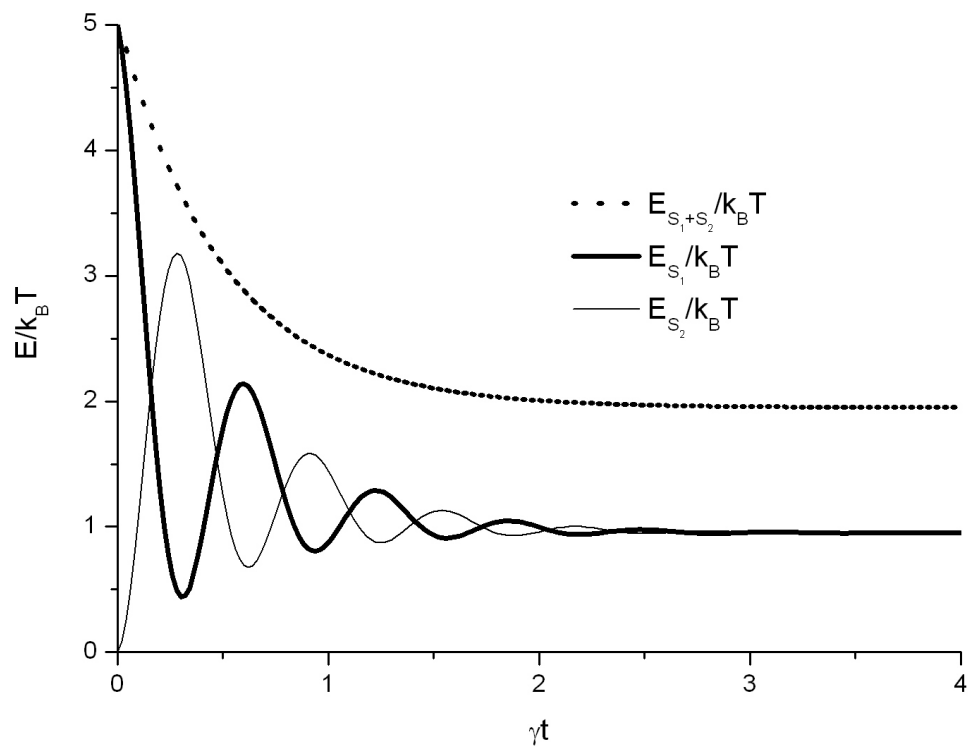


Figura 3.15: Energias para  $q = 10$ ,  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 10^{-3}$

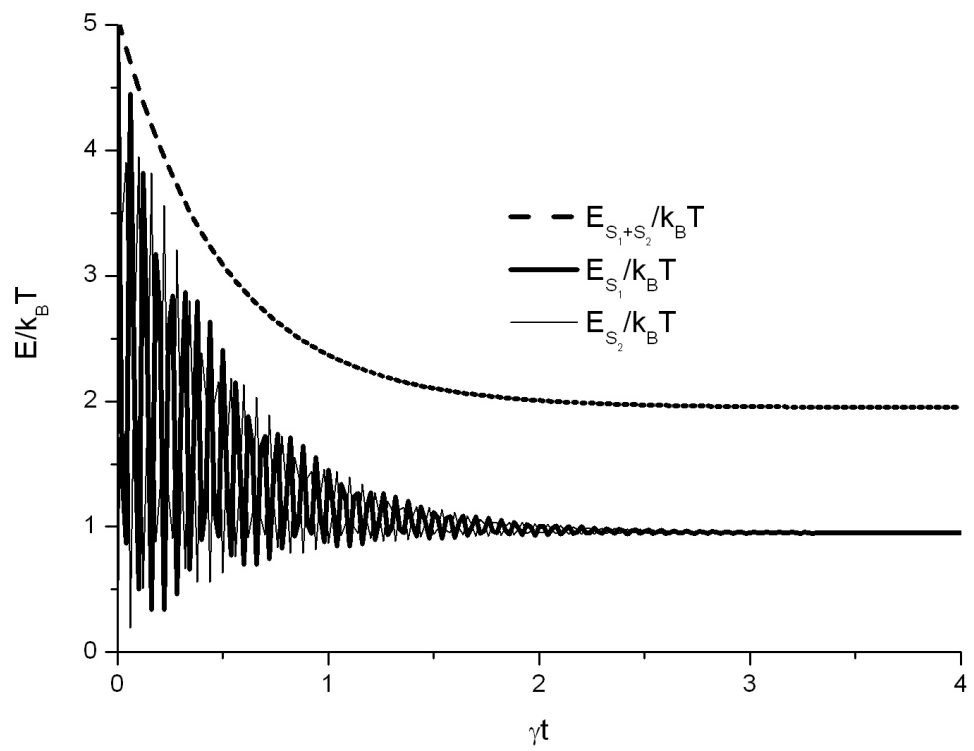


Figura 3.16: Energias para  $q = 10$ ,  $\tilde{\xi} = \tilde{\lambda} = \tilde{\chi} = \tilde{\delta} = 10^{-2}$

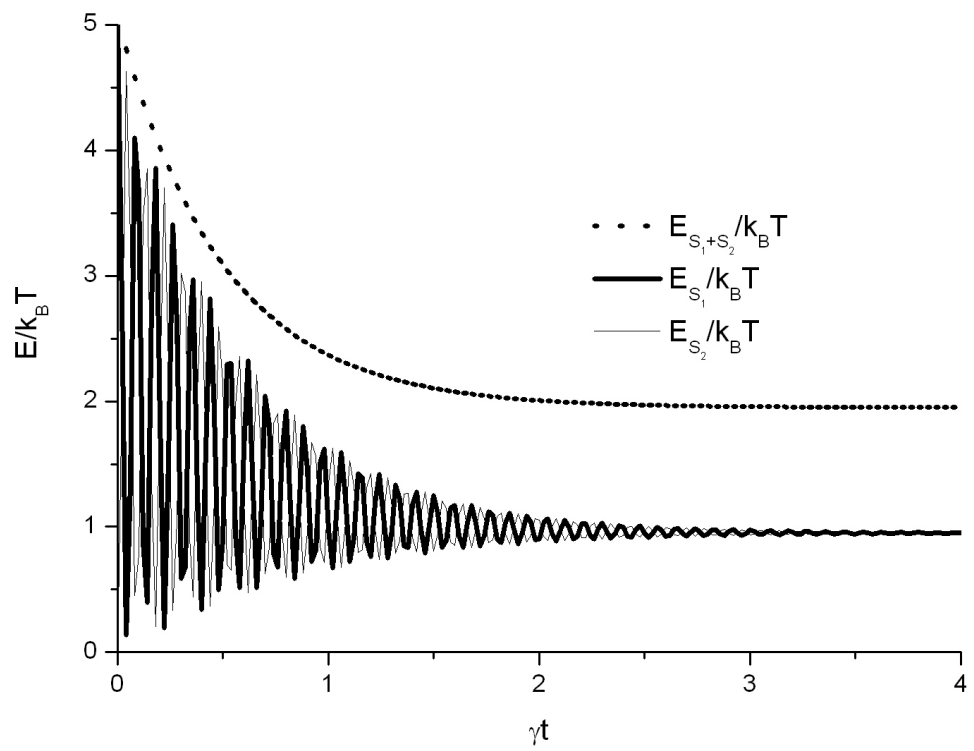


Figura 3.17: Energias para  $q = 10$ ,  $\tilde{\xi} = \tilde{\chi} = 10^{-2}$  e  $\tilde{\lambda} = \tilde{\delta} = 10^{-3}$

# Capítulo 4

## Conclusões

Neste trabalho, abordamos o problema de troca e dissipação de energia num sistema composto por dois osciladores harmônicos interagentes, cada qual acoplado a um reservatório térmico. Utilizamos, para isto, o formalismo de integrais de trajetória, segundo o modelo de Caldeira & Leggett.

Obtivemos, primeiramente, a equação de evolução do operador densidade reduzido do sistema composto por ambos os osciladores e, por meio desta equação, escrevemos um conjunto de equações diferenciais acopladas que descreve os processos de troca de energia entre os osciladores e relaxação dos mesmos. Observamos que a simples análise destes processos de troca e dissipação de energia não é capaz de revelar as diferentes interações consideradas entre os osciladores. De fato, observamos que diferentes interações, como por exemplo,  $x_1x_2$  e  $p_1p_2$ , resultam na mesma dinâmica de troca e dissipação de energia. Observamos também que o acoplamento  $x_1p_2 + p_1x_2$  não altera a dinâmica de equilíbrio de ambos os osciladores, como se estes estivessem efetivamente desacoplados.

Para um aprofundamento desta análise, devemos, em seguida, estudar os processos de transferência e recorrência de estados entre os osciladores. Neste caso, esperamos revelar plenamente os efeitos das interações entre os osciladores nas fases dos estados em suas evoluções dinâmicas.

Devemos, também, analisar os efeitos da dinâmica de transferência e



recorrência de estados no processo de decoerência desses estados. Resultados anteriores [14, 17, 18], que se utilizam de aproximações perturbativas para o tratamento da dissipação de energia, revelam que estas dinâmicas podem atuar no sentido de retardar o processo de decoerência.

# Apêndice A

## Cálculo do Funcional de Influência

Vimos no Cap. 2, que o funcional de influência dos osciladores do reservatório é dado pela seguinte expressão

$$F[x, y] = \iiint d\vec{R}d\vec{R}'d\vec{Q}' \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} \int_{\vec{Q}'}^{\vec{R}} D_F \vec{R}(t') D_F \vec{Q}(t') \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ S_R[\vec{R}(t')] - S_R[\vec{Q}(t')] + S_I[x(t'), \vec{R}(t')] - S_I[y(t'), \vec{Q}(t')] \right] \right\}, \quad (\text{A.1})$$

onde  $S_R[\vec{R}(t')]$  e  $S_I[x(t'), \vec{R}(t')]$  são as ações correspondentes ao reservatório e à interação entre o sistema e o reservatório, respectivamente.

Vamos calcular, neste apêndice, o funcional de influência para a Lagrangeana de interesse (2.8), que pode ser escrita como segue

$$L = \frac{1}{2} M \dot{x}^2 - V_0(x) + \sum_{k=1}^N \left[ \frac{1}{2} m_k \dot{R}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 R_k^2 \right] - \sum_{k=1}^N C_k x R_k, \quad (\text{A.2})$$

de forma que temos

$$\begin{aligned} & \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D_F \vec{R}(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ S_R[\vec{R}(t')] + S_I[x(t'), \vec{R}(t')] \right] \right\} \\ &= \int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D_F \vec{R}(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \int_0^t dt' \sum_{k=1}^N \left( \frac{1}{2} m_k \dot{R}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 R_k^2 \right) - \sum_{k=1}^N C_k x(t') R_k \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Mas a expressão para o propagador de Feynman do k-ésimo oscilador harmônico do reservatório sujeito à uma força  $-C_k x(t)$  é dada como segue

$$K_{R+I}^{(k)}(R_k, t; R'_k, 0; [x(t')]) = \int_{R'_k}^{R_k} D_F R_k(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[ \frac{1}{2} m_k \dot{R}_k^2 - \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 R_k^2 - C_k x(t') R_k \right] \right\}, \quad (\text{A.4})$$

de forma que a expressão (A.3) pode ser escrita como

$$\int_{\vec{R}'}^{\vec{R}} D_F \vec{R}(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ S_R[\vec{R}(t')] + S_I[x(t'), \vec{R}(t')] \right] \right\} = \prod_{k=1}^N K_{R+I}^{(k)}(R_k, t; R'_k, 0; [x(t')]). \quad (\text{A.5})$$

Com estas considerações, podemos reescrever o funcional de influência na seguinte forma

$$F[x, y] = \iiint d\vec{R} d\vec{R}' d\vec{Q}' \rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) \prod_{k=1}^N K_{R+I}^{(k)}(R_k, t; R'_k, 0; [x(t')]) \times K_{R+I}^{(k)*}(R_k, t; Q'_k, 0; [y(t')]). \quad (\text{A.6})$$

Nesse ponto, vamos fazer uma observação física. Vamos considerar que em  $t = 0$  o reservatório esteja em equilíbrio térmico a uma temperatura  $T$ . Isto nos permite fatorar a matriz densidade do reservatório na seguinte maneira [20]

$$\rho_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) = \prod_{k=1}^N \rho_R^{(k)}(R'_k, Q'_k, 0), \quad (\text{A.7})$$

de modo que o funcional de influência possa ser escrito como

$$F[x, y] = \iiint \prod_{k=1}^N dR_k dR'_k dQ'_k \rho_R^{(k)}(R'_k, Q'_k, 0) K_{R+I}^{(k)}(R_k, t; R'_k, 0; [x(t')]) \times K_{R+I}^{(k)*}(R_k, t; Q'_k, 0; [y(t')]). \quad (\text{A.8})$$

Mas, como vimos, o propagador  $K_{R+I}^{(k)}(R_k, t; R'_k, 0; [x(t')])$  nada mais é que o propagador do k-ésimo oscilador harmônico do reservatório quando sujeito a uma força  $-C_k x(t)$ . O resultado para esse propagador é bem conhecido [26], e

é dado pela seguinte expressão

$$\begin{aligned}
 K_{R+I}^{(k)}(R_k, t; R'_k, 0; [x(t')]) &= \sqrt{\frac{m_k \omega_k}{2\pi i \hbar \sin(\omega_k t)}} \exp \left\{ \frac{i m_k \omega_k}{2 \hbar \sin(\omega_k t)} \left[ (R_k^2 + R_k'^2) \cos(\omega_k t) \right. \right. \\
 &\quad - 2 R_k R_k' - \frac{2 R_k' C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t dt' x(t') \sin[\omega_k(t-t')] - \frac{2 R_k C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t dt' x(t') \sin(\omega_k t') \\
 &\quad \left. \left. - \frac{2 C_k^2}{(m_k \omega_k)^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' x(t') x(t'') \sin(\omega_k t'') \sin[\omega_k(t-t')] \right] \right\}, \tag{A.9}
 \end{aligned}$$

e, analogamente,

$$\begin{aligned}
 K_{R+I}^{(k)*}(R_k, t; Q'_k, 0; [y(t')]) &= \sqrt{\frac{-m_k \omega_k}{2\pi i \hbar \sin(\omega_k t)}} \exp \left\{ \frac{-i m_k \omega_k}{2 \hbar \sin(\omega_k t)} \left[ (R_k^2 + Q_k'^2) \cos(\omega_k t) \right. \right. \\
 &\quad - 2 R_k Q_k' - \frac{2 Q_k' C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t dt' y(t') \sin[\omega_k(t-t')] - \frac{2 R_k C_k}{m_k \omega_k} \int_0^t dt' y(t') \sin(\omega_k t') \\
 &\quad \left. \left. - \frac{2 C_k^2}{(m_k \omega_k)^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' y(t') y(t'') \sin(\omega_k t'') \sin[\omega_k(t-t')] \right] \right\}. \tag{A.10}
 \end{aligned}$$

Ainda temos que a matriz densidade para o k-ésimo oscilador do reservatório é dada por [31]

$$\begin{aligned}
 \rho_R^{(k)}(R'_k, Q'_k, 0) &= 2 \sinh\left(\frac{\omega_k \hbar \beta}{2}\right) \sqrt{\frac{m_k \omega_k}{2\pi \hbar \sinh(\omega_k \hbar \beta)}} \\
 &\times \exp \left\{ \frac{-m_k \omega_k}{2 \hbar \sinh(\omega_k \hbar \beta)} \left[ (R_k'^2 + Q_k'^2) \cosh(\omega_k \hbar \beta) - 2 R_k' Q_k' \right] \right\}. \tag{A.11}
 \end{aligned}$$

Vamos calcular o funcional de influência para o k-ésimo oscilador do reservatório, que pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
 \tilde{F}[x, y] &= \iiint dR_k dR'_k dQ'_k \rho_R^{(k)}(R'_k, Q'_k, 0) K_{R+I}^{(k)}(R_k, t; R'_k, 0; [x(t')]) \\
 &\quad \times K_{R+I}^{(k)*}(R_k, t; Q'_k, 0; [y(t')]), \tag{A.12}
 \end{aligned}$$

de forma que, para todos os osciladores do reservatório, temos

$$F[x, y] = \prod_{k=1}^N \tilde{F}[x, y]. \tag{A.13}$$

Substituindo as relações (A.9), (A.10) e (A.11) na expressão (A.12) e fazendo as seguintes denotações

$$A = \left( \frac{m_k \omega_k}{\pi \hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sinh\left(\frac{\omega_k \hbar \beta}{2}\right)}{\sin(\omega_k t) \sqrt{2 \sinh(\omega_k \hbar \beta)}}, \quad (\text{A.14})$$

$$B = -\frac{m_k \omega_k}{2\hbar} \coth(\omega_k \hbar \beta), \quad (\text{A.15})$$

$$C = \frac{m_k \omega_k}{\hbar \sinh(\omega_k \hbar \beta)}, \quad (\text{A.16})$$

$$D = \frac{i m_k \omega_k}{2\hbar} \cot(\omega_k t), \quad (\text{A.17})$$

$$E = \frac{i m_k \omega_k}{\hbar \sin(\omega_k t)}, \quad (\text{A.18})$$

$$F = \frac{-i C_k}{\hbar \sin(\omega_k t)} \int_0^t dt' x(t') \sin[\omega_k(t - t')], \quad (\text{A.19})$$

$$G = \frac{-i C_k}{\hbar \sin(\omega_k t)} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \sin(\omega_k t'), \quad (\text{A.20})$$

$$H = \frac{-i C_k}{\hbar \sin(\omega_k t)} \int_0^t dt' y(t') \sin[\omega_k(t - t')], \quad (\text{A.21})$$

e

$$I = \frac{i C_k^2}{\hbar m_k \omega_k \sin(\omega_k t)} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sin(\omega_k t'') \sin[\omega_k(t - t')] [x(t')x(t'') - y(t')y(t'')], \quad (\text{A.22})$$

temos que o funcional de influência para o  $k$ -ésimo oscilador harmônico do reservatório pode ser escrito na forma seguinte

$$\begin{aligned} \tilde{F}[x, y] = & A \iiint dR_k dR'_k dQ'_k \exp \left[ (B+D)R_k^2 + (B-D)Q'_k{}^2 \right. \\ & \left. + CR'_k Q'_k - ER_k R'_k + ER_k Q'_k + FR'_k + GR_k - HQ'_k - I \right], \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

que consiste de integrais gaussianas que podem ser calculadas lembrando-se da fórmula da integral de Fresnel, dada a seguir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{-a}} e^{-\frac{b^2}{4a}}. \quad (\text{A.24})$$

Assim, após longos cálculos e usando as definições

$$J = B + D + \frac{C^2}{4(D-B)}, \quad (\text{A.25})$$

$$K = E \left[ \frac{C}{2(D-B)} - 1 \right], \quad (\text{A.26})$$

$$L = F - \frac{CH}{2(D-B)}, \quad (\text{A.27})$$

$$M = G - \frac{EH}{2(D-B)}, \quad (\text{A.28})$$

$$N = \frac{E^2}{4(D-B)}, \quad (\text{A.29})$$

$$P = N - \frac{K^2}{4J}, \quad (\text{A.30})$$

e

$$Q = M - \frac{KL}{2J}, \quad (\text{A.31})$$

podemos denotar o funcional de influência como

$$\tilde{F}[x, y] = \frac{A\pi^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{JP(D-B)}} \exp \left[ -I + \frac{H^2}{4(D-B)} - \frac{L^2}{4J} - \frac{Q^2}{4P} \right] \quad (\text{A.32})$$

e mostrar que

$$\frac{A\pi^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{JP(D-B)}} = 1, \quad (\text{A.33})$$

e também

$$\tilde{F}[x, y] = \exp \left\{ \frac{1}{4E^2(2B+C)} \left[ -4IE^2(2B+C) - E^2(H^2+F^2) - 4G^2(D^2-B^2) \right. \right. \\ \left. \left. - G^2C^2 + 2ECG(F+H) + 4EDG(H-F) + 4EBG(H+F) + 2E^2HF \right] \right\}. \quad (\text{A.34})$$

Agora, usando as definições (A.15) a (A.22) e as várias relações trigonométricas e hiperbólicas existentes, podemos mostrar que

$$4E^2(2B+C) = \frac{4m_k^3\omega_k^3}{\hbar^3 \sin^2(\omega_k t)} \tanh\left(\frac{\omega_k \hbar \beta}{2}\right), \quad (\text{A.35})$$

$$E^2(H^2+F^2) = \frac{m_k^2\omega_k^2 C_k^2}{\hbar^4 \sin^4(\omega_k t)} \left\{ \left[ \int_0^t dt' x(t') \sin[\omega_k(t-t')] \right]^2 + \left[ \int_0^t dt' y(t') \sin[\omega_k(t-t')] \right]^2 \right\}, \quad (\text{A.36})$$

$$G^2(4D^2 - 4B^2 + C^2) = \frac{m_k^2\omega_k^2 C_k^2}{\hbar^4 \sin^4(\omega_k t)} \left[ \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \sin(\omega_k t') \right]^2, \quad (\text{A.37})$$

$$\begin{aligned} 2ECG(H+F) &= \frac{-2im_k^2\omega_k^2 C_k^2}{\hbar^4 \sin^3(\omega_k t) \sinh(\omega_k \hbar \beta)} \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \sin(\omega_k t') \\ &\times \int_0^t dt' [x(t') + y(t')] \sin[\omega_k(t-t')], \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

$$\begin{aligned} 4EDG(H-F) &= \frac{2m_k^2\omega_k^2 C_k^2}{\hbar^4 \sin^4(\omega_k t)} \cos(\omega_k t) \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \sin(\omega_k t') \\ &\times \int_0^t dt' [y(t') - x(t')] \sin[\omega_k(t-t')], \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

$$\begin{aligned} 4EBG(H+F) &= \frac{2im_k^2\omega_k^2 C_k^2}{\hbar^4 \sin^3(\omega_k t)} \coth(\omega_k \hbar \beta) \int_0^t dt' [x(t') - y(t')] \sin(\omega_k t') \\ &\times \int_0^t dt' [x(t') + y(t')] \sin[\omega_k(t-t')], \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

$$2E^2 HF = \frac{2m_k^2\omega_k^2 C_k^2}{\hbar^4 \sin^4(\omega_k t)} \int_0^t dt' y(t') \sin[\omega_k(t-t')] \int_0^t dt' x(t') \sin[\omega_k(t-t')], \quad (\text{A.41})$$

e, finalmente

$$\begin{aligned} 4IE^2(B+C) &= \frac{4im_k^2\omega_k^2 C_k^2}{\hbar^4 \sin^3(\omega_k t)} \tanh\left(\frac{\omega_k \hbar \beta}{2}\right) \\ &\times \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sin[\omega_k(t-t')] \sin(\omega_k t'') [x(t')x(t'') - y(t')y(t'')]. \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Substituindo as relações (A.36) a (A.43) na expressão (A.35), utilizando a seguinte relação matemática

$$\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' F(t', t'') = 2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' F(t', t''), \quad (\text{A.43})$$

além das mais variadas relações trigonométricas e hiperbólicas, é possível rearranjar todas as funções que dependem de  $t'$  e  $t''$ .

Portanto, depois de longos cálculos e com a mudança de variáveis

$$t' = \tau \quad e \quad t'' = \sigma, \quad (\text{A.44})$$

temos, então, que o funcional de influência para todos os osciladores do reservatório escreve-se como

$$\begin{aligned} F[x, y] = & \prod_{k=1}^N \exp \left\{ \frac{-C_k^2}{2\hbar m_k \omega_k} \coth \left( \frac{\omega_k \hbar \beta}{2} \right) \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \cos[\omega_k(\tau - \sigma)] \right. \\ & \left. \times [x(\sigma) - y(\sigma)] + \frac{iC_k^2}{2\hbar m_k \omega_k} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \sin[\omega_k(\tau - \sigma)] [x(\sigma) + y(\sigma)] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

Definindo as funções que contêm as características do reservatório

$$\alpha_R(\tau - \sigma) = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \coth \left( \frac{\omega_k \hbar \beta}{2} \right) \cos[\omega_k(\tau - \sigma)] \quad (\text{A.46})$$

e

$$\alpha_I(\tau - \sigma) = - \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{2m_k \omega_k} \sin[\omega_k(\tau - \sigma)], \quad (\text{A.47})$$

e usando a relação (A.6), podemos, finalmente, escrever o funcional de influência dos osciladores do reservatório como

$$\begin{aligned} F[x, y] = & \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_R(\tau - \sigma) [x(\sigma) - y(\sigma)] \right\} \\ & \times \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_I(\tau - \sigma) [x(\sigma) + y(\sigma)] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Com esse resultado, agora é possível calcular o superpropagador que rege a evolução do operador densidade reduzido do sistema  $S$ .



## Apêndice B

# Cálculo do Superpropagador do Sistema

Temos a expressão (2.54) para o superpropagador que rege a dinâmica do operador densidade reduzido do sistema

$$\begin{aligned} J(x, y, t; x', y', 0) &= \int_{x'}^x \int_{y'}^y D_F x(t') D_F y(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S_S[x(t')] - S_S[y(t')]] \right. \\ &\quad - \frac{\eta \Omega}{\pi} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\cos[\Omega(\tau - \sigma)]}{(\tau - \sigma)} [x(\sigma) + y(\sigma)] \\ &\quad \left. + \frac{\eta}{\pi} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\sin[\Omega(\tau - \sigma)]}{(\tau - \sigma)^2} [x(\sigma) + y(\sigma)] \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{-\eta}{\pi \hbar} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \int_0^\Omega d\omega \omega \coth \left( \frac{\omega \hbar \beta}{2} \right) \cos[\omega(\tau - \sigma)] [x(\sigma) - y(\sigma)] \right\}. \end{aligned} \tag{B.1}$$

Calculando a primeira integral que aparece no argumento da primeira

exponencial da Eq. (B.1), temos o seguinte resultado

$$\begin{aligned}
 & \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\cos[\Omega(\tau - \sigma)]}{(\tau - \sigma)} [x(\sigma) + y(\sigma)] = \\
 & - \int_0^t d\tau [x^2(\tau) - y^2(\tau)] + (x' + y') \int_0^t d\tau \frac{\sin(\Omega\tau)}{\Omega\tau} [x(\tau) - y(\tau)] \\
 & + \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\sin[\Omega(\tau - \sigma)]}{\Omega(\tau - \sigma)} [\dot{x}(\sigma) + \dot{y}(\sigma)] \\
 & + \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\sin[\Omega(\tau - \sigma)]}{\Omega(\tau - \sigma)^2} [x(\sigma) + y(\sigma)],
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

onde estamos denotando

$$x(0) = x' \quad e \quad y(0) = y', \tag{B.3}$$

e usando o seguinte resultado

$$\lim_{\sigma \rightarrow \tau} \frac{\sin[\Omega(\tau - \sigma)]}{\Omega(\tau - \sigma)} = 1, \tag{B.4}$$

de forma a obtermos

$$\begin{aligned}
 J(x, y, t; x', y', 0) &= \int_{x'}^x \int_{y'}^y D_F x(t') D_F y(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S_S[x(t')] - S_S[y(t')]] \right. \\
 &+ \frac{\eta\Omega}{\pi} \int_0^t d\tau [x^2(\tau) - y^2(\tau)] - \frac{\eta}{\pi} (x' + y') \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \frac{\sin(\Omega\tau)}{\tau} \\
 &\left. - \frac{\eta}{\pi} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\sin[\Omega(\tau - \sigma)]}{(\tau - \sigma)} [\dot{x}(\sigma) + \dot{y}(\sigma)] \right\} \\
 &\times \exp \left\{ \frac{-\eta}{\pi\hbar} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \int_0^\Omega d\omega \omega \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos[\omega(\tau - \sigma)] [x(\sigma) - y(\sigma)] \right\}.
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Aqui, o termo

$$\frac{\eta\Omega}{\pi} \int_0^t d\tau [x^2(\tau) - y^2(\tau)] \tag{B.6}$$

é proveniente da correção dada ao potencial, expressa em (2.16). Como vimos, essa correção pode ser incluída na redefinição de um potencial efetivo, que vamos denotar como

$$V(x) = V_0(x) - \frac{1}{2} M(\Delta\omega)^2 x^2, \tag{B.7}$$

com:

$$(\Delta\omega)^2 = \frac{2\eta\Omega}{M\pi}. \quad (\text{B.8})$$

A razão para essa notação é que, depois, quando considerarmos que o sistema  $S$  seja um oscilador harmônico de frequência  $\omega$ , com potencial dado por

$$V_0(x) = \frac{1}{2}M\omega^2x^2, \quad (\text{B.9})$$

então podemos definir uma frequência renormalizada, dada por

$$\tilde{\omega}^2 = \omega^2 - (\Delta\omega)^2. \quad (\text{B.10})$$

Assim, denotando como  $\tilde{S}_S$  a ação relacionada ao potencial efetivo, podemos reescrever o superpropagador como

$$\begin{aligned} J(x, y, t; x', y', 0) &= \int_{x'}^x \int_{y'}^y D_F x(t') D_F y(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \tilde{S}_S[x(t')] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \tilde{S}_S[y(t')] - \eta(x' + y') \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \frac{\sin(\Omega\tau)}{\pi\tau} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \eta \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\sin[\Omega(\tau - \sigma)]}{\pi(\tau - \sigma)} [\dot{x}(\sigma) + \dot{y}(\sigma)] \right] \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{-\eta}{\pi\hbar} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \int_0^\Omega d\omega \omega \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos[\omega(\tau - \sigma)] [x(\sigma) - y(\sigma)] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

As demais integrais do argumento da primeira exponencial podem ser simplificadas, se usarmos o fato de que os intervalos de tempo em que estamos interessados são aqueles tais que

$$t \gg \frac{1}{\Omega}, \quad (\text{B.12})$$

onde  $\Omega$  é a frequência de cutoff, definida em (2.21), de forma que podemos efetuar a seguinte aproximação

$$\frac{\sin[\Omega(\tau - \sigma)]}{\pi(\tau - \sigma)} \approx \delta(\tau - \sigma), \quad (\text{B.13})$$

de modo a escrever a primeira integral do argumento da exponencial na seguinte forma

$$\eta(x' + y') \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \frac{\sin(\Omega\tau)}{\pi\tau} \approx \eta(x' + y') \int_0^t d\tau \delta(\tau) [x(\tau) - y(\tau)]. \quad (\text{B.14})$$

Essa integral requer uma atenção especial, visto que a mesma não é contínua, devido ao seu limite inferior de integração e vale

$$\eta(x' + y') \int_{t_0}^t d\tau \delta(\tau) [x(\tau) - y(\tau)] = \begin{cases} 0, & \forall t_0 > 0 \\ \eta(x'^2 - y'^2), & \text{se } t_0 = 0 \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

A condição de contorno para o propagador, idealmente, é a seguinte

$$J(x, y, 0; x', y', 0) = \delta(x - x')\delta(y - y'), \quad (\text{B.16})$$

mas, como estamos considerando acoplamento súbito, conforme a equação (2.39), em que o acoplamento se dá em  $t = 0^+$ , então a condição de contorno correta é dada por

$$J(x, y, 0^+; x', y', 0) = \delta(x - x')\delta(y - y'). \quad (\text{B.17})$$

Sendo assim, para que a condição (B.17) seja satisfeita, devemos efetuar as integrações temporais no intervalo  $0 < \tau, \sigma \leq t$ , já que  $t = 0^+ > t = 0$ . Nesse caso, temos, de acordo com (B.15):

$$\eta(x' + y') \int_{0^+}^t d\tau \delta(\tau) [x(\tau) - y(\tau)] = 0. \quad (\text{B.18})$$

Para a segunda integral do argumento da exponencial, temos que:

$$\begin{aligned} & \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \frac{\sin[\Omega(\tau - \sigma)]}{\pi(\tau - \sigma)} [\dot{x}(\sigma) + \dot{y}(\sigma)] \\ & \approx \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \delta(\tau - \sigma) [\dot{x}(\sigma) + \dot{y}(\sigma)], \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

mas essa integral não requer uma análise sutil como a da (B.14), já que aqui a delta está centrada em  $\sigma = \tau$ . Ela vale

$$\int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \delta(\tau - \sigma) [\dot{x}(\sigma) + \dot{y}(\sigma)] = \frac{1}{2} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] [\dot{x}(\tau) + \dot{y}(\tau)], \quad (\text{B.20})$$

e, se denotarmos  $x = x(t)$ ,  $y = y(t)$ ,  $x' = x(0)$  e  $y' = y(0)$ , podemos reescrever a expressão (B.20) da seguinte maneira

$$\int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)][\dot{x}(\tau) + \dot{y}(\tau)] = \frac{1}{2}[(x^2 - x'^2) - (y^2 - y'^2)] + \int_0^t d\tau [x(\tau)\dot{y}(\tau) - \dot{x}(\tau)y(\tau)]. \quad (\text{B.21})$$

Vamos definir a constante de relaxação do sistema, que está diretamente relacionada com o coeficiente de dissipação da equação de Langevin e também com a densidade espectral de modos do reservatório:

$$\gamma = \frac{\eta}{2M}, \quad (\text{B.22})$$

e fazer a seguinte denotação

$$f(x, x'; y, y') = \frac{M\gamma}{2}[(x^2 - x'^2) - (y^2 - y'^2)], \quad (\text{B.23})$$

tal que o superpropagador pode ser finalmente escrito como:

$$\begin{aligned} J(x, y, t; x', y', 0) &= \exp\left[\frac{-i}{\hbar}f(x, x'; y, y')\right] \int_{x'}^x \int_{y'}^y D_F x(t') D_F y(t') \\ &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\tilde{S}_S[x(t')] - \tilde{S}_S[y(t')] - M\gamma \int_0^t dt' [x(t')\dot{y}(t') - \dot{x}(t')y(t')]\right]\right\} \\ &\times \exp\left\{\frac{-2M\gamma}{\pi\hbar} \int_0^t d\tau [x(\tau) - y(\tau)] \int_0^\tau d\sigma \int_0^\Omega d\omega \omega \coth\left(\frac{\omega\hbar\beta}{2}\right) \cos[\omega(\tau - \sigma)][x(\sigma) - y(\sigma)]\right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

# Apêndice C

## Integrações do Modelo Duplicado

Vamos fazer algumas considerações na equação (3.38). Como temos  $\varepsilon \rightarrow 0$ , podemos efetuar as seguintes aproximações:

$$\left( \frac{\mu_1 \gamma_1}{2} + \frac{\mu_1}{2\varepsilon} - \frac{\mu_{12} \chi}{2} \right) \approx \frac{\mu_1}{2\varepsilon}, \quad (\text{C.1})$$

$$\left( \frac{\mu_2 \gamma_2}{2} + \frac{\mu_2}{2\varepsilon} - \frac{\mu_{12} \delta}{2} \right) \approx \frac{\mu_2}{2\varepsilon}, \quad (\text{C.2})$$

e

$$\left( \frac{\mu_1 \delta}{2} + \frac{\mu_2 \chi}{2} - \frac{\mu_{12}}{\varepsilon} \right) \approx -\frac{\mu_{12}}{\varepsilon}. \quad (\text{C.3})$$

Vamos, ainda, denotar:

$$\tilde{\alpha}_1 = \frac{i\mu_1}{2\hbar\varepsilon}, \quad \tilde{\alpha}_2 = \frac{i\mu_2}{2\hbar\varepsilon} \quad e \quad \tilde{\alpha}_{12} = \frac{i\mu_{12}}{\hbar\varepsilon}, \quad (\text{C.4})$$

e também

$$\tilde{A} = \frac{i}{\hbar} [\mu_1 \delta x_2 + \mu_{12} \gamma_2 (x_2 - y_2) - \mu_{12} \chi x_1], \quad (\text{C.5})$$

$$\tilde{B} = \frac{i}{\hbar} [\mu_2 \chi x_1 + \mu_{12} \gamma_1 (x_1 - y_1) - \mu_{12} \delta x_2], \quad (\text{C.6})$$

$$\tilde{C} = \frac{i}{\hbar} [\mu_1 \delta y_2 - \mu_{12} \gamma_2 (x_2 - y_2) - \mu_{12} \chi y_1], \quad (\text{C.7})$$

$$\tilde{D} = \frac{i}{\hbar} [\mu_2 \chi y_1 - \mu_{12} \gamma_1 (x_1 - y_1) - \mu_{12} \delta y_2] \quad (\text{C.8})$$

e

$$\begin{aligned} \Gamma = & \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ -\tilde{V}_1(x_1) + \tilde{V}_1(y_1) - \tilde{V}_2(x_2) + \tilde{V}_2(y_2) - (\xi + \mu_{12}\delta\chi)(x_1x_2 - y_1y_2) \right. \right. \\ & - \mu_1\delta\gamma_1(x_1 - y_1)(x_2 + y_2) - \mu_2\chi\gamma_2(x_1 + y_1)(x_2 - y_2) + \left. \left. \left( \frac{\mu_2\chi^2}{2} + \mu_{12}\chi\gamma_1 \right) (x_1^2 - y_1^2) \right. \right. \\ & \left. \left. + \left( \frac{\mu_1\delta^2}{2} + \mu_{12}\delta\gamma_2 \right) (x_2^2 - y_2^2) \right] - \frac{2\mu_1\gamma_1k_B T}{\hbar^2} - \frac{2\mu_2\gamma_2k_B T}{\hbar^2} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Temos, usando o fato de que:

$$e^{\varepsilon\Gamma} \approx 1 + \varepsilon\Gamma \quad (\text{C.10})$$

e definindo ainda:

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma} = & \rho_{S_1+S_2} + \varepsilon\Gamma\rho_{S_1+S_2} - \gamma_1(x_1 - y_1)\varepsilon\frac{\partial\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} - \gamma_2(x_2 - y_2)\varepsilon\frac{\partial\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} \\ & + \gamma_1(x_1 - y_1)\varepsilon\frac{\partial\rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} + \gamma_2(x_2 - y_2)\varepsilon\frac{\partial\rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2}, \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

que a equação para o elemento de matriz densidade reduzido do sistema (3.38)

fica sendo dada por

$$\begin{aligned} \rho_{S_1+S_2} + \varepsilon\frac{\partial\rho_{S_1+S_2}}{\partial t} = & \frac{1}{A} \iiint d\beta'_{11}d\beta'_{12}d\beta'_{21}d\beta'_{22} \left[ \tilde{\Gamma} - \beta'_{11}\frac{\partial\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} - \beta'_{12}\frac{\partial\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} \right. \\ & - \beta'_{21}\frac{\partial\rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} - \beta'_{22}\frac{\partial\rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} + \frac{\beta_{11}^2}{2}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1^2} + \frac{\beta_{12}^2}{2}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2^2} + \frac{\beta_{21}^2}{2}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1^2} \\ & + \frac{\beta_{22}^2}{2}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2^2} + \beta'_{11}\beta'_{12}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1\partial x_2} + \beta'_{11}\beta'_{21}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1\partial y_1} + \beta'_{11}\beta'_{22}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1\partial y_2} \\ & \left. + \beta'_{12}\beta'_{21}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2\partial y_1} + \beta'_{12}\beta'_{22}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2\partial y_2} + \beta'_{21}\beta'_{22}\frac{\partial^2\rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1\partial y_2} \right] \exp \left[ \tilde{\alpha}_1\beta_{11}'^2 + \tilde{\alpha}_2\beta_{12}'^2 \right. \\ & \left. - \tilde{\alpha}_1\beta_{21}'^2 - \tilde{\alpha}_2\beta_{22}'^2 - \tilde{A}\beta'_{11} - \tilde{B}\beta'_{12} + \tilde{C}\beta'_{21} + \tilde{D}\beta'_{22} - \tilde{\alpha}_{12}\beta'_{11}\beta'_{12} + \tilde{\alpha}_{12}\beta'_{21}\beta'_{22} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Agora, podemos efetuar as integrações gaussianas com o auxílio da seguinte relação

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x^n \exp i[ax^2+bx+c] = \exp \left[ i \left( -\frac{b^2}{4a} + c \right) \right] \sum_{m=0}^{n/2} \binom{n}{2m} \left( \frac{-b}{2a} \right)^{n-2m} \frac{d^m}{d(ia)^m} \sqrt{\frac{-\pi}{ia}}, \quad (\text{C.13})$$

de forma que, depois de uma grande quantidade de cálculos e desprezando todos os termos de ordem superior a  $\mathcal{O}(\varepsilon)$ , finalmente encontramos:

$$\begin{aligned}
 \rho_{S_1+S_2} + \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial t} = & \frac{1}{A} \frac{(2\pi\hbar\varepsilon)^2}{(\mu_{12}^2 - \mu_1\mu_2)} \left\{ \rho_{S_1+S_2} - \frac{i\varepsilon}{2\hbar} \left[ \mu_2 \chi^2 (x_1^2 - y_1^2) \rho_{S_1+S_2} \right. \right. \\
 & + \mu_1 \delta^2 (x_2^2 - y_2^2) \rho_{S_1+S_2} + 2\mu_{12} \chi \gamma_1 (x_1^2 - y_1^2) \rho_{S_1+S_2} + 2\mu_{12} \delta \gamma_2 (x_2^2 - y_2^2) \rho_{S_1+S_2} \\
 & \left. \left. - 2\mu_{12} \delta \chi (x_1 x_2 - y_1 y_2) \right] + \varepsilon \Gamma \rho_{S_1+S_2} - \gamma_1 (x_1 - y_1) \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} - \gamma_2 (x_2 - y_2) \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} \right. \\
 & + \gamma_1 (x_1 - y_1) \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} + \gamma_2 (x_2 - y_2) \varepsilon \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} - \varepsilon \chi \left[ y_1 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} + x_1 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} \right] \\
 & - \varepsilon \delta \left[ y_2 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} + x_2 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} \right] - \varepsilon \frac{\mu_{12}}{\mu_2} \gamma_1 (x_1 - y_1) \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} \right] \\
 & + \frac{\varepsilon}{(\mu_{12}^2 - \mu_1\mu_2)} [\mu_{12} \mu_2 \gamma_2 (x_2 - y_2) + \mu_{12}^2 \gamma_1 (x_1 - y_1)] \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} \right] \\
 & + \frac{\mu_{12}}{\mu_2} \frac{\varepsilon}{(\mu_{12}^2 - \mu_1\mu_2)} [\mu_{12} \mu_2 \gamma_2 (x_2 - y_2) + \mu_{12}^2 \gamma_1 (x_1 - y_1)] \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} \right] \\
 & - \frac{\hbar\varepsilon}{2i\mu_2} \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2^2} \right] + \frac{i\mu_2 \hbar\varepsilon}{2(\mu_{12}^2 - \mu_1\mu_2)} \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1^2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1^2} \right] \\
 & \left. + \frac{i\mu_{12}^2 \hbar\varepsilon}{2\mu_2(\mu_{12}^2 - \mu_1\mu_2)} \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2^2} \right] + \frac{i\mu_{12} \hbar\varepsilon}{(\mu_{12}^2 - \mu_1\mu_2)} \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1 \partial y_2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1 \partial x_2} \right] \right\}. \tag{C.14}
 \end{aligned}$$

A partir dessa equação, obtemos, igualando os termos correspondentes de cada lado e depois de alguma álgebra:

a) A constante de normalização  $A$ :

$$A = \frac{(2\pi\hbar\varepsilon)^2}{(\mu_{12}^2 - \mu_1\mu_2)}, \tag{C.15}$$

b) A equação mestra que governa a evolução do elemento de matriz den-



side reduzido do sistema conjunto  $S_1 + S_2$ :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial t} = & -\frac{\hbar}{2iM_1} \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1^2} \right] - \frac{i}{\hbar} [\tilde{V}_1(x_1) - \tilde{V}_1(y_1)] \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \tilde{\gamma}_1 (x_1 - y_1) \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} \right] - \frac{2M_1 \tilde{\gamma}_1 k_B T}{\hbar^2} (x_1 - y_1)^2 \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \frac{\hbar}{2iM_2} \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2^2} \right] - \frac{i}{\hbar} [\tilde{V}_2(x_2) - \tilde{V}_2(y_2)] \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \tilde{\gamma}_2 (x_2 - y_2) \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} \right] - \frac{2M_2 \tilde{\gamma}_2 k_B T}{\hbar^2} (x_2 - y_2)^2 \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \frac{i\xi}{\hbar} (x_1 x_2 - y_1 y_2) \rho_{S_1+S_2} - \frac{iM_1 \tilde{\gamma}_1 \delta}{\hbar} (x_1 - y_1)(x_2 + y_2) \rho_{S_1+S_2} \\
 & - \frac{iM_2 \tilde{\gamma}_2 \delta}{\hbar} (x_1 + y_1)(x_2 - y_2) \rho_{S_1+S_2} - \chi \left[ y_1 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} + x_1 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} \right] \\
 & - \delta \left[ y_2 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} + x_2 \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} \right] - \lambda M_1 \tilde{\gamma}_1 (x_1 - y_1) \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_2} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_2} \right] \\
 & - \lambda M_2 \tilde{\gamma}_2 (x_2 - y_2) \left[ \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1} - \frac{\partial \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1} \right] + i\lambda \hbar \left[ \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial y_1 \partial y_2} - \frac{\partial^2 \rho_{S_1+S_2}}{\partial x_1 \partial x_2} \right],
 \end{aligned} \tag{C.16}$$

onde  $\tilde{\gamma}_j = \frac{\gamma_j}{(1 - \lambda^2 M_1 M_2)}$  ( $j = 1, 2$ ) é a constante de relaxação do  $j$ -ésimo reservatório, modificada pelo acoplamento.

# Referências Bibliográficas

- [1] A. Peres, Am. J. Phys. 54, 688 (1986).
- [2] W. H. Zurek, Phys. Rev. D24, 1516 (1981); 26, 1862 (1982).
- [3] A. O. Caldeira and A. J. Leggett; Phys. Rev. A31, 1059 (1985); Ann. Phys. (N.Y.) 149, 374 (1983).
- [4] E. Schrödinger, Naturwissenschaften 23, 807 (1935).
- [5] G. C. Ghirardi, A. Rimini, and T. Weber, Phys. Rev. D 34, 470 (1986); P. Pearle, Phys. Rev. A 39, 2277 (1989); G. C. Ghirardi, P. Pearle, and A. Rimini, Phys. Rev. A 42, 78 (1990).
- [6] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Physica **121A**, 587-616 (1983).
- [7] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Phys. Rev. A **31**, 1059-1066 (1985).
- [8] D. Jaksch, H.-J. Briegel, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. 82, 1975 (1999); G. K. Brennen, C. M. Caves, P. S. Jessen, and I. H. Deutsch, Phys. Rev. Lett. 82, 1060 (1999).
- [9] P. Shor, in: Proceedings of the 35th Annual Symposium on the Theory of Computer Science, ed. S. Goldwasser (IEEE Computer Society Press, Los Alamitos, CA, 1994) , p. 124; *ibid.* quant-ph/9508027.
- [10] N. G. de Almeida, R. Napolitano, and M. H. Y. Moussa, Phys. Rev A. 62, 010101 (2000); N. G. de Almeida, R. Napolitano, and M. H. Y. Moussa,

- Phys. Rev. A. 62, 033815 (2000); R. Bonifacio, S. Olivares, P. Tombesi, and D. Vitali, Phys. Rev. A 61, 053802 (2000); R. M. Serra, P.B. Ramos, N. G. de Almeida, W. D. José, and M. H. Y. Moussa, Phys. Rev. A 63, 053813 (2001).
- [11] J. M. Raimond, M. Brune and S. Haroche, Phys. Rev.Lett. 79, 1964 (1997).
- [12] S. G. Mokarzel, A. N. Salgueiro, and M. C. Nemes, Phys. Rev. A 65, 044101 (2002). Zoubi : H. Zoubi, M. Orenstien, and A. Ron, Phys. Rev. A 62, 033801 (2000).
- [13] H. Zoubi, M. Orenstien, and A. Ron, Phys. Rev. A **62**, 033801 (2000).
- [14] M. A. de Ponte, M. C. de Oliveira, and M. H. Y. Moussa, quant-ph/0309082, aceito para publicação na revista Annals of Physics.
- [15] K.Audenaert, J. Eisert, and M. B. Plenio, quant-ph/0205025.
- [16] M. B. Plenio, J. Hartley, and J. Eisert, New J. Phys. 6 (2004).
- [17] M. A. de Ponte, M. C. de Oliveira, and M. H. Y. Moussa, Phys. Rev. A **70**, 022324 (2004).
- [18] M. A. de Ponte, M. C. de Oliveira, and M. H. Y. Moussa, Phys. Rev. A **70**, 022325 (2004).
- [19] T. Tomé e M. J. Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, EDUSP (2001).
- [20] A. O. Caldeira, *Alguns Aspectos da Dinâmica Quântica de uma Partícula Browniana*, UNICAMP - Notas de Aula do IFGW (1994).
- [21] M. Rosenau da Costa, *Estudo sobre a Existência de Estados Coerentes Dissipativos*, Tese de Mestrado IFGW-UNICAMP (1998).

- [22] T. Dittrich, P. Hänggi, G-L. Ingold, B. Kramer, G. Schön, W. Zwerger, *Quantum Transport and Dissipation*, Wiley-VCH (1998).
- [23] W. H. Zurek, Phys. Today (October 1991) 36-44.
- [24] R. P. Feynman and F. L. Vernon, Anals of Physics **24**, 118-173 (1963).
- [25] H. Grabert, P. Schramm and G-L. Ingold, Phys. Rep. **168**, 115-207 (1988).
- [26] R. P. Feynman, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Mc. Graw-Hill Book Company (1965).
- [27] L. S. Schulman, *Techniques and Applications os Path Integration*, John Wiley & Sons (1981).
- [28] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons (1963).
- [29] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Annals of Physics **149**, 374 (1983).
- [30] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Doesery, M. P. A. Fisher, A. Garg and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **59** n.1 1-85 (1987).
- [31] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company (1994).