

Sistemas de Osciladores Acoplados em Thermofield Dynamics

Gerson Gregório Gomes

UFSC - Florianópolis
abril de 2013

Sistemas de Osciladores Acoplados em Thermofield Dynamics

Gerson Gregório Gomes

Orientador : Prof. Dr. Jeferson de Lima Tomazelli

Tese apresentada a Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina, como requisito para obtenção do título de doutor em Física.

UFSC - Florianópolis
abril de 2013

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Gomes, Gerson Gregório
Sistemas de Osciladores Acoplados em Thermofield
Dynamics / Gerson Gregório Gomes ; orientador, Jeferson de
Lima Tomazelli - Florianópolis, SC, 2013.
134 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas.
Programa de Pós-Graduação em Física.

Inclui referências

1. Física. 2. Estatística Quântica. 3. Thermofield
Dynamics. 4. Equação de Langevin. 5. Equação Mestra. I. de
Lima Tomazelli, Jeferson. II. Universidade Federal de
Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física. III.
Título.

Agradecimentos

É difícil avaliar o quanto somos ajudados, e certamente eu esqueceria nomes aqui. Certamente o prof. Jeferson deve ser citado, pois sem ele este trabalho não teria sido possível. Agradeço às contribuições dos membros da banca, às discussões esclarecedoras com o Renan e o Lúcio, ao Marcos pela grande ajuda no meu distante ambiente de trabalho e ao André pelas sempre agradáveis conversas. Como não poderia deixar de ser, agradeço a toda minha família e à Grasi, que deu-me o melhor presente da minha vida, a pequena Dudinha. Por fim agradeço, principalmente, a chance de recomeçar.

Resumo

Neste trabalho discutimos modelos clássicos para sistemas macroscópicos dissipativos e sua contrapartida quântica, segundo a abordagem em que se considera uma partícula (sistema microscópico) em interação com um banho térmico constituído por uma coleção de osciladores harmônicos acoplados (reservatório). Com tal objetivo, fazemos uma revisão crítica dos trabalhos que deram origem à chamada equação de Langevin quântica para uma partícula browniana, bem como construímos a Equação Mestra, que governa a evolução do sistema microscópico. Para essa equação, incorporamos os efeitos de temperatura através da teoria de campos à temperatura finita, Thermofield Dynamics (TFD), redefinindo adequadamente o vácuo do sistema macroscópico. Realizamos uma aplicação do formalismo apresentado descrevendo uma partícula browniana interagindo com um banho térmico, considerando este como um campo escalar homogêneo.

Palavras-Chave: Modelo FKM, Thermofield Dynamics, equação mestra, osciladores harmônicos, reservatório térmico, propagadores, campo escalar.

Áreas do conhecimento: 1.05.03.00-5 Física das partículas elementares e campos.

Abstract

In this monograph we discuss classical models for macroscopic dissipative systems and their counterparts, following an approach where one considers a particle (microscopic system) interacting with a thermal bath composed by an assembly of coupled oscillators (reservoir). For this purpose, we critically review the works that originated the so-called Quantum Langevin Equation for the brownian particle, and construct the Master Equation that governs the evolution of the microscopic system. In such way we incorporate finite temperature effects via Thermofield Dynamics (TFD), suitably redefining the vacuum of the macroscopic system. As an application, we consider a heat bath interacting with a brownian particle as a homogeneous scalar field.

Palavras-Chave: FKM Model, Thermofield Dynamics, master equation, harmonic oscillators, reservoir, propagators, scalar field.

SUMÁRIO

<i>Introdução</i>	15
1. <i>Equação de Langevin Quântica I - O Modelo FKM</i>	19
1.1 Introdução	19
1.2 Dinâmica de um Sistema de Osciladores Acoplados	20
1.3 A Matriz de Interação	22
1.3.1 Matrizes Circulantes e de Toeplitz	23
1.3.2 Cadeia de Osciladores Acoplados	25
1.4 A Equação de Langevin	29
1.5 Dinâmica de Osciladores Quânticos Acoplados	32
1.6 A Equação de Langevin Quântica	35
1.7 Discussão do Modelo FKM	37
2. <i>Equação de Langevin Quântica II - O Modelo do Oscilador Independente</i>	39
2.1 Prelúdio: O Artigo de FK	39
2.1.1 Dedução da Equação de Langevin	41
2.1.2 Discussão do Artigo de FK	44
2.2 O Modelo do Oscilador Independente - IO	45
2.2.1 A Equação de Langevin Quântica	46
2.2.2 O Modelo IO	47
2.2.3 Outros Modelos de Banho Térmico	50
3. <i>Estatística Quântica a Temperatura Finita</i>	55
3.1 Thermofield Dynamics - TFD	55
3.1.1 Oscilador Harmônico Bosônico	58
3.1.2 Transformações de Bogoliubov	60
3.1.3 Estados Comprimidos (<i>Squeezed</i>)	61
3.1.4 Estados Comprimidos de Dois Modos	62
3.2 Teoria da Medida e TFD	64
3.3 Aplicação da TFD ao Modelo FKM	69

4. Equação Mestra para um Sistema de Partículas	75
4.1 Equação Mestra para um Sistema \mathcal{S} Interagindo com um Reservatório \mathcal{R}	75
4.1.1 Equação para a Evolução do Sistema \mathcal{S}	75
4.1.2 Hipóteses sobre o Reservatório \mathcal{R}	77
4.1.3 Cálculo Perturbativo da Taxa de Variação “ <i>coarse-grained</i> ” do Sistema	79
4.2 Equação Mestra para um Oscilador Harmônico Amortecido	81
4.2.1 O Sistema Físico	81
4.2.2 Equação Mestra na Forma de Operadores	82
4.3 Evolução das Populações	85
4.4 Equação de Langevin Quântica para um Sistema Físico Simples	86
4.4.1 Equações de Heisenberg-Langevin para um Oscilador Forçado	87
5. Equação Mestra e Reservatório como um Campo Escalar	93
5.1 A Função de Correlação Térmica	93
5.1.1 A Função de Correlação Simétrica	95
5.1.2 A Susceptibilidade Linear	95
5.2 Equação Mestra para uma Coleção de Osciladores	97
5.3 Evolução das Populações	101
5.4 Reservatório como um Campo Escalar	104
<i>Conclusões e Perspectivas</i>	111
<i>Apêndices</i>	113
A. Cálculo de Algumas Funções de Correlação	113
A.1 Funções de Correlação em um Sistema de Osciladores Clássicos Acoplados	113
A.2 Funções de Correlação em um Sistema de Osciladores Quânticos Acoplados	115
B. Solução de Algumas Integrais e Equações Diferenciais	119
B.1 FKM - Solução da Integral (1.48)	119
B.2 FKM - Soluções das Equações Diferenciais (1.49) através do Método de Variação dos Parâmetros	120
B.3 FK - Solução das Equações Diferenciais (2.8) via Funções de Green	122
C. Expansão do Vácuo Térmico	125
D. A Aproximação Delta	129
Referências	130

INTRODUÇÃO

Há cem anos Langevin propôs, de maneira fenomenológica, a equação que leva seu nome, com o objetivo de descrever o movimento browniano. Este fenômeno é particularmente interessante, pois há uma enorme variedade de situações físicas onde ele ocorre, evidenciando as flutuações estatísticas que surgem em um sistema em equilíbrio térmico [1, 2, 3]. Por outro lado, a existência de *flutuações* relaciona-se intimamente com os fenômenos onde ocorre a *dissipação de energia e irreversibilidade*. Mesmo na física clássica, a descrição de um processo irreversível não é uma tarefa trivial. Pode-se introduzir dissipação em equações microscópicas, adicionando-se termos fenomenológicos, exatamente como o fez Langevin, tais como um amortecimento dependente da velocidade $\alpha\dot{x}(t)$ ($\alpha > 0$) em um oscilador harmônico amortecido forçado:

$$\ddot{x}(t) + \alpha\dot{x}(t) + \omega^2x(t) = f(t).$$

Fazendo a transição para a mecânica quântica, o objetivo da *teoria quântica da dissipação* é formular teorias microscópicas do comportamento irreversível de sistemas quânticos. Colocando de forma mais simples, o interesse é entender melhor processos tais como *atrito* ou *amortecimento* em um nível microscópico. Isto requer basicamente lidar com interações em sistemas quânticos que usualmente estão fora do equilíbrio [4].

O estudo da dinâmica de um sistema quântico interagindo com um reservatório não é novo na física, mas tem se mantido, até hoje, um problema importante. Ao longo do tempo houve várias tentativas de se descrever o comportamento de sistemas microscópicos, tais como a Equação de Boltzmann e a já citada Equação de Langevin, a qual leva em consideração forças aleatórias que atuam sobre o sistema em estudo. Na mesma linha, surge a Equação de Liouville e, por último, utilizando-se o formalismo do operador densidade, pode-se construir a Equação de Fokker-Planck para densidades de probabilidade e a chamada Equação Mestre. A abordagem mais bem sucedida de sistemas quânticos com dissipação faz menção a teorias de sistema-banho térmico. A idéia principal desta abordagem consiste em: (i) dividir o universo em duas partes: uma na qual estamos realmente interessados e a outra, o restante; (ii) chamando essas duas partes de *sistema*

e *reservatório*, respectivamente, identificar a interação entre ambas, e (iii) derivar então uma teoria efetiva para o sistema de interesse. Nesta abordagem, a escolha favorita para o reservatório é uma coleção de osciladores harmônicos acoplados [5]. A interação entre o sistema (geralmente, um oscilador também) e o reservatório é do tipo linear, de forma a simplificar os cálculos [6]. Para um número finito de osciladores que compõem o reservatório, o movimento do sistema (oscilador) deve ser periódico, envolvendo um período grande T . O tempo T transcorrido até que o sistema retorne ao seu estado inicial é chamado tempo de Poincaré [4].

Um ponto de fundamental importância é a *escolha adequada de uma escala temporal* para a análise do problema. Para tempos pequenos, $t \ll T$, a dinâmica efetiva do sistema assemelha-se muito à dinâmica que se esperaria de um sistema amortecido: a soma de muitos termos oscilatórios com coeficientes aleatórios próximos decai como uma função do tempo t . Na maioria dos casos, T é muito grande, sobretudo quando fazemos o número de osciladores do banho térmico N crescer a infinito. Isto significa que podemos ignorar o tempo de Poincaré do sistema, que se comporta então, *nessa escala de tempo*, como um sistema com dissipação. Pode-se observar ainda, neste caso, que o sistema global “sistema + reservatório” é reversível (considerando o tempo de Poincaré), enquanto que o sistema isoladamente apresenta *irreversibilidade* na escala de tempo $t \ll T$.

Exemplos típicos de aplicação das teorias de sistema-banho térmico estão em óptica quântica, tais como eletrodinâmica de cavidades e sistemas atômicos interagindo com campos de radiação [7], áreas bastante difundidas e muito ricas em fenômenos de interesse na física atual.

Atenção especial deve também ser dedicada a obtenção das médias estatísticas dos observáveis físicos. Além dos procedimentos usuais da mecânica estatística, pode-se contar com os métodos típicos de teoria de campos à temperatura finita. Dentre estes, nos é de particular interesse o formalismo de tempo real, conhecido como Thermofield Dynamics (TFD) [8]. A ideia básica por trás da TFD é adicionar temperatura ao sistema através de valores esperados em estados dependentes da temperatura; isso envolve, por construção, a duplicação dos graus de liberdade do sistema. Contudo, todas as relações do formalismo a temperatura zero permanecem válidas. Tais estados dependentes da temperatura são construídos através de uma transformação de Bogoliubov análoga à transformação correspondente a estados *squeezed* de dois modos. Hoje em dia, a TFD é utilizada em diversas áreas da física tais como da matéria condensada [9], física nuclear, física de partículas, óptica quântica e cosmologia.

Os sistemas quânticos dissipativos podem ser descritos utilizando o formalismo do operador densidade construindo a Equação Mestra, conforme mencionado. Nesta linha,

Cohen-Tannoudji *et al* [10] derivaram perturbativamente a Equação Mestra, tratando também do caso especial onde o sistema microscópico é um oscilador harmônico e o banho térmico é constituído por uma coleção de osciladores acoplados. Tal sistema é o foco deste trabalho que está organizado da seguinte maneira.

No Capítulo 1, realizamos uma análise do modelo FKM, que se tornou célebre na literatura por ser considerado o primeiro trabalho onde a dedução correta da equação de Langevin quântica foi efetuada. A seguir, no Capítulo 2, apresentamos a sequência dos trabalhos de Ford e colaboradores, na formulação do modelo do Oscilador Independente para a obtenção da Equação de Langevin.

No Capítulo 3, apresentamos a teoria de campos à temperatura finita na sua formulação de tempo real, conhecida como Thermofield Dynamics (TFD), baseada numa construção via operadores, permitindo incorporar temperatura para o tratamento de sistemas quânticos em equilíbrio térmico. Assim, procedemos à construção dos estados térmicos da TFD na representação de número, exemplificamos para o caso de osciladores harmônicos, estabelecemos uma relação com a teoria da medida de Schwinger e aplicamos esse formalismo ao modelo FKM.

Apresentamos, no Capítulo 4, a derivação perturbativa de Cohen *et al* da Equação Mestra, estudando o caso de um sistema microscópico na presença de um banho térmico. Neste processo, surgem naturalmente valores esperados de operadores, tomados sobre estados do banho térmico, os quais são o ponto de partida para construirmos, de primeiros princípios, uma equação mestra dependente da temperatura.

No Capítulo 5 derivamos a equação mestra térmica para um oscilador que descreve uma partícula browniana em interação com um conjunto de osciladores acoplados, assim como obtemos a equação para a evolução das populações. Utilizamos ainda o formalismo desenvolvido para tratar o reservatório térmico, que interage com uma partícula browniana, como um campo escalar. Em ambos os casos aproveitamos um protótipo de interação sugerido pelo FKM, porém de forma mais geral, sem a aproximação de onda girante.

Na parte final apresentaremos as conclusões e perspectivas de nosso trabalho. Algumas deduções e discussões adicionais são deixadas para os apêndices, que podem ser omitidos numa primeira leitura.

Capítulo 1

Equação de Langevin Quântica I - O Modelo FKM

Neste capítulo iremos apresentar e discutir o artigo de Ford, Kac e Mazur, de 1965 [11], que versa sobre a mecânica estatística de uma coleção de osciladores acoplados. O objetivo deste artigo é mostrar que um sistema de osciladores acoplados pode ser utilizado como um modelo de banho térmico. Mostra-se também que uma partícula (oscilador) acoplada a este banho exhibe (num limite apropriado) movimento browniano e, portanto, pode ser descrita através da Equação de Langevin. São apresentados os tratamentos clássico e quântico. Este artigo é o primeiro de uma “série” de três dos mesmos autores, que tratam, em essência, do mesmo tema: a dedução da Equação de Langevin Quântica. Ele tornou-se célebre na literatura da área pois é considerado como o primeiro onde a Equação de Langevin (clássica e quântica) foi corretamente deduzida.

1.1 Introdução

Neste trabalho Ford, Kac e Mazur propõem-se a estudar um modelo mecânico simples, com o objetivo de ganhar um entendimento mais profundo sobre os fenômenos associados ao movimento browniano. Iniciam apresentando o programa a ser seguido:

(i) resolver as equações de movimento da partícula browniana num banho térmico; (ii) assumir que as coordenadas e momentos iniciais do banho térmico constituem um ensemble canônico; (iii) mostrar que as coordenadas e momentos da partícula browniana, como função do tempo, representam processos estocásticos usuais.

Os autores comentam que este programa, que é atribuído a Gibbs, é bastante ambicioso

e só pode ser levado a bom termo apenas para modelos muito simples.

Uma partícula browniana sob a ação de uma força externa $F(t)$ obedece à equação

$$\dot{p} = -\alpha \frac{p}{m} + E(t) + F(t), \quad (1.1)$$

onde $p = m\dot{x}$ é o momento da partícula, α é o coeficiente de atrito (constante), e $E(t)$ é uma força estocástica devido ao banho térmico. Esta força estocástica é um processo estocástico puramente gaussiano caracterizado por

$$\langle E(t) \rangle = 0, \quad \langle E(t)E(t') \rangle = 2\alpha k_B T \delta(t - t'), \quad (1.2)$$

onde T é a temperatura do banho térmico e k_B é a constante de Boltzmann. Observa-se que a equação de Langevin é dita ‘contraída’ no sentido de que o banho térmico é descrito por apenas dois parâmetros, o coeficiente de atrito e a temperatura, e que apenas as duas primeiras derivadas da posição x da partícula browniana aparecem na equação (ou seja, não há efeitos de memória).

1.2 Dinâmica de um Sistema de Osciladores Acoplados

O modelo FKM consiste de um sistema de $2N + 1$ osciladores acoplados, com o hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=-N}^N p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=-N}^N q_i A_{ij} q_j. \quad (1.3)$$

Aqui q_i e p_i são, respectivamente, a coordenada e o momento canônicos do i -ésimo oscilador de massa unitária. A interação entre os osciladores é caracterizada pela matriz simétrica \mathbf{A} , cujos elementos são A_{ij} . Até aqui, nenhuma exigência é feita sobre esta matriz, a não ser que ela não possua autovalores negativos.

Valendo-se das equações de Hamilton, $\dot{q}_j = \partial H / \partial p_j$ e $\dot{p}_j = -\partial H / \partial q_j$, escrevem-se as equações de movimento para esse sistema na forma matricial

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{p}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\mathbf{A}\mathbf{q}, \quad (1.4)$$

onde \mathbf{p} e \mathbf{q} são matrizes coluna de $2N + 1$ linhas cujos elementos são p_j e q_j , respectivamente. A solução formal dessas equações para osciladores é bem conhecida e pode ser escrita como

$$\mathbf{q}(t) = \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)\mathbf{q}(0) + \mathbf{A}^{-1/2}\text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)\mathbf{p}(0)$$

$$\mathbf{p}(t) = -\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t) \mathbf{q}(0) + \cos(\mathbf{A}^{1/2}t) \mathbf{p}(0), \quad (1.5)$$

onde $\cos(\mathbf{A}^{1/2}t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \mathbf{A}^{nt^{2n}}$, símile para o seno. Supõem-se agora que no instante inicial, $t = 0$, o sistema esteja em equilíbrio térmico à temperatura T , i.e, $q_i(0)$ e $p_i(0)$ estão associados à distribuição canônica

$$D(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)) = \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^{-(2N+1)} (\det \mathbf{A})^{1/2} e^{-\beta H(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))}, \quad (1.6)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e $\det \mathbf{A}$ é o determinante da matriz \mathbf{A} . Os autores salientam que há uma dificuldade aqui, pois se \mathbf{A} possuir autovalores nulos o seu determinante também será nulo; assumem, portanto, que \mathbf{A} não possui autovalores nulos. O valor esperado de qualquer função $F(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))$ é dado por

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int \dots \int dq_{-N}(0) \dots dq_N(0) dp_{-N}(0) \dots dp_N(0) \\ &\quad \times F(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)) D(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Em seguida, pergunta-se quais as propriedades das variáveis estocásticas $q_j(t)$ e $p_j(t)$ que resultam de (1.5) com a distribuição (1.6). O processo é gaussiano, pois (1.6) é gaussiana e (1.5) é linear. Que o processo é estacionário segue do teorema de Liouville, que estabelece a constância no tempo da distribuição de probabilidades, i.e, $D(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) = D(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))$.

Sabe-se que as propriedades estatísticas de um processo gaussiano estacionário são completamente descritas por funções de correlações de pares (segundo momento da distribuição). No Apêndice A.1 mostramos que estas são dadas por

$$\begin{aligned} \langle p_k(0) p_l(0) \rangle &= k_B T \delta_{kl}, \\ \langle p_k(0) q_l(0) \rangle &= 0, \\ \langle q_k(0) q_l(0) \rangle &= k_B T [\mathbf{A}^{-1}]_{kl}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

e

$$\langle p_k(t) p_l(t + \tau) \rangle = k_B T [\cos(\mathbf{A}^{1/2}\tau)]_{kl}, \quad (1.9)$$

$$\langle q_k(t) p_l(t + \tau) \rangle = -k_B T [\mathbf{A}^{-1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}\tau)]_{kl}, \quad (1.10)$$

$$\langle q_k(t) q_l(t + \tau) \rangle = k_B T [\mathbf{A}^{-1} \cos(\mathbf{A}^{1/2}\tau)]_{kl}, \quad (1.11)$$

onde a notação $[\mathbf{A}^{-1}]_{kl}$ representa o elemento da k -ésima linha e l -ésima coluna da inversa

da matriz \mathbf{A} . Os autores reforçam que a correlação da posição (1.11) envolve o inverso de \mathbf{A} , que não existe se qualquer um de seus autovalores for nulo.

Fixando-se a atenção em um único oscilador, p.ex., aquele com índice '0', a auto-correlação do momento é

$$\langle p_0(t)p_0(t+\tau) \rangle = k_B T [\cos(\mathbf{A}^{1/2}\tau)]_{00}. \quad (1.12)$$

Esta é a auto-correlação de um processo gaussiano estacionário em uma variável. É bem conhecido [43] que tal processo é dito markoviano* se e somente se a auto-correlação é uma exponencial decrescente, i.e.,

$$\langle p_0(t)p_0(t+\tau) \rangle = k_B T e^{-\alpha|\tau|}, \quad (1.13)$$

onde α é uma constante positiva (escolhemos designá-la por α por razões que ficarão claras mais adiante). A próxima seção será dedicada à questão de encontrar a matriz de interação \mathbf{A} para a qual (1.12) assume a forma (1.13).

1.3 A Matriz de Interação

Nesse modelo supõe-se que os $2N + 1$ osciladores são idênticos e que eles são arranjados em uma cadeia com condições de contorno espacialmente periódicas. Isto significa que a matriz de interação \mathbf{A} é uma matriz cíclica e simétrica. Os elementos de tal matriz podem ser escritos na forma

$$A_{mn} = \frac{1}{2N+1} \sum_{k=-N}^N \omega_k^2 e^{i\frac{2\pi}{2N+1}k(m-n)}, \quad (1.14)$$

onde a simetria de A requer que

$$\omega_k^2 = \omega_{-k}^2. \quad (1.15)$$

Entretanto, em nosso estudo, reconhecemos que uma matriz cíclica escrita dessa forma pode ser representada como um caso particular de uma Matriz de Toeplitz, que veremos a seguir.

* Conforme alerta van Kampen [42], pág. 77, devemos tomar cuidado ao utilizar a designação "markoviano" para um processo físico. Quando falamos em "processo", normalmente nos referimos a um fenômeno que envolve o tempo. E em relação a um processo entendido desta forma, não faz sentido dizê-lo markoviano ou não, a menos que sejam especificadas as variáveis utilizadas para a sua descrição. A "arte", segundo van Kampen, é encontrar aquelas variáveis que são necessárias para tornar a descrição do fenômeno (aproximadamente) markoviana. Cientes desse abuso de linguagem, daqui em diante iremos utilizar (assim como os autores o fizeram) a expressão "processo markoviano".

1.3.1 Matrizes Circulantes e de Toeplitz

Uma matriz de Toeplitz é uma matriz $n \times n$, $T_n = [t_{k,j}; k, j = 0, 1, \dots, n-1]$ onde $t_{k,j} = t_{k-j}$, i.e, a matriz pode ser escrita na forma

$$\mathbf{T}_n = \begin{bmatrix} t_0 & t_{-1} & t_{-2} & \cdots & t_{-(n-1)} \\ t_1 & t_0 & t_{-1} & \cdots & \\ t_2 & t_1 & t_0 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \\ t_{n-1} & & \cdots & & t_0 \end{bmatrix}. \quad (1.16)$$

Tais matrizes possuem diversas aplicações em física, matemática e engenharia, e aparecem em estatística, como soluções de equações diferenciais e integrais, em processamento de sinais, etc (ver [12] e referências internas).

Um caso especial das matrizes de Toeplitz, que resulta de uma significativa simplificação, são as chamadas matrizes *circulantes*. Uma matriz circulante \mathbf{C} possui a forma

$$\mathbf{C}_n = \begin{bmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{(n-1)} \\ c_{n-1} & c_0 & c_1 & c_2 & \vdots \\ & c_{n-1} & c_0 & c_1 & \ddots \\ \vdots & & & \ddots & c_1 \\ c_1 & \cdots & c_{n-1} & c_0 & \end{bmatrix}, \quad (1.17)$$

onde cada linha/coluna é uma permutação cíclica da linha/coluna anterior. Sua estrutura pode ser caracterizada observando-se que as entradas (k, j) de \mathbf{C} são dadas por $C_{k,j} = c_{(j-k) \bmod n}$, onde *mod* significa a operação módulo.

Os autovalores ψ_k e autovetores $\mathbf{y}^{(k)}$ de \mathbf{C} são soluções de

$$\mathbf{C}\mathbf{y} = \psi\mathbf{y}, \quad (1.18)$$

ou, equivalentemente, de n equações de diferenças

$$\sum_{k=0}^{m-1} c_{n-m+k} y_k + \sum_{k=m}^{n-1} c_{k-m} y_k = \psi y_m, \quad m = 0, 1, \dots, n-1. \quad (1.19)$$

Trocando-se os índices mudos da soma tem-se

$$\sum_{k=0}^{n-1-m} c_k y_{k+m} + \sum_{k=n-m}^{n-1} c_k y_{k-(n-m)} = \psi y_m. \quad (1.20)$$

Pode-se resolver estas equações de diferenças da mesma forma que se resolvem equações diferenciais: supondo uma solução intuitiva e provando que ela é válida. Como a equação é linear e com coeficientes constantes, uma solução razoável seria $y_k = \rho^k$. Substituindo na equação (1.20) e cancelando os ρ_m tem-se

$$\sum_{k=0}^{n-1-m} c_k \rho^k + \rho^{-n} \sum_{k=n-m}^{n-1} c_k \rho^k = \psi. \quad (1.21)$$

Assim, escolhendo $\rho^{-n} = 1$, i.e., ρ é uma das n raízes distintas complexas da unidade, resulta o autovalor

$$\psi = \sum_{k=0}^{n-1} c_k \rho^k, \quad (1.22)$$

com o correspondente autovetor

$$\mathbf{y} = N^{-1/2} (1, \rho, \rho^2, \dots, \rho^m, \dots, \rho^{n-1})', \quad (1.23)$$

onde $\rho = e^{-2\pi i/n}$ e o linha denota a transposta. Sendo $\rho_{(m)}$ uma das n -ésimas raízes complexas da unidade, $\rho_{(m)} = e^{-2\pi i m/n} \equiv \rho^m$, o autovalor será

$$\psi_m = \sum_{k=0}^{n-1} c_k e^{-2\pi i m k/n}, \quad (1.24)$$

e o autovetor

$$\mathbf{y}^{(m)} = \frac{1}{\sqrt{n}} (1, \dots, e^{-2\pi i m/n}, \dots, e^{-2\pi i (n-1)m/n})'. \quad (1.25)$$

Assim, da equação de autovalores, temos

$$\mathbf{C}\mathbf{y}^{(m)} = \psi_m \mathbf{y}^{(m)}, \quad m = 0, 1, \dots, n-1. \quad (1.26)$$

Aqueles com alguma familiaridade no assunto reconhecerão que a equação (1.24) representa a Transformada Discreta de Fourier (TDF) da seqüência $\{c_k\}$, muito utilizada em problemas de engenharia de controle. Agora podemos retornar à matriz de interação do FKM.

De posse desses ingredientes, voltamos à (1.14), que nós reconhecemos tratar-se de

uma matriz circulante e simétrica. Utilizando a fórmula para o delta de Kronecker

$$\sum_{s=-N}^N e^{i\frac{2\pi}{2N+1}s(m-n)} = (2N+1)\delta_{m,n}, \quad -N \leq (m,n) \leq N,$$

aplicamos a TDF aos elementos da matriz \mathbf{A} ,

$$\begin{aligned} \sum_s A_s e^{i\frac{2\pi}{2N+1}ks} &= \frac{1}{2N+1} \sum_{k'} \sum_s \omega_{k'}^2 e^{-i\frac{2\pi}{2N+1}k's} e^{i\frac{2\pi}{2N+1}ks} \\ &= \sum_{k'} \omega_{k'}^2 \delta_{k,k'} = \omega_k^2. \end{aligned}$$

Assim, vale a equação de autovalores

$$\mathbf{A}\mathbf{y}^{(s)} = \omega_s^2 \mathbf{y}^{(s)}, \quad (1.27)$$

onde o autovetor $\mathbf{y}^{(s)}$ é um vetor coluna de $2N+1$ linhas, cujos elementos são

$$y_n^{(s)} = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} e^{\frac{2\pi i}{2N+1}sn}, \quad (1.28)$$

o que é equivalente à (1.25).

Agora, se $F(\mathbf{A})$ é uma função da matriz \mathbf{A} , então

$$[F(\mathbf{A})]_{m,n} = \frac{1}{2N+1} \sum_{k=-N}^N F(\omega_k^2) e^{i\frac{2\pi}{2N+1}k(m-n)}. \quad (1.29)$$

Observa-se que o caso especial de interações de primeiros vizinhos é aquele para o qual

$$\omega_s^2 = 4\omega_0^2 \sin^2 \left(\frac{\pi s}{2N+1} \right). \quad (1.30)$$

Vamos abrir aqui um parênteses com o objetivo de explorar um pouco mais esta equação.

1.3.2 Cadeia de Osciladores Acoplados

Este é um sistema físico de interesse e amplamente estudado [13]. Considere-se um sistema composto por $2N+1$ partículas de massa m , ligadas por molas de constante k . Sua lagrangiana é dada por (ver Saletan, pág.187 [14], Marion, seção 12.4, pág.466 [15] e

Kotkin e Serbo, seção 7 [16])

$$L = \frac{1}{2} \sum_{-N}^N \dot{x}_j^2 - \frac{1}{2} k \sum_{-N}^{N-1} (x_j - x_{j+1})^2, \quad (1.31)$$

onde a segunda soma corre sobre as molas, e não sobre as partículas.

A equação de movimento obtida a partir desta lagrangiana é (considerando-se as partículas intermediárias da cadeia)

$$\ddot{x}_j - \omega_0^2(x_{j-1} - 2x_j + x_{j+1}) = 0, \quad -N + 1 \leq j \leq N - 1, \quad (1.32)$$

onde ω_0 é a frequência natural, dada por $\omega_0^2 = k/m$.

Esse sistema é propício à propagação de pulsos na forma de ondas, e, portanto, procuraremos por soluções do tipo modos normais, com a forma de onda,

$$x_j(t) = B e^{i(kaj - \omega t)}, \quad (1.33)$$

onde B é a amplitude da onda e a é o comprimento de cada mola relaxada. Substituindo a solução em (1.32) e resolvendo para ω temos

$$\omega^2 = \omega_0^2 [2(1 - \cos ka)],$$

o que fornece a relação de dispersão entre ω e k

$$\omega^2 = 4\omega_0^2 \text{sen}^2 \left(\frac{ka}{2} \right). \quad (1.34)$$

De outra forma, considerando uma solução complexa na forma de ondas estacionárias, e mudando ligeiramente a notação (ver Kotkin, seção 7 [16])

$$x_n = B e^{i(\omega t \pm n\varphi)}. \quad (1.35)$$

Aplicando condições de contorno cíclicas (especialmente periódicas) para $2N+1$ partículas, ($n = -N, \dots, 0, \dots, N$, ou $n = 0, 1, \dots, 2N$), $x_0 = x_{2N+1}$, temos, para a parte real de (1.35),

$$x_0 = x_{2N+1} \rightarrow B \cos \omega t = B \cos (\omega t \pm (2N + 1)\varphi), \quad (1.36)$$

o que nos leva a

$$\varphi_s = \pm \frac{2\pi}{2N + 1} s, \quad s = 0, 1, 2, \dots, 2N. \quad (1.37)$$

Voltando à relação de dispersão, equação (1.34), obtemos a relação (1.30).

Fechando este parênteses e voltando ao nosso problema, consideraremos agora o limite $N \rightarrow \infty$, i.e, uma cadeia infinita. Fazendo a hipótese adicional de que ω_s^2 é uma função que varia lentamente com s , então (1.14) torna-se

$$A_{mn} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\theta) e^{i(m-n)\theta} d\theta, \quad (1.38)$$

onde foi definida a variável $\theta = 2\pi k / (2N + 1)$. Sendo

$$f(\theta) \equiv \frac{\omega_k^2}{\Delta k} \Big|_{k=(2N+1)\theta/2\pi}, \quad (1.39)$$

uma função par e $\sin[(m-n)\theta]$ ímpar, tem-se

$$A_{mn} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\theta) \cos[(m-n)\theta] d\theta. \quad (1.40)$$

A relação (1.29) torna-se, neste limite,

$$[F(\mathbf{A})]_{m,n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} F(f(\theta)) \cos[(m-n)\theta] d\theta. \quad (1.41)$$

A essa altura os autores se dizem preparados para voltar ao problema posto no final da última seção, ou seja, o de encontrar a matriz de interação \mathbf{A} para a qual

$$[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00} = e^{-\alpha|t|}. \quad (1.42)$$

Usando (1.29) para $m = n = 0$, com a escolha $[F(\mathbf{A})]_{00} = \cos \mathbf{A}^{1/2}t$, de modo que $F(\omega_k^2) = \cos \omega_k t$:

$$[F(\mathbf{A})]_{00} = \frac{1}{2N+1} \sum_k \cos \omega_k t,$$

e vê-se que, para uma matriz finita,

$$[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00} = \frac{1}{2N+1} \sum_k \cos(\omega_k t). \quad (1.43)$$

Mas, para qualquer escolha de ω_k , não é possível que esta função assuma a forma (1.42). Entretanto, no limite de N grande, pode-se usar (1.41) que fornece

$$[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(f^{1/2}(\theta)t) d\theta. \quad (1.44)$$

Considerando a condição imposta (1.42), esta torna-se uma equação integral para $f(\theta)$, cuja solução é

$$f(\theta) = \alpha^2 \text{tg}^2(\theta/2), \quad (1.45)$$

que pode ser verificada por substituição direta.

Todavia, quando (1.45) é substituída em (1.40) a expressão diverge. Para contornar esta dificuldade, os autores empregam um segundo processo de limite, definindo

$$f_{\omega_L} = \begin{cases} \alpha^2 \text{tg}^2(\theta/2), & \text{se } |\theta| < \theta_L \\ 0 & \text{se } \theta_L \leq |\theta| \leq \pi \end{cases} \quad (1.46)$$

onde

$$\omega_L \equiv \alpha \text{tg}(\theta_L/2), \quad (1.47)$$

é um corte de alta frequência no espectro de auto-freqüências que garante que os elementos de matriz (1.14) serão finitos. Este corte na frequência corresponde a um “tempo de interação microscópico”, ω_L^{-1} , que é assumido ser muito pequeno comparado com o “tempo de relaxação macroscópico”, α^{-1} . O resultado (1.42) vale apenas no limite $\omega_L \rightarrow \infty$. Alternativamente, pode-se dizer que para $\omega_L \gg \alpha$ (aproximação de amortecimento fraco, conforme veremos) o resultado (1.42) vale para tempos grandes comparados com ω_L^{-1} . Mais adiante, neste trabalho, reconheceremos essa como a aproximação “*coarse-graining*” em outra abordagem. Observamos aqui, novamente, a importância da escolha de uma escala temporal adequada para a análise do fenômeno: unicamente dentro de um intervalo de tempo Δt , onde vale

$$\omega_L^{-1} \ll \Delta t \approx \alpha^{-1},$$

é que a condição (1.42) tem validade e, portanto, o processo torna-se markoviano. Resumindo, esse modelo é aquele no qual os elementos da matriz de interação são dados por (1.38) com $f(\theta)$ dada por (1.46), com $\omega_L \gg \alpha$. Se em (1.44) fizermos a mudança de variáveis $\omega = \alpha \text{tg}(\theta/2)$, encontramos

$$[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00} = \frac{1}{\pi} \int_{-\omega_L}^{\omega_L} \frac{\alpha \cos(\omega t)}{\omega^2 + \alpha^2} d\omega. \quad (1.48)$$

No limite $\omega_L \rightarrow \infty$ esta expressão torna-se $e^{-\alpha|t|}$ (ver Apêndice B.1) e, portanto, o processo gaussiano $p_0(t)$ torna-se também markoviano.

Na seção seguinte, apresentamos a quantização canônica da Equação de Langevin, via princípio da correspondência.

1.4 A Equação de Langevin

Tendo visto que este modelo levou a um processo estocástico gaussiano e markoviano para uma coleção de osciladores acoplados, os autores se perguntam se este modelo leva também a uma Equação de Langevin para o movimento de uma partícula acoplada a um banho térmico constituído de tais osciladores. Nesta seção reproduziremos a demonstração de Ford, Kac e Mazur de que este é, de fato, o caso.

Eles iniciam selecionando, da cadeia de $2N + 1$ osciladores, a partícula com índice ‘0’ para ser a partícula browniana; os $2N$ osciladores restantes representam o banho térmico. Conforme veremos mais adiante, este procedimento será alvo de controvérsia entre alguns autores. A força externa sobre a partícula é denotada por $F(t) \equiv F(q_0(t))$. Se definirmos $F(t)$ como sendo uma matriz coluna de $2N + 1$ linhas cujos elementos são todos nulos, exceto o ‘0’-ésimo elemento, que é $F(t)$, então as equações de movimento para a partícula acoplada ao banho térmico são

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{p}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\mathbf{A}\mathbf{q} + \mathbf{F}(t). \quad (1.49)$$

A solução formal dessas equações é (ver Apêndice B.2)

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(t) = & \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)\mathbf{q}(0) + \mathbf{A}^{-1/2}\text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)\mathbf{p}(0) + \\ & + \mathbf{A}^{-1/2} \int_0^t F(t')\text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}(t-t')) dt', \end{aligned} \quad (1.50)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(t) = & -\mathbf{A}^{-1/2} \sin(\mathbf{A}^{1/2}t)\mathbf{q}(0) + \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)\mathbf{p}(0) + \\ & + \int_0^t F(t') \cos(\mathbf{A}^{1/2}(t-t')) dt'. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Tomando agora o ‘0’-ésimo elemento de (1.49) para $\dot{\mathbf{p}}(t)$, i.e., $\dot{p}_0(t) = -\sum_j [\mathbf{A}]_{0j} q_j(t) + F(t)$, e substituindo (1.50) para $q_0(t)$, elimina-se $p_0(t)$ a fim de separar a contribuição da auto-interação do ‘0’-ésimo oscilador da interação deste com as partículas do banho térmico, obtendo

$$\begin{aligned} \dot{p}_0(t) - F(t) = & -\frac{[\mathbf{A}^{1/2}\text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}}{[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}} p_0(t) + \\ & - \sum_j \left(\frac{[\mathbf{A}^{1/2}\text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}}{[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}} [\mathbf{A}^{1/2}\text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} + [\mathbf{A} \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} \right) q_j(0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{j \neq 0} \left(\frac{[\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}}{[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}} [\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} - [\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} \right) p_j(0) \\
& + \frac{[\mathbf{A}^{1/2} \sin(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}}{[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}} \int_0^t [\cos(\mathbf{A}^{1/2}(t-t'))]_{00} F(t') dt' \\
& - \int_0^t [\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}(t-t'))]_{00} F(t') dt', \tag{1.52}
\end{aligned}$$

resultado este que pode ser reescrito na forma

$$\begin{aligned}
\dot{p}_0 - F(t) &= -\gamma(t)p_0(t) + E(t) + \\
& + \int_0^t [\gamma(t) - \gamma(t-t')] \cdot [\cos(\mathbf{A}^{1/2}(t-t'))]_{00} F(t') dt', \tag{1.53}
\end{aligned}$$

onde

$$\gamma(t) = \frac{[\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}}{[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}} = -\frac{d}{dt} \ln [\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00}, \tag{1.54}$$

e

$$\begin{aligned}
E(t) &= - \sum_j \left(\gamma(t) [\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} + [\mathbf{A} \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} \right) q_j(0) + \\
& + \sum_j \left(\gamma(t) [\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} - [\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} \right) p_j(0). \tag{1.55}
\end{aligned}$$

Como podemos notar, o coeficiente de $p_0(0)$ anula-se na expressão (1.55). A equação (1.53) é a equação de movimento para a partícula browniana. O lado direito é a força líquida exercida sobre a partícula browniana pelas outras partículas, i.e, pelo banho térmico. O primeiro termo representa a força de atrito, com o coeficiente de atrito $\gamma(t)$ dependente do tempo; o segundo termo representa a força flutuante $E(t)$, dependente do estado inicial do banho térmico, e o terceiro termo representa o efeito de *memória*, dependente da história passada de movimento da partícula browniana.

Em seguida os autores supõem que a interação entre a partícula browniana e o banho térmico é invariante sob translações (mais adiante veremos que esta hipótese requer algumas observações). Conseqüentemente,

$$\sum_j A_{ij} = 0, \tag{1.56}$$

o que implica que (1.55) pode ser reescrita como

$$E(t) = - \sum_{j \neq 0} \left(\gamma(t) [\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} + [\mathbf{A} \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} \right) (q_j(0) - q_0(0)) + \sum_{j \neq 0} \left(\gamma(t) [\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} - [\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} \right) p_j(0). \quad (1.57)$$

Assim, a força flutuante depende unicamente das coordenadas iniciais das partículas do banho térmico em relação às coordenadas iniciais da partícula browniana, e é independente da coordenada e momento iniciais da partícula browniana.

Voltamos agora ao modelo da matriz de interação \mathbf{A} discutida na seção anterior, cujos elementos são dados por (1.38), e $f(\theta)$ dado por (1.46) no limite $\omega_L \gg \alpha$. Para esse modelo vale a condição (1.42) e, de (1.54), $\gamma(t) = \alpha$. Vemos que neste limite o coeficiente de atrito γ é igual à constante α da Equação de Langevin - daí o motivo da nossa escolha em (1.13). Isto implica que o último termo de (1.53) - o termo de memória - anula-se nesse limite.

Portanto, (1.53) assume a forma da conhecida Equação de Langevin

$$\dot{p}_0 - F(t) = -\alpha p_0(t) + E(t), \quad (1.58)$$

com a ‘força de Langevin’ dada por

$$E(t) = - \sum_j [\alpha \mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t) + \mathbf{A} \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} q_j(0) + \sum_j [\alpha \cos(\mathbf{A}^{1/2}t) - \mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} p_j(0). \quad (1.59)$$

As propriedades estatísticas de $E(t)$ tornam-se (novamente, no limite $N \rightarrow \infty$ e $\omega_L \gg \alpha$) aquelas de um processo puramente gaussiano e aleatório. Isto depende, é claro, das hipóteses estatísticas a respeito das coordenadas e momentos iniciais.

Com o objetivo de impor que em $t = 0$ o banho térmico esteja em equilíbrio térmico à temperatura T , os autores supõem que a distribuição inicial é a canônica, eq. (1.6). Entretanto, eles observam que isto é, estritamente falando, impossível, desde que (1.56) implica que $\omega_0 = 0$, e portanto $\det \mathbf{A} = 0$, i.e, a distribuição canônica torna-se imprópria. Ford, Kac e Mazur contornam este problema modificando a matriz \mathbf{A} para

$$\mathbf{A} + \varepsilon_N \mathbf{I}, \quad (1.60)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade, ε_N é positivo para todo N finito, com $\varepsilon_N \rightarrow 0$ para $N \rightarrow \infty$ suficientemente rápido. Os autores alertam o leitor que utilizaram o mesmo símbolo \mathbf{A} para denotar três matrizes diferentes - (1.14), (1.38) no limite $\omega_L \gg \alpha$ e (1.60) - que não devem ser confundidas.

Sendo a distribuição (1.6) de $q_j(0)$ e $p_j(0)$ gaussiana, $E(t)$ é um processo gaussiano. Utilizando (1.8), obtemos para a função de correlação de $E(t)$

$$\langle E(t)E(t') \rangle = k_B T [(\alpha + \mathbf{A}) \cos \mathbf{A}^{1/2}(t - t')]_{00}. \quad (1.61)$$

Usando agora (1.44) e a substituição $\omega = \alpha \tan \theta/2$ de (1.48), temos

$$\begin{aligned} \langle E(t)E(t') \rangle &= \frac{k_B T}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (\alpha^2 + \alpha^2 \text{tg}^2(\theta/2)) \cos(\alpha \text{tg}(\theta/2)(t - t')) d\theta \\ &= \frac{k_B T \alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega(t - t')) d\omega. \end{aligned} \quad (1.62)$$

E, da representação da delta de Dirac, chegamos a

$$\langle E(t)E(t') \rangle = 2\alpha k_B T \delta(t - t'). \quad (1.63)$$

Assim, $E(t)$ é um processo gaussiano estocástico e (1.58) é a Equação de Langevin para o movimento browniano. Para que a equação (1.53) torne-se a Equação de Langevin são apontadas três condições: (i) o coeficiente de atrito γ deve ser independente do tempo; (ii) o processo estocástico $E(t)$ deve corresponder a um processo gaussiano puramente aleatório, e, (iii) os efeitos de memória devem desaparecer.

1.5 Dinâmica de Osciladores Quânticos Acoplados

Nesta seção apresentamos a discussão de Ford, Kac e Mazur sobre as modificações necessárias para uma descrição quântica do movimento dos osciladores acoplados. Os mesmos constatam que a maioria dos procedimentos e resultados desenvolvidos anteriormente permanecem inalterados neste caso. Em particular, o hamiltoniano (1.3) da seção 2.2 não muda, mas agora as coordenadas q_i e momentos p_j são operadores cujas relações de comutação são dadas por

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0, \quad [q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (1.64)$$

As equações de movimento (1.4) são equações de movimento na representação de Heisen-

berg, e suas soluções relacionam os operadores de Heisenberg num tempo t e no instante inicial.

Em $t = 0$ os autores assumem que o sistema está em equilíbrio à temperatura T . Numa descrição quântica, isto significa que o estado inicial do sistema é descrito pela matriz densidade correspondente ao *ensemble canônico*

$$\rho(q(0), p(0)) = e^{-\beta H(q(0), p(0))}. \quad (1.65)$$

O valor esperado de qualquer função $F(q(0), p(0))$ dos operadores $q(0)$ e $p(0)$ é dado por

$$\langle F \rangle \equiv \frac{\text{Tr} [F(q(0), p(0)) \rho(q(0), p(0))]}{\text{Tr} [\rho(q(0), p(0))]} \quad (1.66)$$

Como no caso clássico, são consideradas as propriedades dos operadores estocásticos $q_i(t)$ e $p_i(t)$ que resultam da equação de movimento e da matriz densidade inicial. Estas propriedades são descritas em termos das funções de correlação, a mais simples sendo as funções de correlação de pares (ver Apêndice A.2). Estas são dadas por

$$\begin{aligned} \langle q_j(t) p_k(t + \tau) \rangle &= \left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{A}^{1/2} \left(-\text{ctgh} \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{2k_B T} \right) \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2} \tau) + i \cdot \cos(\mathbf{A}^{1/2} \tau) \right) \right]_{jk}, \\ \langle q_j(t) q_k(t + \tau) \rangle &= \left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{A}^{-1/2} \left(\text{ctgh} \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{2k_B T} \right) \cos(\mathbf{A}^{1/2} \tau) + i \cdot \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2} \tau) \right) \right]_{jk}, \\ \langle p_j(t) p_k(t + \tau) \rangle &= \left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{A}^{1/2} \left(\text{ctgh} \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{2k_B T} \right) \cos(\mathbf{A}^{1/2} \tau) + i \cdot \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2} \tau) \right) \right]_{jk}. \end{aligned} \quad (1.67)$$

Observa-se que as funções de correlação dependem somente da variação temporal $\tau = t' - t$. Além disso, no limite $\hbar \rightarrow 0$ ($\hbar\omega \ll k_B T$), estas expressões tornam-se idênticas às expressões clássicas.

Correlações de um número ímpar de q 's e p 's anulam-se; correlações de um número par de q 's e p 's são iguais à soma do produto de correlações de pares, sendo a soma sobre todos os pares possíveis de operadores, *com a ordem preservada*.

Os autores ressaltam que há muitas e, na verdade infinitas, correlações de operadores quânticos que podem ser associadas às correlações clássicas, correspondendo a diferentes ordenamentos dos operadores quânticos. Uma outra dificuldade apontada advém do fato de que o produto de dois operadores hermitianos que não comutam não é hermitiano e, portanto, não corresponde a um observável físico. Isto pode ser visto explicitamente nas correlações (1.67), que são funções complexas, enquanto que o valor esperado de um observável físico deve ser real.

Ford, Kac e Mazur resolvem tais dificuldades utilizando uma *convenção* para o produto de operadores - o ordenamento normal - com as seguintes propriedades[†]: (i) o produto é independente da ordem dos operadores; (ii) o produto de um número qualquer de operadores hermitianos é também hermitiano; (iii) a regra clássica de decomposição de correlações de ordens superiores em pares permanece válida.

Expandindo os operadores $\mathbf{q}(0)$ e $\mathbf{p}(0)$ em termos dos operadores para os modos normais (ver Apendice A.2), temos

$$\begin{aligned}\mathbf{q}(0) &= i \sum_s \xi^{(s)} \left(\frac{\hbar}{2\omega_s} \right)^{1/2} (a_s - a_s^*) \\ \mathbf{p}(0) &= \sum_s \xi^{(s)} \left(\frac{\hbar\omega_s}{2} \right)^{1/2} (a_s + a_s^*),\end{aligned}\tag{1.68}$$

onde $\xi^{(s)}$ é o autovetor da matriz de interação \mathbf{A} e ω_s^2 é o seu autovalor associado.

$$\mathbf{A}\xi^{(s)} = \omega_s^2 \xi^{(s)}.\tag{1.69}$$

O operador a_s é o operador de abaixamento para o s -ésimo modo normal e a_s^* o correspondente operador de levantamento, na representação de número. Suas relações de comutação são as usuais,

$$[a_s, a_r^*] = \delta_{sr}, \quad [a_s, a_r] = [a_s^*, a_r^*] = 0.\tag{1.70}$$

Os operadores dependentes do tempo são expressos em termos de a_s e a_r^* , substituindo (1.68) na solução formal das equações dos osciladores (1.5), resultando em

$$\begin{aligned}\mathbf{q}(t) &= i \sum_s \xi^{(s)} \left(\frac{\hbar}{2\omega_s} \right)^{1/2} (a_s e^{-i\omega_s t} - a_s^* e^{i\omega_s t}) \\ \mathbf{p}(t) &= \sum_s \xi^{(s)} \left(\frac{\hbar\omega_s}{2} \right)^{1/2} (a_s e^{-i\omega_s t} + a_s^* e^{i\omega_s t}).\end{aligned}\tag{1.71}$$

O ordenamento normal dos operadores a_s e a_r^* é definido num produto onde a_r^* é escrito à esquerda de a_s . Devido às relações de comutação (1.70), isto define uma ordem única. Um produto normal de $\mathbf{q}_j(t)$ e $\mathbf{p}_k(t)$ é designado por dois pontos no início e final dos fatores ($: q_j(t_1) p_k(t_2) :$), produto este que preenche os requisitos que foram exigidos.

As correlações de pares do produto normal de $q_j(t)$ e $p_k(t + \tau)$ são dadas por (ver

[†] Um cálculo da correlação de pares utilizando outro tipo de ordenamento, o ordenamento simétrico, mostra que os resultados obtidos são idênticos àqueles com o ordenamento normal.

Apêndice A.2)

$$\begin{aligned}
 \langle : q_j(t) p_k(t + \tau) : \rangle &= - \left[P \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{k_B T} \right) \mathbf{A}^{-1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2} \tau) \right]_{jk}, \\
 \langle : q_j(t) q_k(t + \tau) : \rangle &= \left[P \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{k_B T} \right) \mathbf{A}^{-1} \cos(\mathbf{A}^{1/2} \tau) \right]_{jk}, \\
 \langle : p_j(t) p_k(t + \tau) : \rangle &= \left[P \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{k_B T} \right) \cos(\mathbf{A}^{1/2} \tau) \right]_{jk},
 \end{aligned} \tag{1.72}$$

onde foi introduzida aqui a chamada função de Planck,

$$P(x) \equiv \frac{k_B T x}{e^x - 1}. \tag{1.73}$$

Quando $x = \hbar \omega / k_B T$ a função de Planck é a energia média, relativa ao estado fundamental, de um oscilador quântico de frequência ω . Quando $x \rightarrow 0$, $P(x) \rightarrow k_B T$ (equipartição clássica da energia).

A autocorrelação para o momento do oscilador de índice '0' é

$$\langle : p_0(t) p_0(t + \tau) : \rangle = \left[P \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{k_B T} \right) \cos(\mathbf{A}^{1/2} \tau) \right]_{00}. \tag{1.74}$$

Nesta altura Ford, Kac e Mazur se perguntam se há, analogamente ao processo clássico, uma matriz \mathbf{A} para a qual (1.74) torna-se uma exponencial (real decrescente), que caracteriza um processo gaussiano markoviano. Eles respondem afirmativamente, mas que tal matriz é dependente da temperatura e, por isso, não é de interesse físico.

Utilizando o modelo da matriz de interação discutido anteriormente, no qual os elementos de matriz são dados por (1.40) com $f(\theta)$ dada por (1.45) no limite $\omega_L \gg \alpha$, obtém-se

$$\langle : p_0(t) p_0(t + \tau) : \rangle = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty P \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right) \frac{\alpha \cdot \cos(\omega \tau)}{\omega^2 + \alpha^2} d\omega. \tag{1.75}$$

No limite $\hbar \rightarrow 0$, esta expressão torna-se idêntica ao resultado clássico obtido anteriormente, e o processo torna-se markoviano.

1.6 A Equação de Langevin Quântica

Seguindo o procedimento de Ford, Kac e Mazur, reescreveremos nesta seção a Equação de Langevin para o caso quântico (formalmente idêntica à anterior).

Os autores destacam que as manipulações formais realizadas na seção 1.4 - Equação

de Langevin - para derivar esta equação não se alteram quando os operadores q 's e p 's são interpretados como operadores quânticos. Em particular, quando a matriz é dada pelo modelo da seção 1.3, na qual os elementos são dados por (1.40) com $f(\theta)$ dada por (1.45) no limite $\omega_L \gg \alpha$, obtém-se uma equação de movimento para operadores que é formalmente idêntica à Equação de Langevin, (1.58), i.e,

$$\dot{p}_0 - F(t) = -\alpha p_0(t) + E(t), \quad (1.76)$$

onde

$$E(t) = - \sum_j [\alpha \mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t) + \mathbf{A} \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} q_j(0) + \sum_j [\alpha \cos(\mathbf{A}^{1/2}t) - \mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{0j} p_j(0). \quad (1.77)$$

A Equação de Langevin para operadores é uma equação de movimento para os operadores de Heisenberg dependentes do tempo, $q_0(t)$ e $p_0(t)$. O operador $F(t)$ é um operador força externa, definido por $F(t) \equiv (i\hbar)^{-1}[p_0(t), V(q_0(t), t)]$, sendo $V(q_0(t), t)$ o potencial (dependente do tempo) da força externa. O operador força estocástica $E(t)$ é independente de $p_0(0)$ e $q_0(0)$, uma vez que seus coeficientes na expressão (1.77) anulam-se para o modelo considerado para a matriz de interação. Devido às relações de comutação (1.70), isto significa que $[q_0(0), E(t)] = [p_0(0), E(t)] = 0$.

Os autores supõem que o estado estatístico das coordenadas iniciais e momentos do banho térmico é descrito pela matriz densidade (1.65). Em $t = 0$ o banho térmico está em equilíbrio com a partícula browniana livre fictícia. Como $E(t)$ é independente das coordenadas iniciais e momentos da partícula browniana, suas propriedades não mudam devido à dependência da matriz densidade com esses operadores. A função de correlação para $E(t)$ no ordenamento normal é obtida usando-se (1.72),

$$\langle : E(t)E(t + \tau) : \rangle = [(\alpha + \mathbf{A})P(\hbar\mathbf{A}^{1/2}/k_B T) \cos(\mathbf{A}^{1/2}\tau)]_{00}. \quad (1.78)$$

Neste modelo, é utilizada a expressão geral (1.45) com $f(\theta)$ dada por $f(\theta) = \alpha^2 \text{tg}^2(\theta/2)$; assim

$$\begin{aligned} \langle : E(t)E(t + \tau) : \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \alpha^2 (1 + \text{tg}^2(\theta/2)) \\ &\quad \times P\left(\frac{\hbar\alpha}{k_B T} |\text{tg}(\theta/2)|\right) \cos(\alpha\tau \text{tg}(\theta/2)) d\theta \end{aligned}$$

$$= \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty P\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \cos(\omega\tau) d\omega. \quad (1.79)$$

Correlações de produtos normais de $E(t)$ de ordens mais altas são novamente dadas pela regra de processos gaussianos aleatórios. Assim, as propriedades estocásticas do operador força de Langevin, $E(t)$, no seu ordenamento normal, são idênticas àquelas de um processo gaussiano estacionário cuja covariância é dada por (1.79). No limite $\hbar \rightarrow 0$, esta covariância aproxima-se da correspondente clássica, (1.63), que é a correlação de um processo gaussiano puramente estocástico. Entretanto, para \hbar finito, (1.79) é a covariância de um processo gaussiano não markoviano. Ford, Kac e Mazur destacam que esta é a principal diferença entre as equações de Langevin clássica e quântica para o seu modelo.

O artigo encerra com dois exemplos de aplicação da Equação de Langevin quântica; voltaremos a um desses exemplos ao final do capítulo 3.

1.7 Discussão do Modelo FKM

O modelo FKM é interessante sob vários aspectos. Primeiro, porque apesar da Equação de Langevin ter sido largamente utilizada desde o início do século XX, parece ter sido somente neste artigo de 1965 que ela foi realmente deduzida de primeiros princípios. Segundo, este modelo proporciona (como de fato nos proporcionou) a utilização de elementos matemáticos por vezes pouco explorados em física teórica, tais como as matrizes de Toeplitz, e sua aplicação na análise de problemas fenomenologicamente bastante ricos, como é o caso das cadeias de osciladores acoplados. Entretanto, algumas críticas e observações merecem ser feitas.

A hipótese assumida de que a interação entre a partícula browniana e o banho térmico é invariante sob translações, representada pela equação (1.56), não pode ser válida quando são assumidas condições de contorno periódicas, no caso *discreto*, pois o determinante da matriz de interação é singular. Apenas quando fazemos o número de osciladores tender a infinito, $N \rightarrow \infty$, é que podemos assumir aquela hipótese, *regularizando-se* a matriz original através da introdução de elementos diagonais infinitesimais, como em (1.60). Esta é uma dificuldade inerente ao modelo e não resolvida de forma completamente satisfatória por Ford, Kac e Mazur, no artigo original. Uma outra maneira de contornar este problema é apresentada no artigo de Kim [17].

Ainda em relação à matriz de interação, no caso quântico, os autores alegam tê-la obtido, fazendo com que a expressão (1.74) assumia a forma exponencial real decrescente (eq. (1.13)), mas que ela não é de interesse físico. Dadas as complicações matemáticas

desta operação, achamos difícil acreditar em tal realização. Aliás, as dificuldades em se trabalhar com essa matriz talvez sejam a razão pela qual ela não mais aparece em nenhum outro trabalho da área, salvos aqueles raros (como o de Kim, p.ex.) que tem por objetivo discutir o modelo FKM.

Na dedução da equação de Langevin clássica, os autores iniciam selecionando, da cadeia de $2N + 1$ osciladores, a partícula com índice '0' para ser a partícula browniana, os $2N$ osciladores restantes representando o banho térmico. Este procedimento difere do procedimento usual, um dos quais será visto no capítulo quarto deste trabalho, na dedução de Cohen *et al.*, que tratam separadamente a partícula \mathcal{S} do reservatório \mathcal{R} . Seguindo esta mesma linha, Saito *et al* fazem uma crítica explícita ao modelo FKM [18].

Outro aspecto deste modelo refere-se à quantização da equação de Langevin. Causa certa estranheza partir de uma distribuição canônica clássica, bem como utilizar o limite clássico como $\hbar \rightarrow 0$. Veremos no terceiro capítulo que é possível introduzir a temperatura num estágio anterior dessa construção, e calcular as funções de correlação de pares de outra maneira, utilizando uma teoria de campos à temperatura finita.

Por outro lado, há trabalhos, como o de Keller e Bonilla [19], que vêm corroborar a abordagem original de FKM. Esse trabalho, embora não trate explicitamente do modelo FKM, mostra uma construção da Equação de Langevin que não separa a partícula browniana do banho térmico. Para uma discussão adicional sobre o modelo FKM, ver o artigo de Lewis e Maassen [20].

Finalizando esta discussão, Ford, Kac e Mazur tinham por objetivo estudar o movimento browniano, um processo sabidamente markoviano. Por este motivo, foram feitas diversas aproximações e manipulações matemáticas, visando eliminar o termo de memória, que parecia *surgir naturalmente no modelo*. No capítulo seguinte veremos que Ford e outros colaboradores mudam a forma de tratar o problema e optam por uma construção da Equação de Langevin que incorpora desde o princípio processos *não-markovianos*.

Capítulo 2

Equação de Langevin Quântica II - O Modelo do Oscilador Independente

Cerca de 20 anos depois do primeiro trabalho (FKM), Ford e Kac publicam um novo artigo sobre a Equação de Langevin Quântica [21]. Neste, a matriz de interação construída no modelo anterior não mais é utilizada e os mesmos buscam uma dedução da equação quântica de Langevin a partir da equação de movimento de Heisenberg para os operadores da partícula browniana acoplada ao banho térmico de osciladores. Esta dedução é muito similar ao trabalho de Cohen *et al* que será visto no Capítulo 4, sendo considerada atualmente a dedução mais “tradicional” dessa equação. Veremos que este trabalho antecipa o último artigo dessa “série”, a ser visto neste capítulo, onde Ford e colaboradores desenvolvem o modelo do oscilador independente.

2.1 Prelúdio: O Artigo de FK

Nesse trabalho, Ford e Kac se propõem a repetir a derivação da Equação de Langevin Quântica, feita anteriormente (FKM), de uma maneira mais simples, e destacar certos aspectos dessa dedução que consideram de interesse.

A Equação de Langevin Quântica resulta da equação de movimento de Heisenberg para o operador coordenada da partícula $x(t)$ (restringindo-se ao movimento em uma dimensão) e tem a forma

$$m\ddot{x} + \alpha\dot{x} + V'(x) = F(t), \tag{2.1}$$

onde $V(x)$ é o potencial externo, o linha indica a derivada em relação à x e $F(t)$ é o

operador força estocástica, com a função de correlação (simétrica),

$$\frac{1}{2}\langle F(t)F(0) + F(0)F(t) \rangle = \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty \hbar\omega \operatorname{ctgh}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \cos(\omega t) d\omega, \quad (2.2)$$

e com comutador

$$[F(t), F(0)] = -\frac{2i\hbar\alpha}{\pi} \int_0^\infty \omega \operatorname{sen}(\omega t) d\omega = 2i\hbar\alpha\delta'(t). \quad (2.3)$$

$F(t)$ tem a propriedade gaussiana, i.e, correlações de um número *ímpar* de fatores de F anulam-se, correlações simétricas de um número *par* de fatores são iguais à soma dos produtos de correlações de pares, a soma correndo sobre todos os pares (ver Apêndice A.2).

Novamente, os autores destacam que se trata de uma descrição ‘contraída’ do movimento da partícula, no sentido que o banho térmico, que possui um número infinito de graus de liberdade, é descrito por um único parâmetro, α , o coeficiente de atrito (constante). Este parâmetro, juntamente com a temperatura absoluta T , especifica as propriedades estatísticas da força estocástica $F(t)$, que são dadas pela função de correlação e pelo comutador.

Como no trabalho anterior, eles se restringem ao movimento em uma dimensão, e seguem o que designam programa de Gibbs, que consiste de três etapas: (i) resolver as equações de movimento para o sistema constituído da partícula acoplada ao banho térmico - esta solução consistirá em expressões explícitas para as variáveis dinâmicas num instante t , em função dos seus valores iniciais; (ii) assumir que os valores iniciais do banho térmico estão estatisticamente distribuídos de acordo com o ensemble canônico; (iii) mostrar que o operador coordenada da partícula browniana obedece à Equação de Langevin Quântica.

Sobre esta última etapa, Ford e Kac enfatizam dois pontos. Primeiro, que

“...a Equação de Langevin Quântica é uma equação idealizada, que é apenas **aproximadamente correta** para qualquer sistema real. Isto significa que ela pode ser obtida como uma consequência exata do programa **apenas para um modelo específico**, i.e, fazendo **hipóteses especiais sobre os parâmetros do modelo**.” (FK, pág. 804-5, destaques nossos [21]).

Isto parece deixar claro que os autores estão conscientes de que a Equação de Langevin Quântica aqui deduzida é *dependente do modelo*. Veremos que no final deste artigo esta afirmação é modificada.

O segundo ponto enfatizado é que, para tempos curtos, a descrição que resulta dos

passos (i) e (ii) irá refletir, em geral, o estado inicial assumido para o banho térmico. Apenas depois de um curto período de relaxação, durante o qual o transiente inicial decai e a partícula “esquece” o estado inicial, é que a equação de Langevin, caracterizada pelo coeficiente de atrito constante, surge (*coarse-graining*). Este esclarecimento parece indicar também que os autores entendem a validade da equação unicamente para um processo markoviano. Passemos à dedução da equação.

2.1.1 Dedução da Equação de Langevin

O modelo aqui considerado é aquele no qual uma partícula browniana é cercada por um número grande de partículas independentes que representam o banho térmico, cada uma destas ligada àquela partícula por meio de uma mola. O hamiltoniano deste sistema é então

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2}k_j(q_j - x)^2 \right). \quad (2.4)$$

Aqui x e p são os operadores de coordenadas e momento da partícula browniana, enquanto q_j e p_j são aqueles para a j -ésima partícula do banho térmico. Estas possuem, cada uma, massa m_j e as molas que as ligam com a partícula browniana tem constante elástica k_j . Finalmente $V(x)$ é a energia potencial correspondente à força externa sobre a partícula browniana. Veremos que este hamiltoniano é exatamente o mesmo do modelo de Oscilador Independente, tema do próximo artigo. Os autores enfatizam que este modelo não é original, sendo encontrado nos trabalhos de Caldeira e Leggett [22] e, originalmente, em Magalinskij [23].

A este hamiltoniano impõe-se as relações de comutação canônicas, a tempos iguais,

$$[x, p] = i\hbar, \quad [q_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}, \quad (2.5)$$

todos os outros comutadores sendo nulos. As equações de movimento para os operadores de Heisenberg dependentes do tempo são obtidas usando as equações

$$i\hbar\dot{O} = [O, H], \quad (2.6)$$

que fornece a derivada temporal de um operador arbitrário O . Tem-se então

$$\dot{x} = \frac{1}{m}p, \quad \dot{p} = -V'(x) + \sum_j k_j(q_j - x), \quad (2.7)$$

para a partícula browniana, e

$$\dot{q}_j = \frac{1}{m_j} p_j, \quad \dot{p}_j = -k_j(q_j - x), \quad (2.8)$$

para a j -ésima partícula do banho térmico. A solução formal destas equações é (ver solução e comentário no Apêndice B.3)

$$q_j(t) = q_j(0) \cos(\omega_j t) + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \text{sen}(\omega_j t) + x(t) - x(0) \cos(\omega_j t) + \int_0^t \cos(\omega_j(t-t')) \dot{x}(t') dt', \quad (2.9)$$

onde a frequência natural do oscilador é

$$\omega_j = (k_j/m_j)^{1/2}. \quad (2.10)$$

Substituindo nas equações da partícula browniana, (2.7), resulta

$$m\ddot{x} + \int_0^t B(t-t') \dot{x}(t') dt' + V'(x) + B(t)x(0) = F(t), \quad (2.11)$$

onde o operador força $F(t)$ é dado por

$$F(t) = \sum_j (q_j(0)k_j \cos(\omega_j t) + p_j(0)\omega_j \text{sen}(\omega_j t)), \quad (2.12)$$

com

$$B(t) = \sum_j k_j \cos(\omega_j t). \quad (2.13)$$

Observe que na equação (2.11) as variáveis iniciais do banho térmico, i.e, $q_j(0)$ e $p_j(0)$, aparecem através de $F(t)$ apenas; fora isso, temos somente variáveis da partícula. Com este resultado os autores completam a etapa (i) do programa proposto.

Na próxima etapa é considerada a média estatística sobre as variáveis iniciais do banho térmico. Isto é feito assumindo que em $t = 0$ os osciladores estão distribuídos canonicamente com respeito ao hamiltoniano do oscilador livre:

$$H_0 = \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{k_j}{2} q_j^2 \right). \quad (2.14)$$

Introduz-se também a média de um operador arbitrário O ,

$$\langle O \rangle \equiv \frac{\text{Tr} \{ O e^{-H_0/k_B T} \}}{\text{Tr} \{ e^{-H_0/k_B T} \}}, \quad (2.15)$$

onde o traço (parcial) é tomado com respeito às coordenadas dos osciladores. No Apêndice A.2 mostramos que

$$\begin{aligned} \langle q_j(0)q_k(0) \rangle &= \frac{\langle p_j(0)p_k(0) \rangle}{(m_j\omega_j)^2} = \frac{\hbar \text{ctgh}(\hbar\omega_j/2k_B T)}{2m_j\omega_j} \delta_{jk}, \\ \langle q_j(0)p_k(0) \rangle &= -\langle p_k(0)q_j(0) \rangle = \frac{i\hbar}{2} \delta_{jk}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Além disso, temos novamente aqui a propriedade gaussiana: o valor esperado de um número *ímpar* de fatores de $q_j(0)$ e $p_j(0)$ anula-se; para um número *par* de fatores o valor esperado é a soma dos produtos de pares com a ordem dos fatores preservada (ver FKM). Através desses resultados, chega-se na correlação simétrica do operador força (2.12),

$$\frac{1}{2} \langle F(t)F(t') + F(t')F(t) \rangle = \sum_j \frac{k_j \hbar \omega_j}{2} \text{ctgh} \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right) \cos(\omega_j(t-t')); \quad (2.17)$$

$F(t)$ obviamente também possui a propriedade gaussiana, o que segue da propriedade correspondente do produto de $q_j(0)$ e $p_j(0)$. Finalmente, a partir das relações de comutação canônicas (2.5), chega-se a

$$[F(t), F(t')] = -i\hbar \sum_j k_j \omega_j \text{sen}(\omega_j(t-t')). \quad (2.18)$$

Com este resultado os autores completam a etapa (ii) do programa proposto.

Ford e Kac nos dizem que a equação (2.11), juntamente com as propriedades do operador força, ainda não é a Equação de Langevin, embora seja muito parecida. Eles comparam o segundo termo desta equação com o termo correspondente da equação quântica de Langevin, (2.1), para concluir que essas equações seriam iguais se

$$B(t) = 2\alpha\delta(t). \quad (2.19)$$

Comparando esta com a expressão (2.13) para $B(t)$, no que diz respeito às constantes de força e frequências do banho de osciladores, vê-se que $B(t)$ não pode assumir essa forma, a menos que haja um número infinito de osciladores no banho térmico e suas frequências

estejam continuamente distribuídas. Neste caso, escreve-se

$$B(t) = \int_0^\infty N(\omega)k(\omega) \cos(\omega t) d\omega, \quad (2.20)$$

onde $N(\omega)d\omega$ é o número de osciladores cuja frequência natural está entre ω e $\omega + d\omega$, e $k(\omega)$ é a constante elástica (média) dos osciladores cuja frequência é ω . Agora é feita a comparação das equações (2.19) e (2.20) e vê-se que para se obter esta última deve-se escolher

$$N(\omega)k(\omega) = 2\alpha/\pi. \quad (2.21)$$

Assim, o espectro das frequências do oscilador deve ser uniforme, correspondendo ao *ruído branco*. Quando os autores fazem esta mesma escolha para o espectro nas fórmulas (2.17) e (2.18) seguem imediatamente as fórmulas (2.2) e (2.3), respectivamente.

Ford e Kac concluem dizendo que, com essa escolha do espectro, a equação (2.11) torna-se exatamente a Equação de Langevin Quântica (2.1), *exceto* pelo termo adicional

$$B(t)x(0) = 2\alpha x(0)\delta(t), \quad (2.22)$$

no lado direito da equação.

Neste ponto, os autores alegam ter completado a terceira etapa do programa proposto, afirmando que a Equação de Langevin Quântica geral surge neste modelo unicamente após um curto período de relaxação. Nesse modelo, a duração deste período é infinitesimal, tal que após qualquer intervalo de tempo finito a equação quântica de Langevin é obtida. Eles declaram ainda que esta última etapa é “...um artefato do método; [esta etapa] é necessária unicamente porque, por conveniência, são feitas hipóteses muito especiais sobre o estado inicial do sistema” (Ford e Kac, pág. 808 [21]).

2.1.2 Discussão do Artigo de FK

Na conclusão do artigo, Ford e Kac fazem algumas observações que merecem comentários. Eles consideram que a Equação de Langevin Quântica é, de certa forma, universal, no mesmo sentido que a equação clássica de Langevin o é: há uma série de exemplos não triviais de sistemas que, ao menos aproximadamente, satisfazem a equação e para os quais a forma da equação é a mesma. Por “*forma da equação*” entende-se que o operador força (de Langevin) tem a propriedade gaussiana, que sua correlação é dada por (2.2) e sua relação de comutação é dada por (2.3).

Na seqüência, os autores se perguntam sobre a universalidade da demonstração feita

para a Equação de Langevin, já que foram utilizados modelos bastante específicos (osciladores harmônicos). Eles respondem que não provam a validade geral da equação, mas que “...ao invés, a lógica é a oposta: SE há uma tal descrição universal, então ela deve ser da forma que nós obtivemos” (Ford e Kac, pág. 808 [21]). Não vemos como se pode sustentar tal afirmação.

Continuando, Ford e Kac alegam ter realizado algo mais: “... em um outro artigo, um de nós (Ford), mostrará que de fato as formas (2.2) e (2.3) para a correlação e o comutador são um resultado geral do teorema flutuação-dissipação e, portanto, independente do modelo” (Ford e Kac, págs. 808-9). Este resultado parece ter sido mostrado no artigo de Ford, Lewis e O’Connell de 1988 [24].

Além disso, os autores dizem ter uma razão a mais para acreditar na universalidade da ‘forma da equação’ obtida. “Unicamente com esta forma - que entendemos pela equação (2.1), a correlação (2.2), o comutador (2.3) e a propriedade gaussiana do operador força $F(t)$ - é possível chegar no estado de equilíbrio correto.” (Ford e Kac, pág. 809).

Nesse modelo, assim como no FKM, a Equação de Langevin Quântica foi deduzida considerando processos markovianos (ver comentário sobre as etapas (i) e (ii) na introdução deste capítulo). Entretanto, é impossível deixar de observar que o termo “extra” (2.22), da equação (2.11), compromete seriamente a dedução. Estranhamente, nenhum comentário é feito sobre esse termo divergente, que possivelmente originou-se de um erro de cálculo (ver observação no Apêndice B.3).

Para uma detalhamento de outros aspectos da dedução da Equação de Langevin, ver também os artigos de Benguria e Kac [25], van Kampen [26] e Gardiner [27].

A seguir analisaremos o trabalho de Ford e colaboradores, e veremos que a Equação de Langevin Quântica será obtida de maneira mais geral, mas desta vez para processos não-markovianos.

2.2 O Modelo do Oscilador Independente - IO

Neste último artigo da “série” [28], Ford, em colaboração com Lewis e O’Connell, apresentam uma formulação mais completa da Equação de Langevin Quântica, considerando processos não-markovianos. Um modelo de banho térmico - o oscilador independente - é apresentado e confrontado com outros modelos de banho térmico existentes na literatura.

2.2.1 *A Equação de Langevin Quântica*

O objetivo de Ford, Lewis e O'Connell no referido artigo foi desenvolver uma descrição completamente quântica do problema de uma partícula acoplada a um banho térmico, com base na equação de Langevin quântica. Esta equação é deduzida, e o foco é mostrar que existe uma equação macroscópica correspondendo novamente a uma descrição *contraída* do sistema. Tal descrição baseia-se na exigência de que o banho térmico seja passivo, o que significa que há um único estado de equilíbrio térmico. Nesse artigo, a exigência física de passividade é expressa através do uso das funções chamadas positivas reais, e as propriedades destas são relacionadas com princípios físicos fundamentais. O modelo do Oscilador Independente (IO*) é apresentado, evidenciando sua conveniência e a possibilidade de se deduzir a partir deste a Equação de Langevin Quântica, confrontando-o com outros modelos de banho térmico existentes na literatura.

Considera-se então uma partícula quântica de massa m movendo-se em um potencial $V(x)$ unidimensional e linearmente acoplada a um banho térmico passivo a uma temperatura T . A equação macroscópica que descreve a evolução temporal do movimento desta partícula é a Equação de Langevin Quântica

$$m\ddot{x} + \int_{-\infty}^t \mu(t-t')\dot{x}(t')dt' + V'(x) = F(t), \tag{2.23}$$

onde o ponto denota a derivada em relação a t e a linha no potencial V representa a derivada deste em relação a x . Esta é a equação de movimento de Heisenberg para o operador coordenada x . O acoplamento com o banho térmico é descrito por meio de dois termos: um operador força estocástica $F(t)$, com média nula, e uma força média caracterizada por uma função memória $\mu(t)$.

A autocorrelação (simétrica) de $F(t)$ é dada por

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \langle F(t)F(t') + F(t')F(t) \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \text{Re}[\tilde{\mu}(\omega + i0^+)] \hbar\omega \text{ctgh}(\hbar\omega/2k_B T) \cos[\omega(t-t')] d\omega, \end{aligned} \tag{2.24}$$

e o comutador de $F(t)$, a instantes distintos, é

$$[F(t), F(t')] = \frac{2}{i\pi} \int_0^\infty \text{Re}[\tilde{\mu}(\omega + i0^+)] \hbar\omega \text{sen}[\omega(t-t')] d\omega. \tag{2.25}$$

* Manteremos a abreviação da língua inglesa, IO - Independent Oscillator.

Nessas expressões,

$$\tilde{\mu}(z) = \int_0^{\infty} \mu(t)e^{izt} dt, \quad \text{Im } z > 0, \quad (2.26)$$

é a transformada de Fourier da função memória $\mu(t)$. Por convenção, a função memória anula-se para tempos negativos. Assim como nos trabalhos anteriores (ver FK e FKM), $F(t)$ tem a propriedade gaussiana. Por outro lado, esta força estocástica *nunca* é markoviana.

Nesta descrição torna-se claro que, da mesma forma que no caso clássico, o acoplamento com o banho térmico é caracterizado pela função $\tilde{\mu}(z)$. Ford *et al* enfatizam que esta função deve possuir três propriedades matemáticas importantes, que se relacionam a três princípios físicos de caráter bastante geral. Limitar-nos-emos aqui a citar essas relações. A primeira delas, que podemos ver de (2.26), é que $\tilde{\mu}(z)$ deve ser analítica no semi-plano superior $\text{Im}[\tilde{\mu}(z)] > 0$ - isto é, afirmam os autores, uma consequência do princípio da causalidade; a força média exercida pelo banho térmico sobre a partícula depende unicamente do movimento da partícula no passado. A segunda propriedade é que o valor de contorno para $\tilde{\mu}(z)$ sobre o eixo real, deve ser tal que, em todo domínio,

$$\text{Re}[\tilde{\mu}(\omega + i0^+)] \geq 0, \quad -\infty < \omega < \infty. \quad (2.27)$$

Esta propriedade é apresentada como consequência da segunda lei da termodinâmica. A terceira propriedade é a condição de realidade

$$\tilde{\mu}(\omega + i0^+) = \tilde{\mu}(-\omega + i0^+)^*, \quad (2.28)$$

que segue de x ser um operador hermitiano; assim $\text{Re}[\tilde{\mu}(\omega + i0^+)]$ é uma função par de ω . Tais funções de variáveis complexas, analíticas no semi-plano superior, com a parte real positiva e com uma distribuição par no eixo real, são chamadas de *funções positivas reais*. Estas formam uma classe muito restrita de funções de uma variável complexa e aparecem mais freqüentemente na literatura matemática e de engenharia de controle (ver referências em [28]). Os autores destacam ainda que este tipo de aplicação, aqui realizada em problemas de mecânica quântica, é inédita.

2.2.2 O Modelo IO

O modelo do Oscilador Independente (IO), assim como o FKM, é um modelo muito simples no qual a partícula quântica é rodeada por um número muito grande (ou mesmo infinito) de partículas do banho térmico, cada uma ligada a ela por uma mola. O hamiltoniano deste

sistema é, conforme visto na seção anterior, o mesmo do segundo artigo desta “série” (FK),

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 (q_j - x)^2 \right). \quad (2.29)$$

Novamente, valem as relações de comutação usuais,

$$[x, p] = i\hbar, \quad [q_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}, \quad (2.30)$$

todos os outros comutadores sendo nulos. Os autores comentam que este modelo não é original, embora apareça raramente na literatura (FK), e que muito mais comum (e mais ingênuo) é o modelo de acoplamento linear, no qual as partículas do banho estão ligadas a uma origem inicialmente fixa (i.e. $x(0) = 0$ na soma de (2.29)) e o acoplamento é representado adicionando-se um termo da forma $x \sum_j \lambda_j q_j$ (ver Feynman-Vernon [6]). Alguns desses modelos serão comentados na próxima seção. Enfatiza-se que, para qualquer potencial $V(x)$ para o qual o hamiltoniano da partícula não acoplada ao banho,

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (2.31)$$

possui um espectro de autovalores limitado inferiormente (estado fundamental). O hamiltoniano (2.29) também possui um limite inferior. Isto, em geral, não acontece nos outros modelos a serem discutidos.

A derivação da Equação de Langevin Quântica a partir do modelo do IO segue os seguintes passos. Da mesma forma que no artigo anterior (FK), as equações de movimento de Heisenberg a partir da hamiltonina (2.29) são

$$\begin{aligned} \dot{x} &= [x, H]/i\hbar = p/m, \\ \dot{p} &= [p, H]/i\hbar = -V'(x) + \sum_j m_j \omega_j^2 (q_j - x), \\ \dot{q}_j &= [q_j, H]/i\hbar = p_j/m_j, \\ \dot{p}_j &= [p_j, H]/i\hbar = -m_j \omega_j^2 (q_j - x). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Eliminando o momento da partícula nas duas primeiras equações, tem-se

$$m\ddot{x} + V'(x) = \sum_j m_j \omega_j^2 (q_j - x), \quad (2.33)$$

e, para as partículas do banho térmico,

$$\ddot{q}_j + \omega_j^2 q_j = \omega_j^2 x. \quad (2.34)$$

As equações (2.34) são equações diferenciais não-homogêneas para q_j , cuja solução geral é (ver Apêndice B.3)

$$q_j(t) = q_j^h(t) + x(t) - \int_{-\infty}^t \cos(\omega_j(t-t')) \dot{x}(t') dt', \quad (2.35)$$

onde $q_j^h(t)$ é a solução geral da equação homogênea, que é dada por

$$q_j^h(t) = q_j(0) \cos(\omega_j t) + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \text{sen}(\omega_j t), \quad (2.36)$$

onde $q_j(0)$ e $p_j(0)$ são operadores independentes do tempo que satisfazem as mesmas relações de comutação (2.30). Notamos aqui a diferença entre a solução (2.35) e a solução da mesma equação no artigo FK, equação (2.9). Justamente o termo divergente, que sobrou no artigo anterior, não aparece agora (ver comentário no Apêndice B.3). Gostaríamos ainda de destacar as palavras dos autores sobre a solução (2.35): “*O passo aparentemente direto que leva à solução (2.35) é, de fato, profundo, pois escolhendo a solução retardada da equação não-homogênea, quebramos a invariância por reversão temporal das equações originais*” (Ford et al. [28], pág 4422, destaques nossos). No Apêndice B.3, demonstramos a solução das equações (2.34), utilizando a função de Green retardada.

Prosseguindo, os autores explicam que neste modelo a partícula, num passado remoto, está fixa em $x = 0$ (presa a uma massa grande); os osciladores que formam o banho térmico estão em equilíbrio a uma temperatura T (por um contato prévio com um outro banho térmico). Então, nesse passado remoto, o sistema é liberado e o movimento subsequente é governado pelo hamiltoniano (2.29). Esta é a maneira típica pela qual a invariância temporal é quebrada no caso de equações macroscópicas: estas descrevem unicamente a evolução temporal de uma classe de soluções das equações microscópicas.

Os passos seguintes são diretos. Substituindo (2.35) em (2.33) obtém-se a Equação de Langevin (2.23), com

$$\mu(t) = \sum_j m_j \omega_j^2 \cos(\omega_j t) \Theta(t), \quad (2.37)$$

onde $\Theta(t)$ é a função degrau de Heaviside, com

$$F(t) = \sum_j m_j \omega_j^2 q_j^h(t). \quad (2.38)$$

A fim de encontrar as expressões para a auto-correlação e o comutador de $F(t)$, invoca-se a expressão (2.36) para $q_j^h(t)$ e o fato de que no passado remoto os osciladores estão em equilíbrio térmico à temperatura T com respeito à hamiltoniana do banho,

$$H_B = \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 (q_j - x)^2 \right), \quad (2.39)$$

correspondendo a fixar $x = 0$ em (2.29). Isto implica nas correlações já calculadas anteriormente, equações (2.16). Usando agora (2.36) e (2.38), encontra-se

$$\frac{1}{2} \langle F(t)F(t') + F(t')F(t) \rangle = \frac{1}{2} \sum_j \hbar \omega \operatorname{ctgh}(\hbar \omega_j / 2k_B T) \cos[\omega_j(t - t')]. \quad (2.40)$$

De maneira similar, usando as relações de comutação (2.30), chega-se a

$$[F(t), F(t')] = -i \sum_j \hbar m_j \omega_j^3 \operatorname{sen}[\omega_j(t - t')]. \quad (2.41)$$

O passo final é fazer a transformada de Fourier da função memória, eq. (2.37),

$$\tilde{\mu}(z) = \int_0^\infty dt e^{izt} \sum_j m_j \omega_j^2 \cos(\omega_j t) = \frac{i}{2} \sum_j m_j \omega_j^2 \left(\frac{1}{z - \omega_j} + \frac{1}{z + \omega_j} \right). \quad (2.42)$$

Usando a conhecida fórmula $\frac{1}{x \pm i\epsilon} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi \delta(x)$, tem-se que a distribuição espectral é dada por

$$\operatorname{Re}[\tilde{\mu}(\omega + i0^+)] = \frac{\pi}{2} \sum_j m_j \omega_j^2 [\delta(\omega - \omega_j) + \delta(\omega + \omega_j)]. \quad (2.43)$$

Através deste resultado vê-se que (2.40) é equivalente à (2.24) e que (2.41) é equivalente à (2.25) (observa-se que esta é uma distribuição par e positiva). Finalmente, vale a propriedade gaussiana para $F(t)$, conseqüência da mesma propriedade de q_j e p_j (ver discussão sobre esta propriedade no FKM).

2.2.3 Outros Modelos de Banho Térmico

Na seção seguinte, Ford *et al* objetivam discutir alguns modelos de banho térmico existentes na literatura, visando uma descrição macroscópica geral da Equação de Langevin Quântica, bem como mostrar a equivalência entre esses modelos e o modelo do IO apresentado na seção anterior. Aqui, apenas citaremos esses modelos, sem nos preocuparmos em provar sua equivalência com o IO.

O Modelo de Acoplamento com a Velocidade

Este modelo é uma versão do modelo IO no qual o acoplamento com o banho térmico é efetuado através do momento p da partícula. Seu hamiltoniano é

$$H_{VC} = \frac{1}{2m} \left(p + \sum_j m_j \omega_j q_j \right)^2 + V(x) + \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 q_j^2 \right). \quad (2.44)$$

O Modelo do Campo de Radiação de Corpo Negro

A um átomo de um elétron, interagindo com um campo de radiação, na aproximação de dipolo, corresponde o hamiltoniano

$$H_{QED} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{k},s} \hbar \omega_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k},s}^\dagger a_{\mathbf{k},s} + 1/2), \quad (2.45)$$

onde o potencial vetor é dado por

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k},s} \left(\frac{2\pi \hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V} \right)^2 f_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k},s} (a_{\mathbf{k},s} + a_{\mathbf{k},s}^\dagger), \quad (2.46)$$

com a notação usual [29]. A quantidade $f_{\mathbf{k}}$ é o fator de forma do elétron (a transformada de Fourier da sua distribuição de carga). Este hamiltoniano é uma versão tridimensional do anterior, equação (2.44).

Modelos de Acoplamento Linear

Os modelos de acoplamento linear são muito comuns na literatura e aparecem sob diferentes formas [6]. Nesses modelos de banho térmico, o acoplamento com a partícula ocorre através de um termo linear no deslocamento da partícula. Seu hamiltoniano tem a forma

$$H_{LC} = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} M_j \omega_j^2 q_j^2 \right) + x \sum_j \lambda_j q_j. \quad (2.47)$$

Ford *et al* destacam que este hamiltoniano tem um grave defeito, qual seja, para uma partícula livre, $V(x) = 0$, não há um limite inferior de energia (estado fundamental). Isto significa que não existe um estado de equilíbrio térmico e, portanto, o banho térmico não é passivo. Segundo os autores, um defeito extra é que, novamente para uma partícula livre, o hamiltoniano não é invariante sob translações espaciais. Nos trabalhos citados (ver referências internas em [28]), os respectivos autores reconhecem esses defeitos e adicionam ao hamiltoniano um termo do tipo $\sum_j \lambda_j^2 x^2 / 2M_j \omega_j^2$. Com a adição deste termo, o

hamiltoniano fica

$$H'_{LC} = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} M_j \omega_j^2 \left(q_j + \frac{\lambda_j}{M_j \omega_j^2} x \right)^2 \right), \quad (2.48)$$

que é o hamiltoniano do IO, com $m_j = \lambda_j^2 / M_j \omega_j^4$. Enfatiza-se que esta correção no hamiltoniano não é única, e que diferentes correções podem levar a diferentes modelos que, por sua vez, podem levar a uma Equação de Langevin de forma incorreta [30].

O Modelo de Aproximação de Onda Girante

Este é uma versão de modelo de acoplamento linear. Aparece freqüentemente em trabalhos de óptica quântica, onde é geralmente aplicado no caso do oscilador harmônico.

Considerando o hamiltoniano (2.47) do modelo de acoplamento linear, com um potencial externo da forma

$$V(x) = m\omega_0^2 x^2 / 2,$$

introduz-se os bem conhecidos operadores

$$a = \frac{m\omega_0 x + ip}{(2m\hbar\omega_0)^{1/2}}, \quad b = \frac{M_j \omega_j q_j + ip_j}{(2M_j \hbar \omega_j)^{1/2}}.$$

Com isso, o hamiltoniano do acoplamento linear torna-se

$$\begin{aligned} H_{LC} &= \hbar\omega_0(aa^\dagger + 1/2) + \sum_j \hbar\omega_j(b_j b_j^\dagger + 1/2) + \\ &+ \sum_j \frac{\hbar\lambda_j}{2(mM_j\omega_0\omega_j)^{1/2}} (ab_j + ab_j^\dagger + a^\dagger b_j + a^\dagger b_j^\dagger). \end{aligned} \quad (2.49)$$

A aproximação de onda girante consiste em descartar os termos ab_j e $a^\dagger b_j^\dagger$ no segundo termo da soma, obtendo

$$\begin{aligned} H_{RWA} &= \hbar\omega_0(aa^\dagger + 1/2) + \sum_j \hbar\omega_j(b_j b_j^\dagger + 1/2) + \\ &+ \sum_j \frac{\hbar\lambda_j}{2(mM_j\omega_0\omega_j)^{1/2}} (ab_j^\dagger + a^\dagger b_j). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Assim como o hamiltoniano do acoplamento linear, este também apresenta uma falha, a saber, a de descrever um banho térmico que não é passivo. Portanto, deve ser introduzida uma correção e, novamente, esta não é única. Adicionando-se termos, que em óptica quântica são chamados de termos de auto-interação, chega-se a um hamiltoniano que é equivalente ao do IO. No próximo capítulo utilizaremos um potencial como o de (2.49),

isto é, sem a aproximação de onda girante.

O Modelo FKM

Este é o modelo apresentado e discutido no capítulo 1 deste trabalho. Ford, Lewis e O'Connell comentam que este modelo é de interesse porque “o artigo no qual ele aparece foi o primeiro no qual a formulação correta da equação de Langevin quântica foi indicada” (Ford *et al*, pág. 4426) [28].

O hamiltoniano do modelo FKM para uma partícula de massa m sujeita a um potencial externo $V(q_0)$ é, conforme visto anteriormente,

$$H_{FKM} = \frac{1}{2m} \sum_{i=-N}^N p_i^2 + \frac{1}{2} m \sum_{i,j=-N}^N q_i A_{ij} q_j + V(q_0). \quad (2.51)$$

Considerando a invariância translacional, eq.(1.56), é possível escrevê-lo também na forma

$$H_{FKM} = \frac{1}{2m} \sum_{i=-N}^N p_i^2 + \frac{1}{2} m \sum_{i,j=-N}^N (q_i - q_0) A_{ij} (q_j - q_0) + V(q_0). \quad (2.52)$$

Ford *et al* argumentam que a partir desta forma uma transformação canônica de coordenadas pode levar este hamiltoniano ao mesmo do IO. Não discutiremos aqui esta relação.

O Modelo de Lamb

Finalmente, temos o modelo de Lamb. Este modelo foi introduzido por Horace Lamb em 1900, num artigo da revista Proceedings of the London Mathematical Society [31], e consiste em colocar uma partícula presa (na origem) a uma corda semi-infinita. Ford *et al* erroneamente atribuem a este trabalho o propósito de entender a então recente idéia de reação da radiação em eletrodinâmica, quando, na verdade, o propósito do autor era estudar a propagação de energia num meio, a partir das ondas geradas pela vibração de um corpo imerso nesse meio.

Embora o ponto de partida de Lamb seja a equação diferencial para a corda, pode-se escrever diretamente uma lagrangiana para este modelo:

$$L_{Lamb} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) + \int_0^\infty dy \left[\frac{\sigma}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 - \frac{\tau}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right]. \quad (2.53)$$

Aqui $u(y)$ é o deslocamento da corda, σ sua densidade linear e τ a tensão sobre a mesma. O pulso na corda propaga-se na direção y e a partícula desloca-se ao longo da direção x .

Destaque para o fato de que não há termo de interação; apenas é imposto o vínculo

$$x(t) = u(0, t). \tag{2.54}$$

Neste trabalho não nos estenderemos na discussão desse modelo, pois sua riqueza de detalhes demandaria uma análise mais cuidadosa. No entanto, um comentário se faz necessário. Ford *et al* não provam a equivalência entre este modelo e o IO. Ao invés, nos remetem a outro trabalho, onde supostamente é mostrada a equivalência entre os modelos de Lamb e FKM [32]. Este artigo é interessante, pois discute, assim como Keller e Bonilla [19], a maneira pela qual um banho térmico pode ser “construído”, enfatizando o papel fundamental da escolha das condições de contorno.

Ao que pese o fato de o modelo de Lamb parecer simples e fisicamente intuitivo, ele se mostra de um alcance considerável. Com efeito, Ford e O’Connell se utilizam deste para deduzirem a Equação de Langevin Quântica num artigo mais recente [33], onde é feita uma crítica ao chamado efeito Unruh.

Capítulo 3

Estatística Quântica a Temperatura Finita

Neste capítulo iremos apresentar a teoria de campos à temperatura finita na formulação de tempo real conhecida como *Thermofield Dynamics* (TFD) [8]. A seguir faremos uma brevíssima incursão na Teoria da Medida proposta por Schwinger [34], com objetivo de identificar alguns elementos desta teoria naquela. Ao final mostraremos uma aplicação da TFD ao modelo estudado no capítulo 1 deste trabalho.

3.1 *Thermofield Dynamics* - TFD

A grandeza fundamental na Mecânica Estatística do equilíbrio é a média estatística de um observável A , definida, no ensemble canônico à temperatura T , como

$$\langle A \rangle \equiv Z^{-1} \text{Tr} [A e^{-\beta H}], \quad (3.1)$$

sendo H o hamiltoniano total do sistema, Z a função de partição, k_B a constante de Boltzmann, e onde $Z = \text{Tr} [e^{-\beta H}]$ e $\beta = (k_B T)^{-1}$.

A teoria de campos à temperatura finita - *Thermofield Dynamics* (TFD) - foi desenvolvida buscando-se construir uma representação na qual as médias estatísticas no ensemble coincidam, ao invés de uma operação de traço sobre um operador densidade, com valores esperados em um vácuo térmico

$$\langle 0_{(\beta)} | A | 0_{(\beta)} \rangle = \langle A \rangle. \quad (3.2)$$

Aqui $|0_{(\beta)}\rangle$ é um estado de vácuo dependente da temperatura, derivado do vácuo usual a partir de uma chamada transformação de Bogoliubov térmica. Definida a atuação nos estados ortonormais

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad (3.3)$$

a equação para as médias estatísticas (3.1), e conseqüentemente o valor esperado (3.2), torna-se

$$\langle 0_{(\beta)}|A|0_{(\beta)}\rangle = Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle m|A|n\rangle \delta_{mn}. \quad (3.4)$$

Assume-se que o estado $|0_{(\beta)}\rangle$ possa ser expandido em termos dos autoestados $|n\rangle$

$$|0_{(\beta)}\rangle = \sum_n f_n(\beta) |n\rangle; \quad (3.5)$$

substituindo (3.5) em (3.4) e comparando ambos membros da equação resultante, devemos ter necessariamente

$$f_m^*(\beta) f_n(\beta) = Z^{-1} e^{-\beta E_n} \delta_{mn}. \quad (3.6)$$

Da equação anterior conclui-se que, devido ao termo δ_{mn} , os coeficientes $f_n(\beta)$ não podem ser meramente números, mas devem ser estados. Assim, o estado $|0_{(\beta)}\rangle$ está no espaço gerado pelos estados $|n\rangle$ e $f_n(\beta)$. Para construir esta representação é conveniente introduzir um sistema adicional fictício “idêntico” ao original, chamado sistema dual ou *tilde*, de forma que $f_n(\beta)$ pertença a este novo sistema. Tal sistema é caracterizado pelo hamiltoniano \tilde{H} , o qual atua nos autoestados $|\tilde{n}\rangle$ de acordo com

$$\tilde{H}|\tilde{n}\rangle = E_n|\tilde{n}\rangle, \quad \langle \tilde{m}|\tilde{n}\rangle = \delta_{mn}, \quad (3.7)$$

onde os autovalores E_n são, por definição, iguais aos autovalores do sistema original. Da forma da equação (3.6) conclui-se que

$$f_n(\beta) = Z^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\beta E_n} |\tilde{n}\rangle;$$

substituindo na expressão (3.5) para $|0_{(\beta)}\rangle$ resulta

$$|0_{(\beta)}\rangle = Z^{-\frac{1}{2}} \sum_n e^{-\frac{1}{2}\beta E_n} |n, \tilde{n}\rangle, \quad (3.8)$$

onde $|n, \tilde{n}\rangle \equiv |n\rangle \otimes |\tilde{n}\rangle$.

Devido à incapacidade do espaço de Hilbert original \mathfrak{H} descrever corretamente o espaço dos estados $|0_{(\beta)}\rangle$, tornou-se necessária a introdução do espaço dual $\tilde{\mathfrak{H}}$, de modo que o novo espaço \mathcal{H} será definido como sendo o produto tensorial dos subespaços anteriores, \mathfrak{H}

e $\tilde{\mathfrak{H}}$,

$$\mathcal{H} = \mathfrak{H} \otimes \tilde{\mathfrak{H}}.$$

Para que a equação (3.4) seja satisfeita, um operador qualquer A deverá necessariamente atuar somente no subespaço correspondente

$$\langle \tilde{m}, m | A | n, \tilde{n} \rangle = \langle m | A | n \rangle \otimes \langle \tilde{m} | \tilde{n} \rangle = \langle m | A | n \rangle \delta_{mn},$$

$$\langle \tilde{m}, m | \tilde{A} | n, \tilde{n} \rangle = \langle \tilde{m} | \tilde{A} | \tilde{n} \rangle \otimes \langle m | n \rangle = \langle \tilde{m} | \tilde{A} | \tilde{n} \rangle \delta_{mn},$$

o que caracteriza a separabilidade dos dois sistemas. Pode-se, então, definir a atuação dos operadores $A \in \mathfrak{H}$ e $\tilde{A} \in \tilde{\mathfrak{H}}$ sobre o espaço \mathcal{H} como $A \equiv A \otimes \mathbb{I}$ e $\tilde{A} \equiv \mathbb{I} \otimes \tilde{A}$.

O mapeamento entre os subespaços \mathfrak{H} e $\tilde{\mathfrak{H}}$ é chamado conjugação dual ou tilde e define uma série de regras, tais como:

$$(AB)^\sim = \tilde{A}\tilde{B} \quad (3.9)$$

$$(c_1A + c_2B)^\sim = c_1^*\tilde{A} + c_2^*\tilde{B}; \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C} \quad (3.10)$$

$$(A^\dagger)^\sim = \tilde{A}^\dagger \quad (3.11)$$

$$(\tilde{A})^\sim = \sigma A, \quad (3.12)$$

com $\sigma = +1$ para bósons e $\sigma = -1$ para férmions. Destas propriedades pode-se concluir que a correspondência é um a um, o mapeamento é antilinear com respeito ao espaço original e invariante frente a transformações de Bogoliubov, as quais serão apresentadas mais adiante.

Em TFD, o hamiltoniano, designado por \hat{H} , é responsável pela evolução temporal tanto dos operadores “normais” quanto dos operadores tilde. A equação de Heisenberg para um campo $\psi(x)$ tem a forma

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = [\psi(x), \hat{H}].$$

Tomando o complexo conjugado desta chega-se à equação para o campo tilde

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(x) = [\tilde{\psi}(x), (\hat{H})^\sim],$$

o que implica que $(\hat{H})^\sim = -\hat{H}$. Assim temos que o hamiltoniano total é dado por

$$\hat{H} = H \otimes \mathbb{I} - \mathbb{I} \otimes \tilde{H}. \quad (3.13)$$

Ilustraremos a seguir o formalismo apresentado aplicando-o ao caso de osciladores harmônicos bosônicos. Apesar da simplicidade do sistema, este será de utilidade no tratamento de campos a temperatura finita e no estudo de interação com um reservatório térmico, tal como os modelos vistos nos capítulos anteriores. Relembremos agora alguns elementos da teoria espectral para operadores limitados inferiormente. Definido o operador $N \equiv a^\dagger a$ e sua atuação no estado ortonormalizado $|n\rangle$ pertencente ao espaço \mathfrak{H} ,

$$N |n\rangle = n |n\rangle. \quad (3.14)$$

De (3.14) resulta que a atuação individual dos operadores a e a^\dagger , devidamente normalizada, deve ser

$$\begin{aligned} a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \\ a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \end{aligned}$$

Sendo a^\dagger o adjunto conjugado de a , como n é sempre não negativo devido ao espaço de Hilbert ter produto interno positivo definido, este deve possuir um valor mínimo, correspondendo ao estado $|0\rangle$, tal que

$$a |0\rangle = 0; \quad (3.15)$$

assim, pode-se construir um estado $|n\rangle$ a partir de sucessivas atuações de a^\dagger sobre o estado fundamental,

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (3.16)$$

3.1.1 Oscilador Harmônico Bosônico

Um oscilador harmônico de frequência ω é descrito pelo hamiltoniano

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \quad (3.17)$$

onde a^\dagger é o operador de levantamento (ou criação) e a o operador de abaixamento (ou aniquilação), os quais satisfazem a álgebra

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad [a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0.$$

Da equação (3.14) encontram-se os autovalores de H ,

$$H |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle.$$

Uma vez determinados os autovalores de energia, pode-se encontrar a função de partição e, por conseguinte, o estado $|0_{(\beta)}\rangle$. A álgebra bosônica não impõe nenhum limite superior aos estados acessíveis. Assim, calculando a função de partição, obtém-se

$$Z = Tr [e^{-\beta H}] = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} = \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad (3.18)$$

onde foi utilizada a soma de uma série geométrica, $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = (1 - x)^{-1}$.

O mesmo resultado para a função de partição (3.18) pode ser encontrado se exigirmos a normalização do estado $|0_{(\beta)}\rangle$; assim sendo, o estado já está normalizado, por construção. A expressão (3.8) para o estado $|0_{(\beta)}\rangle$ resulta, neste caso,

$$\begin{aligned} |0_{(\beta)}\rangle &= \left(\frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} |n, \tilde{n}\rangle \\ &= (1 - e^{-\beta\hbar\omega})^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega n} |n, \tilde{n}\rangle. \end{aligned}$$

A equação (3.16) é igualmente válida para os estados $|\tilde{n}\rangle$ do espaço dual,

$$|\tilde{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\tilde{a}^\dagger)^n |\tilde{0}\rangle. \quad (3.19)$$

Finalmente, o estado $|0_{(\beta)}\rangle$ assume a forma

$$|0_{(\beta)}\rangle = (1 - e^{-\beta\hbar\omega})^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega n} \frac{(a^\dagger)^n (\tilde{a}^\dagger)^n}{n!} |0, \tilde{0}\rangle. \quad (3.20)$$

Nota-se que o estado $|0_{(\beta)}\rangle$ não está vazio, logo espera-se que a média estatística do operador número N não seja nula. Assim,

$$\langle 0_{(\beta)} | N | 0_{(\beta)} \rangle = (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} \langle \tilde{n}, n | N | n, \tilde{n} \rangle,$$

de modo que, o número médio de partículas no estado é a distribuição de Bose-Einstein (BE)

$$\langle 0_{(\beta)} | N | 0_{(\beta)} \rangle = (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1}. \quad (3.21)$$

Portanto, como esperado, o número médio de partículas no vácuo $|0_{(\beta)}\rangle$ está relacionado à temperatura através da distribuição de BE.

Pode-se estender os resultados aqui apresentados a um oscilador fermiônico, trocando o sinal do hamiltoniano (3.17) e utilizando as relações de anticomutação para os operadores. Neste caso obtém-se, para a média estatística do operador número N ,

$$\langle 0_{(\beta)} | N | 0_{(\beta)} \rangle = (e^{\beta\hbar\omega} + 1)^{-1}. \quad (3.22)$$

Como esperado, o número médio de partículas no vácuo $|0_{(\beta)}\rangle$, para o caso fermiônico, está relacionado à temperatura através da distribuição de Fermi-Dirac.

3.1.2 Transformações de Bogoliubov

Nesta seção mostraremos que o processo de termalização pode ser alcançado através de uma transformação de Bogoliubov. Até o momento, a princípio, o estado $|0_{(\beta)}\rangle$ poderia ser qualquer estado, embora já o tenhamos definido previamente como o vácuo da teoria. Com tal propósito, será postulada a existência de um operador $\alpha \in \mathcal{H}_\beta$ e seu auto adjunto α^\dagger , tal que

$$\alpha |0_{(\beta)}\rangle = 0, \quad (3.23)$$

tornando $|0_{(\beta)}\rangle$ o vácuo da teoria; os operadores α e α^\dagger satisfazem a álgebra $[\alpha, \alpha^\dagger]_{\mp} = 1$.

A transformação responsável por mapear os espaços \mathcal{H}_β e $\mathcal{H} | \mathfrak{H}$, conhecida como transformação de Bogoliubov, é definida como

$$\begin{aligned} \alpha &= U(\theta) a U^{-1}(\theta), \\ \alpha^\dagger &= U(\theta) a^\dagger U^{-1}(\theta), \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde $U(\theta)$ é o operador unitário

$$U(\theta) = e^{iG(\theta)}, \quad (3.25)$$

sendo $G(\theta)$ o gerador da transformação e $\theta \equiv \theta(\beta)$ uma função da temperatura. Utilizando a primeira das equações (3.24) pode-se relacionar o estado $|0_{(\beta)}\rangle$ com o estado $|0\rangle \equiv |0, \vec{0}\rangle$, invertendo-a,

$$a = U^{-1}(\theta) \alpha U(\theta).$$

Aqui, por simplicidade, como não fazemos referência a operadores do sistema auxiliar, denotaremos o estado de vácuo do operador número $N = a^\dagger a$ e o vácuo do espaço de estados $|n, \vec{n}\rangle$ pelo mesmo símbolo $|0\rangle$, ao invés da notação $|0\rangle\rangle$ usualmente empregada.

Atuando a expressão acima no estado $|0\rangle$ e comparando com (3.23), obtém-se

$$a|0\rangle = U^{-1}(\theta)\alpha U(\theta)|0\rangle = 0,$$

tornando clara a relação entre os estados fundamentais nos dois espaços

$$|0_{(\beta)}\rangle = U(\theta)|0\rangle. \quad (3.26)$$

3.1.3 Estados Comprimidos (Squeezed)

O estado de vácuo varia conforme o sistema em estudo, tendo como característica conter informação sobre este. Nesta seção impõe-se que o pacote de onda que descreve uma partícula bosônica tenha a propriedade de saturar o princípio de incerteza

$$\langle(\Delta p)^2\rangle \leq \frac{\hbar}{2}, \quad \text{ou} \quad \langle(\Delta q)^2\rangle \leq \frac{\hbar}{2}.$$

O gerador responsável por incorporar tal restrição é o bilinear

$$G_s(\theta) = i\frac{\theta}{2}[a^2 - a^{\dagger 2}], \quad (3.27)$$

onde θ é positivo definido; utilizando (3.25) e substituindo na transformação (3.24) encontra-se

$$\alpha = e^{-\frac{\theta}{2}(a^2 - a^{\dagger 2})} a e^{\frac{\theta}{2}(a^2 - a^{\dagger 2})}. \quad (3.28)$$

Através da relação de Baker-Campbell-Hausdorff

$$e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = B + \lambda[A, B] + \frac{\lambda^2}{2!}[A, [A, B]] + \frac{\lambda^3}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \dots, \quad (3.29)$$

obtém-se para α em (3.28)

$$\alpha = a + \frac{-\theta}{2}[(a^2 - a^{\dagger 2}), a] + \frac{1}{2!}\left(\frac{-\theta}{2}\right)^2[(a^2 - a^{\dagger 2}), [(a^2 - a^{\dagger 2}), a]] + \dots$$

Calculando os comutadores encontra-se a forma linear dos operadores de aniquilação e criação, dados respectivamente por

$$\begin{aligned} \alpha &= c a - d a^{\dagger}, \\ \alpha^{\dagger} &= c a^{\dagger} - d a, \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde $c = \cosh(\theta)$ e $d = \sinh(\theta)$.

Tais operadores térmicos α apresentam uma dependência explícita em θ , de fundamental importância, pois carregam a informação referente a temperatura (posteriormente θ será reconhecido como função não linear da temperatura). É de interesse encontrar explicitamente a estrutura de $|0_{(\beta)}\rangle$. Uma forma de proceder é fatorar a exponencial $U(\theta)$ em produtos de exponenciais, o que não pode ser efetuado de forma trivial devido à não comutatividade dos operadores (ver Apêndice C),

$$U(\theta) = e^{\frac{\theta}{2}(a^\dagger - a^2)} = e^{\frac{1}{2}\text{tgh}(\theta)a^{\dagger 2}} e^{\frac{1}{4}\ln[\cosh(\theta)][a^{\dagger 2}, a^2]} e^{\frac{1}{2}\text{tgh}(\theta)a^2}. \quad (3.31)$$

Expandindo o termo à direita em série de potências e atuando em $|0\rangle$, resulta

$$|0_{(\beta)}\rangle = e^{-\frac{1}{2}\ln[\cosh(\theta)]} e^{\frac{1}{2}\text{tgh}(\theta)a^{\dagger 2}} |0\rangle. \quad (3.32)$$

Esta expressão mostra que o vácuo $|0_{(\beta)}\rangle$ é constituído por uma superposição de estados com um número par de partículas “ a ”.

3.1.4 Estados Comprimidos de Dois Modos

Pode-se estender o estudo anterior, introduzindo um segundo conjunto de osciladores pertencentes ao espaço $\tilde{\mathfrak{H}}$, para os quais temos a transformação de Bogoliubov

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha} &= U(\theta) \tilde{a} U^{-1}(\theta), \\ \tilde{\alpha}^\dagger &= U(\theta) \tilde{a}^\dagger U^{-1}(\theta). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Neste caso, o gerador responsável por incorporar o espaço dual é

$$G_s(\theta) = i\theta [\tilde{a}\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger]. \quad (3.34)$$

Procedendo de maneira análoga àquela da seção anterior obtemos as equações

$$\alpha = ca - d\tilde{a}^\dagger, \quad (3.35)$$

$$\tilde{\alpha} = c\tilde{a} - da^\dagger. \quad (3.36)$$

Uma maneira útil de escrever estas relações é

$$\begin{bmatrix} a \\ \tilde{a}^\dagger \end{bmatrix}^\mu = B^{-1}(\theta)^{\mu\nu} \begin{bmatrix} \alpha \\ \tilde{\alpha}^\dagger \end{bmatrix}^\nu, \quad (3.37)$$

$$\begin{bmatrix} a^\dagger - \tilde{a} \end{bmatrix}^\mu = [\alpha^\dagger - \tilde{\alpha}]^\nu B(\theta)^{\mu\nu}, \quad (3.38)$$

onde $\mu, \nu = 1, 2$ e a matriz de Bogoliubov (para bósons) é dada por

$$B(\theta) = \begin{bmatrix} c & -d \\ -d & c \end{bmatrix}. \quad (3.39)$$

Analogamente obtém-se os demais operadores

$$\alpha^\dagger = c a^\dagger - d \tilde{a}, \quad (3.40)$$

$$\tilde{a}^\dagger = c \tilde{a}^\dagger - d a. \quad (3.41)$$

Da mesma forma, encontra-se o vácuo para os estados comprimidos de dois modos,

$$|0_{(\beta)}\rangle = e^{-\ln[\cosh(\theta)]} e^{\text{tgh}(\theta) a^\dagger \tilde{a}^\dagger} |0, \tilde{0}\rangle. \quad (3.42)$$

Este vácuo é um condensado de pares $a\tilde{a}$; devido à sua estrutura, o vácuo é, então, invariante frente a conjugações tilde

$$|0_{(\beta)}\rangle^\sim = |0_{(\beta)}\rangle. \quad (3.43)$$

Este também apresenta uma estrutura similar ao estado encontrado na seção anterior para o caso do oscilador bosônico (3.20). Comparando-os,

$$\cosh(\theta)^{-1} e^{\text{tgh}(\theta) a^\dagger \tilde{a}^\dagger} = (1 - e^{-\beta\hbar\omega})^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega n} \frac{(a^\dagger)^n (\tilde{a}^\dagger)^n}{n!},$$

resultam as relações

$$\frac{d(\theta)}{c(\theta)} = \text{tgh}(\theta) = e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega},$$

$$c(\theta) = \cosh(\theta) = (1 - e^{-\beta\hbar\omega})^{-\frac{1}{2}}, \quad (3.44)$$

$$d(\theta) = \sinh(\theta) = (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-\frac{1}{2}},$$

possibilitando o mapeamento entre os dois formalismos. Por último, atuando α e $\tilde{\alpha}$ no vácuo $|0_{(\beta)}\rangle$, resulta de (3.35) e (3.36),

$$a^\dagger |0_{(\beta)}\rangle = \frac{c}{d} \tilde{a} |0_{(\beta)}\rangle, \quad (3.45)$$

$$\tilde{a}^\dagger |0_{(\beta)}\rangle = \frac{c}{d} a |0_{(\beta)}\rangle.$$

Substituindo em (3.40) e (3.41), obtém-se

$$\begin{aligned}\alpha^\dagger |0_{(\beta)}\rangle &= d^{-1}\tilde{a} |0_{(\beta)}\rangle = c^{-1}a^\dagger |0_{(\beta)}\rangle, \\ \tilde{\alpha}^\dagger |0_{(\beta)}\rangle &= d^{-1}a |0_{(\beta)}\rangle = c^{-1}\tilde{a}^\dagger |0_{(\beta)}\rangle.\end{aligned}\tag{3.46}$$

Das relações (3.45) e (3.46) conclui-se que as partículas do espaço dual podem ser interpretadas como “buracos”; as constantes de normalização presentes em (3.46) estão relacionadas com o fator de Boltzmann através das relações (3.44), o que é característico de processos quânticos onde se adiciona uma partícula a um sistema que contém partículas em equilíbrio térmico.

O gerador da transformação de Bogoliubov $U(\theta)$, é construído a partir de operadores que atuam em *ambos* subespaços, transformando o vácuo $|0, \tilde{0}\rangle$ num estado que caracteriza o vácuo de uma nova representação irredutível, inequivalente à representação à qual pertence o dubleto $|n, \tilde{n}\rangle$.

Finalizando, poderíamos também repetir todo o procedimento visto aqui para o caso fermiônico, utilizando uma transformação de Bogoliubov da mesma forma (3.33) e respeitando a álgebra de anticomutação. Para o sistema fermiônico, a interpretação das partículas a e \tilde{a} é análoga ao caso bosônico. Neste caso, porém, a conexão ocorre, como esperado, através da distribuição de Fermi-Dirac.

3.2 Teoria da Medida e TFD

A teoria da medida clássica parte do princípio de que não há limite de precisão para uma medida realizada sobre um sistema, ou que qualquer perturbação oriunda da interação entre o aparelho de medida e o sistema físico possa ser feita arbitrariamente pequena ou ser compensada. Sabe-se porém que, numa escala microscópica, ou seja, no domínio dos sistemas quânticos, a interação entre sistema e instrumento não pode ser ignorada ou totalmente compensada, devido ao seu caráter probabilístico. Assim, a medida de uma propriedade pode produzir mudanças incontroláveis nos valores previamente atribuídos às demais propriedades.

A Teoria da Medida proposta por Schwinger [34] é construída a partir de símbolos que representam *medidas seletivas* realizadas sobre um sistema, bem como das operações algébricas efetuadas com tais símbolos, sendo por isso conhecida também como *Schwinger's Measurement Algebra*.

Seja um sistema físico ideal, no qual qualquer observável A assuma somente um número

finito de valores distintos, $a', \dots, a^{(n)}$ e $M(a')$ represente uma medida seletiva, em um ensemble de sistemas similares e independentes, que somente aceite os sistemas que possuam o valor a' e rejeite todos os demais. De acordo com sua definição, os símbolos de medida possuem as propriedades

$$\sum_{a'} M(a') = 1, \quad (3.47)$$

$$M(a')M(a'') = \delta(a', a'') M(a'), \quad (3.48)$$

onde

$$\delta(a', a'') = \begin{cases} 1, & a' = a'' \\ 0, & a' \neq a'' \end{cases}. \quad (3.49)$$

Dois observáveis A_1 e A_2 são compatíveis se a medida de um não destrói a informação obtida por uma medida anterior do outro. As medidas $M(a'_1)$ e $M(a'_2)$, efetuadas em qualquer ordem, produzem um ensemble de sistemas para os quais se pode atribuir simultaneamente os valores a'_1 para A_1 e a'_2 para A_2 ,

$$M(a'_1, a'_2) = M(a'_1)M(a'_2) = M(a'_2)M(a'_1). \quad (3.50)$$

Por um conjunto completo de observáveis A_1, \dots, A_k entende-se que todos os observáveis são compatíveis par a par, e não existe nenhum outro observável compatível com qualquer um dos observáveis do conjunto A .

Um tipo geral de medida é aquele que incorpora uma perturbação que produz uma mudança de estado do sistema sondado. O símbolo $M(a', a'')$ indica uma medida seletiva na qual somente são aceitos sistemas no estado a'' emergindo no estado a' . A medida $M(a')$ pode ser vista como um caso especial no qual não ocorrem mudanças: $M(a', a') = M(a')$.

A multiplicação de símbolos de medida do tipo $M(a', a'')$ é dada por

$$M(a', a'')M(a''', a^{iv}) = \delta(a'', a''')M(a', a^{iv}); \quad (3.51)$$

nota-se, do ordenamento das medidas, que a multiplicação de símbolos de medida é não comutativa. O símbolo $M(a', b')$ indica uma medida seletiva na qual são rejeitados todos os sistemas exceto aqueles no estado b' e permitindo apenas aos sistemas no estado a' emergir. A lei geral de multiplicação será

$$M(a', b')M(c', d') = \langle b' | c' \rangle M(a', d'), \quad (3.52)$$

onde $\langle b' | c' \rangle$ é um número caracterizando a relação estatística entre b' e c' . Em particular,

$$\langle a' | a'' \rangle = \delta(a', a''). \quad (3.53)$$

Pode-se escrever, com a ajuda da propriedade para soma de símbolos (3.47),

$$M(b', c') = \sum_{a'} M(a') M(b', c') = \sum_{a'} \langle a' | b' \rangle M(a', c') \quad (3.54)$$

e similarmente

$$M(a', b') = \sum_{c'} \langle b' | c' \rangle M(a', c'), \quad (3.55)$$

o que mostra que símbolos de medida de um tipo podem ser expressos como combinação linear de símbolos de medida de outro tipo. A relação geral é dada por

$$M(c', d') = \sum_{a'b'} \langle a' | c' \rangle \langle d' | b' \rangle M(a', b'). \quad (3.56)$$

O número $\langle a' | b' \rangle$ pode ser visto como uma função numérica linear do operador $M(b', a')$; esta correspondência entre operadores e números será mapeada pelo traço

$$\langle a' | b' \rangle = \text{Tr} \{ M(b', a') \}. \quad (3.57)$$

Utilizando a notação $M(b', a') = |b'\rangle \langle a'|$, notamos que o traço atua como se efetuasse uma rotação cíclica nos estados. Das equações para soma de símbolos (3.47) e (3.57) pode-se determinar a forma de um operador X na representação dos símbolos de medida,

$$X = \sum_{a'b'} M(a') X M(b') = \sum_{a'b'} \langle a' | X | b' \rangle M(a', b'), \quad (3.58)$$

onde

$$\langle a' | X | b' \rangle = \text{Tr} \{ X M(b', a') \}. \quad (3.59)$$

Assim, o *valor esperado* de uma observável A para um sistema na base b' é

$$\langle A \rangle_{b'} = \langle b' | A | b' \rangle = \text{Tr} \{ A M(b') \}, \quad (3.60)$$

onde $|b'\rangle \langle b'|$ pode ser interpretado como o operador de projeção do *estado físico* do sistema na base de *estados* $|b'\rangle$. Se ao invés de um estado puro $|b'\rangle$, considerarmos um estado composto de uma mistura estatística dos possíveis estados acessíveis de B , que ocorrem com pesos estatísticos $\pi(b')$, tais que $\sum_{b'} \pi(b') = 1$, a média estatística de A no ensemble

será

$$\langle A \rangle = \sum_{b'} \pi(b') \langle A \rangle_{b'} = \sum_{b'} \pi(b') \text{Tr} \{ A M(b') \} = \text{Tr} \{ \rho A \}, \quad (3.61)$$

onde define-se o operador densidade

$$\rho \equiv \sum_{b'} \pi(b') M(b'). \quad (3.62)$$

Para um estado puro $|b''\rangle$ temos que $\pi(b') = \delta(b', b'')$, de modo que

$$\rho = \sum_{b'} \delta(b', b'') M(b') = M(b''), \quad (3.63)$$

de onde segue imediatamente que, para tal estado, $\rho = \rho^2$.

Mostraremos agora de que maneira o formalismo incorpora estados térmicos, e que estes emergem naturalmente na teoria da medida, se as relações apropriadas forem introduzidas. Por conveniência, consideremos a base $M(n, m)$ associada ao operador número N , na qual os elementos de matriz são diagonais; da equação (3.55), a expressão para ρ torna-se

$$\rho = \sum_{n,m} \sqrt{\pi(E_n) \pi(E_m)} \delta(n, m) M(n, m).$$

Para tratarmos de sistemas em equilíbrio térmico procedemos de maneira equivalente à TFD, introduzindo um sistema auxiliar, de modo a duplicar os graus de liberdade do sistema original, através da relação

$$\delta(n, m) = \delta(\tilde{n}, \tilde{m}). \quad (3.64)$$

Logo

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{n,m} \sqrt{\pi(E_n) \pi(E_m)} \delta(n, m) M(n, m) \\ &= \sum_{n,m} \sqrt{\pi(E_n) \pi(E_m)} M(n, \tilde{n}) M(\tilde{m}, m) \\ &= \sum_n \sqrt{\pi(E_n)} M(n, \tilde{n}) \sum_m \sqrt{\pi(E_m)} M(\tilde{m}, m) \\ &= |0_{(\beta)}\rangle \langle 0_{(\beta)}|, \end{aligned} \quad (3.65)$$

onde, utilizando uma notação sugestiva, definimos o “estado térmico”

$$|0_{(\beta)}\rangle \equiv \sum_n \sqrt{\pi(E_n)} |n, \tilde{n}\rangle. \quad (3.66)$$

Para um dado observável, temos então

$$\begin{aligned}
 \langle 0_{(\beta)} | F | 0_{(\beta)} \rangle &= Tr \{ F \rho \} = Tr \{ F | 0_{(\beta)} \rangle \langle 0_{(\beta)} | \} \\
 &= Tr \left\{ \sum_{n,m} \sqrt{\pi(E_n) \pi(E_m)} |\tilde{m}\rangle \langle m| F |n\rangle \langle \tilde{n}| \right\} \\
 &= \sum_{n,m} \sqrt{\pi(E_n) \pi(E_m)} \langle \tilde{n} | \tilde{m} \rangle \langle m | F | n \rangle \\
 &= \sum_n \pi(E_n) \langle n | F | n \rangle.
 \end{aligned} \tag{3.67}$$

Lembrando que os “estados” $|n, \tilde{n}\rangle$ são, na realidade, projetores na teoria da medida $|n\rangle \langle \tilde{n}|$, a atuação do operador número \tilde{N} , pertencente ao espaço auxiliar, deve ser entendida como

$$\tilde{N} |n, \tilde{n}\rangle = \tilde{N} M(n, \tilde{n}) = \left[M^\dagger(n, \tilde{n}) \tilde{N}^\dagger \right]^\dagger = \left[M(n, \tilde{n}) \tilde{N} \right]^\dagger, \tag{3.68}$$

onde utilizamos o fato dos símbolos de medida constituírem uma base hermitiana do espaço de operadores, isto é $M(n, \tilde{n}) = M^\dagger(n, \tilde{n})$. Por fim, se reconhecermos que, para um sistema em equilíbrio térmico,

$$\pi(E_n) = Z^{-1} e^{-\beta E_n}, \tag{3.69}$$

resulta

$$|0_{(\beta)}\rangle = Z^{-\frac{1}{2}} \sum_n e^{-\frac{1}{2}\beta E_n} |n, \tilde{n}\rangle, \tag{3.70}$$

que é equivalente ao estado de vácuo da TFD, expressão (3.8). De fato, (3.70) corresponde a um estado dependente da temperatura. Na linguagem da teoria da medida, o operador densidade que caracteriza um sistema em equilíbrio térmico projeta seus *estados* no vácuo térmico dos operadores associados aos respectivos observáveis.

Desejamos ainda destacar que uma das regras de conjugação tilde da TFD, expressão (3.10), pode ser aplicada ao produto $NM(n, \tilde{n}) \equiv N|n, \tilde{n}\rangle$, no contexto da teoria da medida, fornecendo

$$[NM(n, \tilde{n})]^\sim = \tilde{N} \tilde{M}(n, \tilde{n}) = \tilde{N} M(\tilde{n}, n) = \tilde{N} |\tilde{n}\rangle \langle n|, \tag{3.71}$$

desde que $\tilde{M}(n, \tilde{n}) = M(\tilde{n}, n)$. Impusemos que uma medida efetuada sobre o sistema físico no estado $|n\rangle$ faz com que o sistema auxiliar emerja, necessariamente, no estado correspondente ao mesmo autovalor n ; do mesmo modo, uma medida efetuada sobre o

sistema auxiliar no estado $|\tilde{n}\rangle$ fornece o autovalor n para o sistema físico. Portanto,

$$M(n, \tilde{n}) = M(\tilde{n}, n). \quad (3.72)$$

Segue então das equações (3.71) e (3.72) que

$$[N |n, \tilde{n}\rangle] = \tilde{N} |n, \tilde{n}\rangle = n |n, \tilde{n}\rangle.$$

Esta última igualdade é decorrência da propriedade (3.9) estendida à teoria da medida, e não uma imposição adicional, como apresentado originalmente [35]. Além destas, da separabilidade dos estados, resulta

$$\left[A, \tilde{B} \right]_{\pm} = \left[A, \tilde{B}^{\dagger} \right]_{\pm} = 0,$$

onde o sinal $(-)$ representa o comutador e $(+)$ o anticomutador, a serem convenientemente utilizados conforme a álgebra tratada seja bosônica ou fermiônica.

Finalizamos esta seção mencionando que podem-se relacionar os símbolos de medida com os operadores da mecânica estatística, os quais serão amplamente utilizados neste trabalho. Porém, por conveniência e facilidade de interpretação, será utilizada a notação convencional, lembrando que sempre se pode retornar aos símbolos de medida através das relações aqui apresentadas.

3.3 Aplicação da TFD ao Modelo FKM

Mostraremos agora uma aplicação da TFD ao modelo FKM estudado no capítulo 1. Em particular, implementaremos a temperatura nas funções de correlação de pares através dos valores esperados no vácuo térmico.

Partimos do hamiltoniano total (3.13), $\hat{H} = H - \tilde{H}$, onde H será o mesmo do FKM original (1.3), e em \tilde{H} basta trocar os operadores pelos conjugados tilde. Desejamos calcular as quantidades com a estrutura de dubleto da TFD

$${}_{qq}\Delta_{kl}^{\mu\nu}(t-t') = \langle 0_{(\beta)} | q_k^{\mu}(t) \bar{q}_l^{\nu}(t') | 0_{(\beta)} \rangle, \quad (3.73)$$

com as mesmas definições anteriores e, da mesma forma, para os pares qp , pq e pp ,

$${}_{qp}\Delta_{kl}^{\mu\nu}(t-t') = \langle 0_{(\beta)} | q_k^{\mu}(t) \bar{p}_l^{\nu}(t') | 0_{(\beta)} \rangle, \quad (3.74)$$

$${}_{pq}\Delta_{kl}^{\mu\nu}(t-t') = \langle 0_{(\beta)} | p_k^{\mu}(t) \bar{q}_l^{\nu}(t') | 0_{(\beta)} \rangle, \quad (3.75)$$

$${}_{pp}\Delta_{kl}^{\mu\nu}(t-t') = \langle 0_{(\beta)} | p_k^\mu(t) \bar{p}_l^\nu(t') | 0_{(\beta)} \rangle . \quad (3.76)$$

Para $t = t'$ devemos ter

$${}_{pp}\Delta_{kl}^{\mu\nu}(0) = \langle 0_{(\beta)} | p_k^\mu(t) \bar{p}_l^\nu(t) | 0_{(\beta)} \rangle = {}_{pp}\Delta_{lk}^{\mu\nu}(0) , \quad (3.77)$$

pois $[p_i(t), p_j(t)] = 0$; símile para os demais.

Entretanto, estamos interessados em calcular os ${}_{pp}\Delta_{lk}^{\mu\nu}(0)$ e demais para $t \neq t'$, utilizando as soluções das equações de movimento de Heisenberg para os operadores $q_i(t)$ e $p_i(t)$. Lembrando que q , \tilde{q} e p e \tilde{p} são hermitianos, iremos calcular as componentes $\mu = \nu = 1$ de (3.73)-(3.76).

Iniciando com o cálculo de (3.77), voltamos à equação de autovalores (A.7) para a matriz de interação, $\sum_k A_{jk} \xi_k^{(s)} = \omega_s^2 \xi_j^{(s)}$. Introduzindo os operadores de abaixamento/levantamento (em ambos os espaços) para o s -ésimo modo normal na representação de número, equações (A.9),

$$a_s = (2\hbar\omega_s)^{-1/2} \sum_j \xi_j^{(s)} (p_j - i\omega_s q_j) , \quad a_s^* = (2\hbar\omega_s)^{-1/2} \sum_j \xi_j^{(s)} (p_j + i\omega_s q_j) ,$$

com as relações de comutação usuais, invertemos as relações entre os operadores através das (A.10),

$$q_j = i \sum_s \xi_j^{(s)} \left(\frac{\hbar}{2\omega_s} \right)^{1/2} (a_s - a_s^*) , \quad p_j = \sum_s \xi_j^{(s)} \left(\frac{\hbar\omega_s}{2} \right)^{1/2} (a_s + a_s^*) .$$

Passamos agora aos operadores térmicos α 's, através das equações (3.35),

$$\alpha = c(\theta_s)a - d(\theta_s)\tilde{a}^* ,$$

e seguintes - (3.36), (3.40) e (3.41) - onde introduzimos o sub-índice s referente a cada modo dos osciladores do banho térmico. Calculamos então as funções de correlações de pares a tempos iguais

$$\langle p_k(0)p_l(0) \rangle = \sum_{s,r} \xi_k^{(s)} \xi_l^{(r)} \frac{\hbar}{2} (\omega_s\omega_r)^{1/2} \langle a_s a_r + a_s a_r^* + a_s^* a_r + a_s^* a_r^* \rangle ,$$

onde, de agora em diante, deve-se entender a média $\langle X \rangle$ como sendo calculada nos estados de vácuo térmico da TFD, $\langle 0_\beta | X | 0_\beta \rangle$, salvo menção em contrário. Esta média fornece

$$\langle p_k(0)p_l(0) \rangle = \sum_s \xi_k^{(s)} \xi_l^{(r)} \frac{\hbar}{2} (\omega_s\omega_r)^{1/2} (c^2(\theta_s) + d^2(\theta_s)) , \quad (3.78)$$

onde $c(\theta_s) = \cosh \theta_s$ e $d(\theta_s) = \sinh \theta_s$ são funções da temperatura, expressas em (3.44).

Assim, a quantidade (3.77) fica

$${}_{pp}\Delta_{kl}^{\mu\nu}(0) = \sum_s \xi_k^{(s)} \xi_l^{(s)} \frac{\hbar\omega_s}{2} B(\theta_s)^{\mu\nu}, \quad (3.79)$$

onde definimos a matriz de transformação, similar a (3.39), como

$$B(\theta_s)^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} c^2(\theta_s) + d^2(\theta_s) & -2c(\theta_s)d(\theta_s) \\ 2c(\theta_s)d(\theta_s) & -(c^2(\theta_s) + d^2(\theta_s)) \end{pmatrix}. \quad (3.80)$$

Para as demais

$${}_{pq}\Delta_{kl}^{\mu\nu}(0) = -i \sum_s \xi_k^{(s)} \xi_l^{(s)} \frac{\hbar}{2} \mathbf{I}^{\mu\nu} = -{}_{qp}\Delta_{kl}^{\mu\nu}(0), \quad (3.81)$$

onde $\mathbf{I}^{\mu\nu}$ é a matriz identidade, e

$${}_{qq}\Delta_{kl}^{\mu\nu}(0) = \sum_s \xi_k^{(s)} \xi_l^{(s)} \frac{\hbar}{2\omega_s} B(\theta_s)^{\mu\nu}. \quad (3.82)$$

Passemos aos termos dependentes do tempo. Utilizando procedimentos semelhantes aos mostrados no Apêndice A, obtemos, para a componente $\mu = \nu = 1$ de (3.76)

$$\begin{aligned} {}_{pp}\Delta_{kl}^{11}(t + \tau) &= \langle p_k^1(t) \bar{p}_l^1(t + \tau) \rangle = \\ &= \left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{A}^{1/2} (c^2(\theta_s) + d^2(\theta_s)) \cos(\mathbf{A}^{1/2}t) + \right. \\ &\quad \left. + i \frac{\hbar}{2} \mathbf{A}^{1/2} (c^2(\theta_s) - d^2(\theta_s)) \sin(\mathbf{A}^{1/2}t) \right]_{kl}. \end{aligned} \quad (3.83)$$

E da mesma forma, para as (3.75) e (3.74)

$$\begin{aligned} {}_{pq}\Delta_{kl}^{11}(t + \tau) &= \langle p_k^1(t) \bar{p}_l^1(t + \tau) \rangle \\ &= \left[\frac{\hbar}{2} (c^2(\theta_s) + d^2(\theta_s)) \sin(\mathbf{A}^{1/2}t) + \right. \\ &\quad \left. - i \frac{\hbar}{2} (c^2(\theta_s) - d^2(\theta_s)) \cos(\mathbf{A}^{1/2}t) \right]_{kl} \\ &= -{}_{qp}\Delta_{kl}^{11}(t + \tau), \end{aligned} \quad (3.84)$$

e para (3.73)

$$\begin{aligned} {}_{qq}\Delta_{kl}^{11}(t + \tau) &= \langle q_k^1(t) \bar{q}_l^1(t + \tau) \rangle \\ &= \left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{A}^{-1/2} (c^2(\theta_s) + d^2(\theta_s)) \cos(\mathbf{A}^{1/2}t) + \right. \end{aligned}$$

$$+ i\frac{\hbar}{2}\mathbf{A}^{1/2} (c^2(\theta_s) - d^2(\theta_s)) \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t). \quad (3.85)$$

Lembrando que, no caso bosônico, valem as seguintes relações

$$\begin{aligned} c^2(x) &= \frac{1}{1 - e^x} = \frac{1}{2} \left(\text{ctgh} \left(\frac{x}{2} \right) + 1 \right), \\ d^2(x) &= \frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{2} \left(\text{ctgh} \left(\frac{x}{2} \right) - 1 \right), \end{aligned} \quad (3.86)$$

e

$$c^2(x) + d^2(x) = \text{ctgh } x, \quad c^2(x) - d^2(x) = 1, \quad (3.87)$$

com $x \equiv \frac{\hbar\omega_s}{kT}$, recuperamos as expressões (1.67), cujo ordenamento normal leva direto às (1.72).

A questão do ordenamento normal dos operadores nos remete ao exemplo de aplicação da equação de Langevin mencionado no final do capítulo 1. Ford, Kac e Mazur consideram o caso de uma força externa $F(t)$ constante e calculam o valor quadrático médio da “corrente flutuante”, obtendo, na escala de tempo $t \gg \alpha^{-1}$ (estado estacionário),

$$\langle : [p_0(t) - \langle p_0(t) \rangle]^2 : \rangle = \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty P \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right) \frac{d\omega}{\omega^2 + \alpha^2}. \quad (3.88)$$

Por outro lado, quando o ordenamento normal não é utilizado, surge a energia de ponto zero dos osciladores,

$$\langle [p_0(t) - \langle p_0(t) \rangle]^2 \rangle = \langle : [p_0(t) - \langle p_0(t) \rangle]^2 : \rangle + \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^{\omega_L} \frac{\hbar\omega}{2} \frac{d\omega}{\omega^2 + \alpha^2}. \quad (3.89)$$

Com base nesses resultados os autores questionam-se sobre qual seria o ordenamento dos operadores que corresponde às medidas experimentais do espectro das flutuações. A resposta fornecida é que isto deve, é claro, ser decidido pelo experimento. No entanto defendem que o produto normal seria o mais adequado, pois leva a um ruído nulo à temperatura do zero absoluto. Gostaríamos de questionar tal posicionamento chamando a atenção para a importância das flutuações de ponto zero, responsáveis por um grande variedade de fenômenos físicos [36, 37], e da qual voltaremos a falar ao final deste trabalho.

Poderíamos também aplicar o formalismo aqui apresentado ao FKM constituído de osciladores fermiônicos. Para isso, algumas modificações deveriam ser efetuadas na matriz de interação \mathbf{A} . Primeiramente ela necessitaria conter a unidade imaginária i , pois do contrário as funções de correlação de pares seriam complexas. Ela também passaria a obedecer a condições de contorno anti-periódicas. Isto poderia ser feito de maneira

simplicista introduzindo um sinal negativo em (1.36), e conseqüentemente modificando a expressão (1.37) para

$$\varphi_s = \pm \frac{\pi}{2N+1} s, \quad s = 0, 1, 2, \dots, 2N-1, \quad (3.90)$$

onde o índice s percorre agora um número par de osciladores. Entretanto, desenvolvimentos adicionais não seriam levados a efeito senão com razoáveis dificuldades. Uma maneira mais formal de realizar tais modificações seria utilizar-se das variáveis grassmannianas - ver Zinn-Justin, cap.1 [38]. Tais variáveis são utilizadas em teorias que tratam de campos fermiônicos e sua quantização [39]. Assim, na hamiltoniana original do FKM, equação (1.3), as coordenadas q 's e momentos p 's seriam substituídos pelas variáveis θ_i e $\dot{\theta}_i$ respectivamente, que obedecem à álgebra

$$\theta_i \theta_j + \theta_j \theta_i = 0,$$

constituindo-se de “funções clássicas anticomutativas”.

Capítulo 4

Equação Mestra para um Sistema de Partículas

Neste capítulo apresentamos o trabalho de Cohen *et al* [10], que trata o problema de um sistema pequeno \mathcal{S} interagindo (linearmente) com um grande reservatório \mathcal{R} , através do formalismo do operador densidade. Considerando uma taxa de variação *coarse-grained* para o operador densidade de \mathcal{S} , é mostrado como a Equação Mestra pode ser deduzida de maneira simples e perturbativamente, quando a interação entre \mathcal{S} e \mathcal{R} possui um efeito fraco durante o (curto) tempo de correlação das flutuações do reservatório. Esta abordagem é ilustrada para o caso em que o sistema consiste de um oscilador harmônico acoplado a um reservatório composto também de osciladores harmônicos. A evolução temporal do oscilador é descrita nas representações de Schrödinger e Heisenberg e, em particular, é mostrado que as equações de movimento de Heisenberg podem ser escritas de maneira semelhante à Equação de Langevin para o movimento browniano. Uma apresentação semelhante a esta pode ser encontrada em outros livros clássicos da área, tais como Louisell [40], Scully [41] van Kampen [42] e Gardiner [43].

4.1 Equação Mestra para um Sistema \mathcal{S} Interagindo com um Reservatório \mathcal{R}

4.1.1 Equação para a Evolução do Sistema \mathcal{S}

Seja o hamiltoniano do sistema global $\mathcal{S} + \mathcal{R}$ na representação de Schrödinger

$$H^s = H_S^s + H_R^s + V^s = H_0^s + V^s. \quad (4.1)$$

Aqui H_S é o hamiltoniano de \mathcal{S} , H_R é o hamiltoniano do reservatório \mathcal{R} , H_0 é o hamiltoniano livre, V é a interação entre \mathcal{S} e \mathcal{R} e o índice s refere-se à representação de Schrödinger. O operador densidade ρ^s do sistema global $\mathcal{S} + \mathcal{R}$ obedece à equação de evolução

$$\frac{d}{dt}\rho^s(t) = \frac{1}{i\hbar}[H^s, \rho^s(t)], \quad (4.2)$$

que se torna, na representação de interação com respeito a $\mathcal{S} + \mathcal{R}$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar}[V(t), \rho(t)], \quad (4.3)$$

com

$$\rho(t) = e^{i(H_S+H_R)t/\hbar}\rho^s(t)e^{-i(H_S+H_R)t/\hbar} \quad (4.4)$$

$$V(t) = e^{i(H_S+H_R)t/\hbar}V^s e^{-i(H_S+H_R)t/\hbar}. \quad (4.5)$$

A vantagem da representação de interação é que, se V for suficientemente pequeno, ρ evolui mais lentamente. Integrando-se a equação (4.3) entre t e $t + \Delta t$ resulta

$$\rho(t + \Delta t) = \rho(t) + \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} [V(t'), \rho(t')] dt', \quad (4.6)$$

a qual pode ser *particionada* no intervalo temporal (separando o intervalo em $t < t' < t + \Delta t$); substituindo

$$\rho(t') = \rho(t) + \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t'} [V(t''), \rho(t'')] dt''$$

em (4.3), de modo que

$$\frac{d}{dt'}\rho(t') = \frac{1}{i\hbar}[V(t'), \rho(t')] = \frac{1}{i\hbar}[V(t'), \rho(t)] + \frac{1}{i\hbar}[V(t'), \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t'} [V(t''), \rho(t'')] dt'']; \quad (4.7)$$

integrando esta equação entre t e $t + \Delta t$, obtemos

$$\begin{aligned} \Delta\rho(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} [V(t'), \rho(t)] dt' + \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} [V(t'), [V(t''), \rho(t'')]] dt'', \end{aligned} \quad (4.8)$$

com a definição

$$\Delta\rho(t) = \rho(t + \Delta t) - \rho(t). \quad (4.9)$$

Aqui, o interesse é a evolução do sistema pequeno \mathcal{S} . A equação $\sigma^s = Tr_{\mathcal{R}}\{\rho^s\}$, que define o operador densidade reduzido σ^s de \mathcal{S} a partir do operador densidade ρ^s do sistema $\mathcal{S} + \mathcal{R}$ torna-se, na representação de interação

$$\sigma(t) = Tr_{\mathcal{R}}\{\rho(t)\}. \quad (4.10)$$

Tomando-se o traço de (4.8) com respeito a \mathcal{R} resulta

$$\begin{aligned} \Delta\sigma(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} Tr_{\mathcal{R}}\{[V(t'), \rho(t)]\} dt' + \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} Tr_{\mathcal{R}}\{[V(t'), [V(t''), \rho(t'')]]\} dt''. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Até este ponto nenhuma aproximação foi introduzida e a equação (4.11) é exata. Antes de prosseguir e introduzir algumas aproximações, Cohen *et al* irão descrever as hipóteses a serem feitas com relação ao reservatório.

4.1.2 Hipóteses sobre o Reservatório \mathcal{R}

a) Estado do reservatório

Seja

$$\sigma_{\mathcal{R}}(t) = Tr_{\mathcal{S}}\{\rho(t)\}, \quad (4.12)$$

o operador densidade de \mathcal{R} , obtido tomando-se o traço parcial de $\rho(t)$ sobre \mathcal{S} . Como \mathcal{R} é um reservatório, a variação de $\sigma_{\mathcal{R}}(t)$ devido ao acoplamento com \mathcal{S} é pequena. Como uma primeira aproximação, $\sigma_{\mathcal{R}}(t)$ pode ser considerado constante na representação de interação*

$$\sigma_{\mathcal{R}}(t) \simeq \sigma_{\mathcal{R}}(0) = \sigma_{\mathcal{R}}. \quad (4.13)$$

Além disso, assume-se que o reservatório está num estado estacionário, i.e, que $\sigma_{\mathcal{R}}$ comuta com o hamiltoniano $H_{\mathcal{R}}$

$$[\sigma_{\mathcal{R}}, H_{\mathcal{R}}] = 0. \quad (4.14)$$

Em outras palavras, $\sigma_{\mathcal{R}}$ não possui elementos não-diagonais entre os estados de $H_{\mathcal{R}}$ com diferentes autovalores e pode, portanto, ser construído a partir de uma mistura estatística

* O acoplamento com V obviamente causa pequenas correlações entre \mathcal{S} e \mathcal{R} , que são essenciais para a evolução de \mathcal{S} .

de autoestados $|\mu\rangle$ de H_R ,

$$H_R |\mu\rangle = E_\mu |\mu\rangle, \quad (4.15)$$

com peso estatístico p_μ , isto é,

$$\sigma_R = \sum_\mu p_\mu |\mu\rangle\langle\mu|. \quad (4.16)$$

Este é o caso em particular quando \mathcal{R} está em equilíbrio termodinâmico a uma temperatura T , p_μ sendo igual a

$$p_\mu = Z^{-1} e^{-E_\mu/k_B T}, \quad Z = \sum_\mu e^{-E_\mu/k_B T}.$$

b) *Médias a um e dois instantes para os observáveis do reservatório*

A interação V entre \mathcal{S} e \mathcal{R} será tomada como um produto de um observável S de \mathcal{S} e um observável R de \mathcal{R} (acoplamento linear - ver, p.ex., Feynman-Vernon [6]).

$$V^s = -S^s R^s, \quad (4.17)$$

ou, na representação de interação

$$V(t) = -S(t)R(t), \quad (4.18)$$

com

$$\begin{aligned} S(t) &= e^{iH_S t/\hbar} S^s e^{-iH_S t/\hbar} \\ R(t) &= e^{iH_R t/\hbar} R^s e^{-iH_R t/\hbar}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

pois os observáveis de \mathcal{S} comutam com os de \mathcal{R} .

Supõe-se que o valor médio de R nos estados do reservatório \mathcal{R} é nulo,

$$Tr_R\{\sigma_R^s R^s\} = Tr_R\{\sigma_R(t)R(t)\} = Tr_R\{\sigma_R R(t)\} = 0. \quad (4.20)$$

A primeira igualdade resulta da aplicação da segunda das equações (4.19) e da propriedade da invariância do traço sob permutações cíclicas. Segue de (4.18) que, para todo t ,

$$Tr_R\{\sigma_R V(t)\} = -Tr_R\{\sigma_R S(t)R(t)\} = -S(t)Tr_R\{\sigma_R R(t)\} = 0, \quad (4.21)$$

devido à hipótese (4.20). O valor médio em σ_R do acoplamento $V(t)$ é portanto nulo.

O valor médio de $R(t)$ é uma média a um instante. Para dois instantes,

$$g(t', t'') = Tr_R\{ \sigma_R R(t') R(t'') \}, \quad (4.22)$$

é a média no reservatório \mathcal{R} de um produto de dois observáveis $R(t')$ e $R(t'')$, tomada em dois instantes distintos t' e t'' .

Utilizando-se o comutador (4.14), a segunda equação de (4.19) e novamente a invariância do traço de um produto numa permutação cíclica, vê-se que $g(t', t'')$ depende apenas de $\tau \equiv t' - t''$,

$$Tr_R\{ \sigma_R R(t') R(t'') \} = Tr_R\{ \sigma_R R(\tau) R(0) \} \equiv g(\tau). \quad (4.23)$$

O interesse em trabalhar com a última grandeza é a necessidade futura de se calcular funções de correlação em dois instantes distintos (e também funções de Green de dois pontos). O significado físico de $g(\tau)$ será discutido posteriormente, mas podemos antecipar que a sua parte real é uma função de correlação simétrica que descreve a dinâmica das flutuações de R nos estados de σ_R , sua parte imaginária estando relacionada a sua susceptibilidade linear.

Finalmente, as hipóteses feitas sobre \mathcal{R} são equivalentes a assumir que \mathcal{R} está num estado estacionário e exerce sobre \mathcal{S} uma força que flutua em torno de um valor médio nulo, com tempo de correlação τ_c curto.

4.1.3 Cálculo Perturbativo da Taxa de Variação “coarse-grained” do Sistema

Retornando à equação (4.11), Cohen *et al* derivam a partir desta a Equação Mestra para σ , introduzindo várias aproximações.

Primeiramente, se V é suficientemente pequeno, e se Δt é suficientemente curto comparado com o tempo de evolução t_R de σ , isto justifica desprezar a evolução de ρ entre t e t'' no último termo de (4.11), já que é de segunda ordem em V , e substituir $\rho(t'')$ por $\rho(t)$. Tal aproximação é equivalente a uma iteração[†] de (4.6) na qual apenas termos até segunda ordem em V são retidos.

Após tal aproximação, o lado direito de (4.11) contém apenas $\rho(t)$, que pode ser escrito na forma

$$\rho(t) = Tr_R\{ \rho(t) \} \otimes Tr_S\{ \rho(t) \} + \rho_{correl}(t), \quad (4.24)$$

onde $\rho_{correl}(t)$ descreve as correlações que existem entre \mathcal{S} e \mathcal{R} no tempo t . No que se

[†] o termo “iteração” refere-se à resolução do intervalo de particionamento (coarse-grained).

segue os autores irão desprezar a contribuição de $\rho_{\text{correl}}(t)$ para $\Delta\sigma(t)$ (na seção seguinte voltaremos às condições de validade desta aproximação, que assume que $\tau_c \ll \Delta t$).

A idéia geral é que *as correlações iniciais entre \mathcal{S} e \mathcal{R} no instante t desaparecem após um tempo τ_c* (tempo de colisão $\tau_c \ll t_R$) e contribuem pouco para a evolução de σ no intervalo $[t, t + \Delta t]$ (novas correlações entre \mathcal{S} e \mathcal{R} surgem entre t e $t + \Delta t$, e são estas as responsáveis pela evolução de σ). Tal aproximação é equivalente a escrever, usando (4.10), (4.12) e (4.13),

$$\rho(t) = \sigma_S(t) \otimes \sigma_R. \quad (4.25)$$

Os autores justificam a introdução de duas aproximações, uma baseada na condição $\Delta t \ll t_R$ e outra baseada na condição $\Delta t \gg \tau_c$, o que implica a *existência de duas escalas de tempo muito distintas*:

$$\tau_c \ll \Delta t \ll t_R. \quad (4.26)$$

Essas aproximações permitem escrever (4.11) numa forma que relaciona o acréscimo $\Delta\sigma$ de σ entre t e $t + \Delta t$ para $\sigma(t)$. Trocando-se $\rho(t'')$ e $\rho(t)$ por (4.25) e dividindo-se ambos os lados de (4.11) por Δt , obtém-se

$$\frac{\Delta\sigma}{\Delta t} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \text{Tr}_R\{[V(t'), [V(t''), \sigma_S(t) \otimes \sigma_R]]\}. \quad (4.27)$$

A taxa de variação $\Delta\sigma/\Delta t$ é chamada de taxa de variação “*coarse-grained*” (ou taxa de “grão grosso”) porque ela pode ser considerada como a *média da taxa instantânea $d\sigma/dt$ no intervalo Δt* :

$$\frac{\Delta\sigma}{\Delta t} = \frac{\sigma(t + \Delta t) - \sigma(t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \frac{d\sigma}{dt'} dt'. \quad (4.28)$$

Todas as variações rápidas da taxa instantânea que ocorrem numa escala de tempo menor do que Δt são “suavizadas” nessa média. O fato de que $\Delta\sigma/\Delta t$ depende apenas do estado $\sigma(t)$ no instante t do sistema \mathcal{S} significa que, *examinada com uma resolução temporal não muito alta, a evolução de \mathcal{S} depende apenas do presente e não do passado*. Identifica-se aqui a caracterização de um processo Markoviano, já citado anteriormente.

Uma vez que, de acordo com (4.18) e (4.19), $V(t')$ e $V(t'')$ são, como $\sigma_S(t) \otimes \sigma_R$, produtos de observáveis de \mathcal{S} e \mathcal{R} que comutam entre si, o traço sobre \mathcal{R} de (4.27) refere-se apenas a produtos da forma $\sigma_R R(t') R(t'')$ ou $\sigma_R R(t'') R(t')$. Assim, a integral em (4.27) depende das variáveis do reservatório apenas através de médias de dois tempos $g(\tau)$ ou $g(-\tau)$, com $\tau = t' - t''$. Para tirar vantagem do fato que $g(\tau)$ decresce rapidamente com τ , os autores julgam conveniente trocar as variáveis de integração em (4.27), de t' e t''

para τ e t' , resultando

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' = \int_0^{\Delta t} d\tau \int_{t+\tau}^{t+\Delta t} dt'. \quad (4.29)$$

Já que as médias a dois instantes $g(\tau)$ e $g(-\tau)$ são desprezíveis para $\tau \ll t_R$, a única região do domínio de integração onde o integrando é não nulo é uma faixa estreita de largura τ_c . Como $\Delta t \gg \tau_c$ e $t \gg \tau$, os autores estendem o limite superior da integral em $d\tau$ até infinito e o limite inferior da integral em dt' para t . Salientamos aqui que, dependendo do interesse na análise do problema, esta aproximação pode ser dispensada. Mostraremos como isto pode ser feito no capítulo seguinte, obtendo a equação mestra para um sistema específico. Finalmente, utilizando-se $V(t) = -S(t)R(t)$ (eq. (4.18)), obtém-se para a taxa *coarse-grained*,

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma}{\Delta t} &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \times \\ &\times \{g(\tau)[S(t')S(t'-\tau)\sigma_S(t) - S(t'-\tau)\sigma_S(t)S(t')] + \\ &+ g(-\tau)[\sigma_S(t)S(t'-\tau)S(t') - S(t')\sigma_S(t)S(t'-\tau)]\}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Na seqüência, para realizarem a integração em dt' os autores projetam (4.30) na base de autoestados do hamiltoniano H_S do sistema \mathcal{S} . Feito isto, Cohen *et al* obtêm, na representação de Schrödinger, a Equação Mestra, que consistirá de uma equação diferencial linear de primeira ordem, com coeficientes independentes do tempo. Não faremos aqui esta dedução. Ao invés, iremos ilustrar as idéias até aqui introduzidas, aplicando-as ao caso de um oscilador harmônico acoplado a um reservatório composto também de osciladores harmônicos.

4.2 Equação Mestra para um Oscilador Harmônico Amortecido

4.2.1 O Sistema Físico

Cohen *et al* consideram o caso no qual o sistema pequeno \mathcal{S} é um oscilador harmônico unidimensional de frequência ω_0 cuja hamiltoniana é

$$H_S = \hbar\omega_0(b^\dagger b + \frac{1}{2}), \quad (4.31)$$

onde b^\dagger e b são os operadores de levantamento e abaixamento associados a este oscilador. O reservatório \mathcal{R} consiste de um número infinito de osciladores harmônicos unidimensionais i , de frequência ω_i , com os operadores de levantamento e abaixamento a_i^\dagger e a_i , tal que o

hamiltoniano H_R de \mathcal{R} escreve-se

$$H_R = \sum_i \hbar\omega_i (a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2}). \quad (4.32)$$

Considera-se uma hamiltoniana de acoplamento entre \mathcal{S} e \mathcal{R} muito simples, da forma

$$V = V^\dagger = \sum_i (g_i b^\dagger a_i + g_i^* b a_i^\dagger), \quad (4.33)$$

onde g_i é a constante de acoplamento entre \mathcal{S} e o i -ésimo oscilador de \mathcal{R} . Cada termo em (4.33) descreve um processo em que \mathcal{S} ganha/perde 1 quantum de energia $\hbar\omega_0$, e onde o oscilador i de \mathcal{R} perde/ganha 1 quantum $\hbar\omega_i$.

Este modelo pode descrever diversas situações físicas: \mathcal{S} pode ser um oscilador material (uma carga ligada elasticamente), e os osciladores i podem ser diferentes modos do campo de radiação - assim a equação mestra para \mathcal{S} descreve como o movimento da carga é amortecido pela emissão espontânea, absorção e emissão estimulada da radiação; \mathcal{S} também pode ser um modo de uma cavidade eletromagnética, e os osciladores i seriam osciladores materiais contidos nas paredes da cavidade - a equação mestra neste caso descreve o amortecimento desse modo normal da cavidade devido às perdas nas paredes.

Cohen *et al* destacam que a vantagem deste modelo é que ele leva a equações de Heisenberg para os operadores a e b que são *lineares* nestes operadores. Isto torna mais fácil derivar, a partir dessas equações, uma equação de evolução para b que *se assemelha muito à Equação de Langevin* utilizada na teoria clássica para descrever o movimento browniano.

No próximo capítulo mostraremos a derivação da Equação Mestra para a taxa de variação *coarse-grained* considerando uma forma mais geral para o potencial de interação. Deduziremos também a equação para a evolução das populações dos níveis de energia do oscilador.

4.2.2 Equação Mestra na Forma de Operadores

Escrevendo-se a taxa de variação *coarse-grained*, (4.27), com a mudança de variáveis (4.29), e estendendo-se os limites de integração, tem-se

$$\frac{\Delta\sigma}{\Delta t} = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{\Delta t} \int_0^\infty d(t' - t'') \int_t^{t+\Delta t} dt' \text{Tr}_R[V(t'), [V(t''), \sigma_S(t) \otimes \sigma_R]], \quad (4.34)$$

com V da forma

$$V = -(b^\dagger R^{(+)} + bR^{(-)}), \quad (4.35)$$

onde

$$R^{(+)} = -\sum_i g_i a_i, \quad R^{(-)} = -\sum_i g_i^* a_i^\dagger. \quad (4.36)$$

Supõe-se que σ_R é diagonal na base $\{|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle\}$ de autoestados de H_R . Dos dois operadores $V(t')$ e $V(t'')$ de (4.34), um contém a_i e o outro a_i^\dagger , então $Tr_R V(t')V(t'')\sigma_R \neq 0$ em (4.34). Tal escolha (eq. (4.35)) resulta em apenas duas possibilidades: a primeira consiste em se tomar $V(t') = -b^\dagger(t')R^{(+)}(t')$ e $V(t'') = -b(t'')R^{(-)}(t'')$, e a segunda é trocar t' e t'' nestas expressões. Além disso pode-se constatar que os dois termos de (4.35) que correspondem a essas duas possibilidades são conjugados hermitianos um do outro. Na representação de interação, os operadores $b(t)$, $a_i(t)$, etc, têm uma dependência temporal muito simples, a saber, $b(t) = be^{-i\omega_0 t}$, $a_i(t) = a_i e^{-i\omega_i t}$, etc. Finalmente, sendo $Tr_R[\sigma_R X] = \langle X \rangle_R$ e sendo o integrando de (4.34) dependente apenas de $t' - t''$, utiliza-se a invariância do traço sob permutações cíclicas para se obter

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma}{\Delta t} = & -\frac{1}{\hbar^2} \times \\ & \times \left\{ (b^\dagger b \sigma_S - b \sigma_S b^\dagger) \int_0^\infty \langle R^{(+)}(t')R^{(-)}(t'') \rangle_R e^{i\omega_0(t'-t'')} d(t'-t'') + \right. \\ & + (\sigma_S b b^\dagger - b^\dagger \sigma_S b) \int_0^\infty \langle R^{(-)}(t'')R^{(+)}(t') \rangle_R e^{i\omega_0(t'-t'')} d(t'-t'') \left. \right\} + \\ & + c.h., \end{aligned} \quad (4.37)$$

onde *c.h.* significa o conjugado hermitiano dos termos anteriores, e a integral em t' resultou simplesmente em Δt . De acordo com (4.16), o operador densidade para um campo de radiação corresponde a uma mistura estatística de autoestados $|n_1 \dots n_i \dots\rangle$ de H_R , representando n_1 fótons no modo 1, \dots , n_i fótons no modo $i \dots$, com um peso $p(n_1 \dots n_i \dots)$:

$$\sigma_R = \sum_{\{n_i\}} p(n_1 \dots n_i \dots) |n_1 \dots n_i \dots\rangle \langle n_1 \dots n_i \dots|.$$

Utilizando esta equação e (4.36) Cohen *et al* calculam as médias a dois instantes que aparecem em (4.37), obtendo

$$\begin{aligned} \langle R^{(+)}(t')R^{(-)}(t'') \rangle_R & = \sum_i |g_i|^2 \langle a_i a_i^\dagger \rangle_R e^{-i\omega_i(t'-t'')} \\ & = \sum_i |g_i|^2 (\langle n_i \rangle + 1) e^{-i\omega_i(t'-t'')}, \end{aligned} \quad (4.38)$$

onde $\langle n_i \rangle = \sum_{\{n_i\}} n_i P(n_1 \cdots n_i \cdots)$ é o número médio de quanta de excitação do oscilador i . Um cálculo análogo fornece

$$\langle R^{(-)}(t'') R^{(+)}(t') \rangle_R = \sum_i |g_i|^2 \langle n_i \rangle e^{-i\omega_i(t' - t'')}. \quad (4.39)$$

A fim de calcular a primeira integral em (4.37), do tipo $I \equiv \int_0^\infty e^{-i(\omega_i - \omega_0)\tau} d\tau$, faz-se necessário contornar a divergência no limite superior para $\omega_i = \omega_0$, i.e, o integrando deve ser regularizado para que I seja uma distribuição regular no infinito. Para isso introduzimos um parâmetro ε infinitesimal,

$$I = \int_0^\infty e^{-i[(\omega_i - \omega_0) - i\varepsilon]\tau} d\tau = \frac{i}{(\omega_0 - \omega_i) + i\varepsilon}. \quad (4.40)$$

Mas, utilizando a conhecida fórmula,

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x), \quad (4.41)$$

onde \mathcal{P} significa o Valor Principal, a integral I fica

$$I = i\mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_0 - \omega_i} \right) + \pi\delta(\omega_0 - \omega_i). \quad (4.42)$$

Assim, incluindo as constantes, a primeira integral da expressão (4.37) torna-se

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_i |g_i|^2 (\langle n_i \rangle + 1) e^{-i[(\omega_i - \omega_0) - i\varepsilon]\tau} \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_i |g_i|^2 (\langle n_i \rangle + 1) \left[i\mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_0 - \omega_i} \right) + \pi\delta(\omega_0 - \omega_i) \right] \\ &= \frac{\Gamma + \Gamma'}{2} + i(\Delta + \Delta'), \end{aligned} \quad (4.43)$$

onde as quantidades Γ , Γ' , Δ e Δ' , que serão interpretadas fisicamente mais adiante, foram definidas como

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i |g_i|^2 \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i), \quad (4.44)$$

$$\Gamma' = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i |g_i|^2 \langle n_i \rangle \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i), \quad (4.45)$$

$$\hbar\Delta = \mathcal{P} \left(\sum_i \frac{|g_i|^2}{\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i} \right), \quad (4.46)$$

$$\hbar\Delta' = \mathcal{P} \left(\sum_i \frac{|g_i|^2 \langle n_i \rangle}{\hbar\omega_0 - \hbar\omega_i} \right). \quad (4.47)$$

Para a segunda integral de (4.37) um cálculo similar resulta em

$$\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_i |g_i|^2 \langle n_i \rangle e^{-i[(\omega_i - \omega_0) - i\varepsilon]\tau} = \frac{\Gamma'}{2} + i\Delta'. \quad (4.48)$$

Finalmente, substituindo (4.43) e (4.48) em (4.37), usando $[b, b^\dagger] = 1$, e voltando à representação de Schrödinger, obtém-se a seguinte equação mestra na forma de operadores:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dt} = & - \frac{\Gamma}{2} [\sigma, b^\dagger b]_+ - \Gamma' [\sigma, b^\dagger b]_+ - \Gamma' \sigma \\ & - i(\omega_0 + \Delta) [b^\dagger b, \sigma] + \Gamma b \sigma b^\dagger + \Gamma' (b^\dagger \sigma b + b \sigma b^\dagger). \end{aligned} \quad (4.49)$$

Nesta equação, $[A, B]_+$ representa o anti-comutador $AB + BA$. Nota-se também a ausência de termos envolvendo Δ' .

Conforme comentado por Cohen *et al*, se o número médio de quanta $\langle n_i \rangle$ do oscilador i depender apenas de sua energia, devido à função delta em (4.44) e (4.45), resulta

$$\Gamma' = \langle n(\omega_0) \rangle \Gamma, \quad (4.50)$$

onde $\langle n(\omega_0) \rangle$ é o número médio de quanta nos osciladores do reservatório que possuem a mesma frequência ω_0 do oscilador \mathcal{S} . Se, além disso, \mathcal{R} está em equilíbrio termodinâmico, $\langle n(\omega_0) \rangle$ é igual à $[\exp \hbar\omega_0/k_B T - 1]^{-1}$.

A Equação Mestra obtida, (4.49), é o ponto de partida para estudarmos a interação da partícula browniana com o meio que a cerca no contexto da teoria quântica. Voltaremos a esta equação no capítulo seguinte.

4.3 Evolução das Populações

A equação para a evolução das populações é obtida tomando o valor médio de (4.49) nos estados $|n\rangle$. Sendo σ_{nn} a população do nível de energia $|n\rangle$ de \mathcal{S} , essa média fornece

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_{n,n} = & - n\Gamma\sigma_{n,n} + (n+1)\Gamma\sigma_{n+1,n+1} + \\ & + (n+1)\Gamma'(\sigma_{n+1,n+1} - \sigma_{n,n}) + n\Gamma'(\sigma_{n-1,n-1} - \sigma_{n,n}). \end{aligned} \quad (4.51)$$

A interpretação de Γ e Γ' segue imediatamente desta equação. Se \mathcal{S} é considerado um

oscilador atômico e \mathcal{R} o campo de radiação, então Γ está associado ao processo de emissão espontânea e Γ' aos processos de absorção e emissão estimulada. Mais precisamente, $n\Gamma$ é a taxa de emissão do nível $|n\rangle$ para o nível mais baixo $|n-1\rangle$. O nível $|n\rangle$ é esvaziado através da emissão espontânea para o nível $|n-1\rangle$ a uma taxa $n\Gamma$, e preenchido a partir do nível $|n+1\rangle$ a uma taxa $(n+1)\Gamma$. Os fatores n e $n+1$ estão relacionados simplesmente aos quadrados dos módulos dos elementos de matriz de b e b^\dagger que aparecem em V (ver (4.33)) entre $|n\rangle$ e $|n-1\rangle$ ou entre $|n+1\rangle$ e $|n\rangle$. Similarmente, o processo de absorção estimulada esvazia o nível $|n\rangle$ para o nível $|n+1\rangle$ a uma taxa $(n+1)\Gamma'$ e o preenche a partir do nível $|n-1\rangle$ a uma taxa $n\Gamma'$.

O parâmetro Δ que aparece em (4.49) está relacionado aos desvios radiativos “espontâneos” que ocorrem na ausência de qualquer excitação de \mathcal{R} ($\hbar\Delta$ não depende de $\langle n_i \rangle$ em (4.46)). Devido à estrutura de V , o estado fundamental $|0\rangle$ do oscilador na presença do reservatório no estado $|0_1 0_2 \cdots 0_i \dots\rangle$ não é acoplado a nenhum outro estado. Portanto, o desvio radiativo espontâneo $\hbar\Delta$ de $|0\rangle$ é nulo. Por outro lado, se o oscilador está no estado $|1\rangle$, o acoplamento V dado em (4.33) permite transições nas quais \mathcal{S} decai de $|1\rangle$ para $|0\rangle$, e onde o oscilador i de \mathcal{R} sobe de $|0_i\rangle$ para $|1_i\rangle$. O desvio $\hbar\Delta$ é simplesmente o desvio radiativo associado a tais processos (somados sobre todos os osciladores i). Além disso, a diferença entre os desvios $\hbar\Delta_n$ e $\hbar\Delta_{n-1}$ de dois níveis adjacentes é independente de n e igual a $\hbar\Delta$, o que mostra que os níveis perturbados do oscilador permanecem equidistantes, com a frequência aparente $\omega_0 + \Delta$, como pode ser visto no quarto termo em (4.49).

Finalmente, Cohen *et al* consideraram o último parâmetro, Δ' . Por depender de $\langle n_i \rangle$ (ver (4.47)), ele representa o desvio radiativo devido à radiação incidente. Assim, os processos de absorção e emissão estimulada causam desvios em todos os níveis de \mathcal{S} da mesma quantidade e, portanto, não alteram a frequência do oscilador. Esta é a razão pela qual Δ' não aparece em (4.49).

4.4 Equação de Langevin Quântica para um Sistema Físico Simples

A Equação Mestra derivada anteriormente, (4.49), descreve, na representação de Schrödinger, como um sistema pequeno \mathcal{S} evolui sob a influência de sua interação com um reservatório grande \mathcal{R} . Na seqüência, Cohen *et al* abordam o mesmo problema na representação de Heisenberg. Limitam-se também ao modelo simples tratado anteriormente, o de um oscilador harmônico \mathcal{S} acoplado a um reservatório \mathcal{R} de osciladores harmônicos. Esta abordagem é muito semelhante a que será vista nos próximos capítulos deste trabalho. Os objetivos aqui são os seguintes:

(i) mostrar que as equações de Heisenberg para os observáveis de \mathcal{S} podem ser escritas sob a forma similar às equações de Langevin para o movimento browniano clássico;

(ii) usar então essas equações de Heisenberg - Langevin para analisar as relações existentes entre flutuações e dissipação e calcular funções de correlação para os observáveis de \mathcal{S} .

A seguir será feita uma derivação das equações quânticas de Heisenberg - Langevin para o modelo de osciladores harmônicos, bem como uma discussão do teorema flutuação-dissipação para estas equações.

4.4.1 Equações de Heisenberg-Langevin para um Oscilador Forçado

Nesta seção, retornaremos ao modelo introduzido anteriormente, de um oscilador harmônico \mathcal{S} (de frequência ω_0 , com operadores de levantamento e abaixamento b^\dagger e b) acoplado a um reservatório \mathcal{R} composto de osciladores i (frequência ω_i , com operadores de levantamento e abaixamento a_i^\dagger e a_i). O hamiltoniano total H desse sistema pode expresso como

$$\begin{aligned} H &= H_S + H_R + V \\ &= \hbar\omega_0(b^\dagger b + \frac{1}{2}) + \sum_i \hbar\omega_i(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2}) + \sum_i (g_i b^\dagger a_i + g_i^* b a_i^\dagger), \end{aligned} \quad (4.52)$$

onde g_i é uma constante de acoplamento. Daqui em diante, até o final deste capítulo, reproduziremos o tratamento do modelo segundo Cohen *et al.*

a) Equações de Heisenberg acopladas

Utilizando as relações de comutação entre os operadores escada, podemos escrever a equação de Heisenberg para $b(t)$ como

$$i\hbar \frac{d}{dt} b(t) = [b(t), H] = \hbar\omega_0 b(t) + \sum_i g_i a_i(t). \quad (4.53)$$

Esta depende do operador $a_i(t)$ do reservatório, cuja evolução obedece a uma equação similar

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_i(t) = [a_i(t), H] = \hbar\omega_i a_i(t) + \sum_i g_i^* b(t). \quad (4.54)$$

As evoluções dos operadores de aniquilação $b(t)$ e $a_i(t)$ estão acopladas uma a outra pelas equações lineares (4.53) e (4.54). Os autores destacam que a simplicidade dessas equações resulta da forma bilinear em b ou b^\dagger e a_i ou a_i^\dagger que foi *escolhida* para a interação V e do fato que os comutadores entre b 's e a 's são simplesmente $[b, b^\dagger] = 1$ e $[a_i, a_i^\dagger] = 1$.

Por conveniência, os autores fazem (ver Scully [41])

$$b(t) = \hat{b}(t)e^{-i\omega_0 t}, \quad a_i(t) = \hat{a}_i(t)e^{-i\omega_i t}, \quad (4.55)$$

tal que \hat{b} e \hat{a}_i evoluem apenas sob a influência de V (representação de Furry [44]). As equações (4.53) e (4.54) tornam-se então (para um a_i)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{b}(t) = \sum_i g_i \hat{a}_i(t) e^{i(\omega_0 - \omega_i)t} \quad (4.56)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}_i(t) = g_i^* \hat{b}(t) e^{i(\omega_i - \omega_0)t}. \quad (4.57)$$

b) *A equação de Langevin quântica e forças de Langevin quânticas*

Integrando a equação (4.57) e inserindo o resultado em (4.56) tem-se

$$\frac{d}{dt} \hat{b}(t) = - \int_0^{t-t_0} \kappa(\tau) \hat{b}(t - \tau) d\tau + \hat{F}(t), \quad (4.58)$$

sendo $\tau = t - t'$, e onde foram definidos

$$\kappa(\tau) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_i |g_i|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_i)\tau} \quad (4.59)$$

$$\hat{F}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_i g_i \hat{a}_i(t_0) e^{i(\omega_0 - \omega_i)\tau}. \quad (4.60)$$

Os autores analisam primeiramente a função $\kappa(t)$ em (4.59). Uma vez que \mathcal{R} é um reservatório, as frequências ω_i dos osciladores cobrem uma faixa bastante ampla; além disso, $|g_i|^2$, em geral, varia lentamente com ω_i . Segue que o conjunto de exponenciais oscilantes de (4.59) interferem destrutivamente à medida que τ cresce a partir de zero, tal que $\kappa(\tau)$ torna-se desprezível para $\tau \gg \tau_c$ (tempo de correlação do reservatório). E mais, $\hat{b}(t - \tau)$ varia muito lentamente com τ , numa escala de tempo $t_R \gg \tau_c$, onde t_R é o tempo de amortecimento de \mathcal{S} . Pode-se então desprezar a variação com τ de $\hat{b}(t - \tau)$ quando comparada com $\kappa(\tau)$ na integral de (4.58), e substituir $\hat{b}(t - \tau)$ por $\hat{b}(t)$, que pode ser então removido da integral. Assumindo que $t - t_0 \gg \tau_c$, tem-se

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \kappa(\tau) d\tau &= \frac{1}{\hbar^2} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_i |g_i|^2 \int_0^\infty e^{i(\omega_0 - \omega_i + i\eta)\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_i |g_i|^2 \left[i\mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_0 - \omega_i} \right) + \pi\delta(\omega_0 - \omega_i) \right] \\ &= \frac{\Gamma}{2} + i\Delta, \end{aligned} \quad (4.61)$$

onde Γ e Δ são os parâmetros introduzidos em (4.44) e (4.45), e que descrevem, respectivamente, a taxa de emissão espontânea e o desvio radiativo espontâneo do oscilador. Assim, a equação (4.58) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dt} \hat{b}(t) = - \left(\frac{\Gamma}{2} + i\Delta \right) \hat{b}(t) + \hat{F}(t). \quad (4.62)$$

A fim de mostrar que esta equação pode ser considerada uma Equação de Langevin, Cohen *et al* estudam as propriedades do operador $\hat{F}(t)$.

No instante inicial t_0 , onde as representações de Schrödinger e Heisenberg coincidem, supõe-se que o operador densidade do sistema global possa ser fatorado na forma $\sigma_S \otimes \sigma_R$, onde σ_R pode ser construído a partir de uma mistura estatística dos estados $|n_1 n_2 \cdots n_i \cdots\rangle$ com pesos $p(n_1 n_2 \cdots n_i \cdots)$. Como $\hat{a}_i(t_0)$ não possui elementos diagonais no estado $|n_i\rangle$, segue que

$$\langle \hat{F}(t) \rangle = \text{Tr} \sigma_S \sigma_R F(t) = 0. \quad (4.63)$$

O valor médio da equação (4.62) é

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{b}(t) \rangle = - \left(\frac{\Gamma}{2} + i\Delta \right) \langle \hat{b}(t) \rangle. \quad (4.64)$$

Calcula-se então as funções de correlação de $\hat{F}(t)$ e $\hat{F}^+(t)$. Uma vez que apenas produtos tais como $a_i^\dagger(t_0)a_i(t_0)$ e $a_i(t_0)a_i^\dagger(t_0)$ possuem valores médios não nulos (respectivamente iguais a $\langle n_i \rangle$ e $\langle (n_i+1) \rangle$) no estado $\sigma_R = \sum_{\{n_i\}} p(n_1 \cdots n_i \cdots) |n_1 \cdots n_i \cdots\rangle \langle n_1 \cdots n_i \cdots|$, do reservatório, obtém-se

$$\langle \hat{F}(t') \hat{F}(t) \rangle = \langle \hat{F}^+(t') \hat{F}^+(t) \rangle = 0, \quad (4.65)$$

$$\langle \hat{F}^+(t') \hat{F}(t) \rangle = \sum_i \frac{1}{\hbar^2} |g_i|^2 \langle n_i \rangle e^{i(\omega_0 - \omega_i)(t-t')}, \quad (4.66)$$

$$\langle \hat{F}(t) \hat{F}^+(t') \rangle = \sum_i \frac{1}{\hbar^2} |g_i|^2 \langle (n_i + 1) \rangle e^{i(\omega_0 - \omega_i)\tau}. \quad (4.67)$$

As exponenciais oscilantes que aparecem em (4.66) e (4.67) interferem destrutivamente quando $|t - t'| \gg \tau_c$. Assim, as médias a dois instantes de (4.66) e (4.67) são funções fortemente centradas em $\tau = t - t'$. Cohen *et al* chamam de $2D_N$ e $2D_A$ as integrais ao longo de τ dessas duas funções entre menos e mais infinito:

$$2D_N = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \hat{F}^+(t - \tau) \hat{F}(t) \rangle d\tau \quad (4.68)$$

$$2D_A = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \hat{F}(t) \hat{F}^+(t - \tau) \rangle d\tau, \quad (4.69)$$

onde os subscritos N e A indicam, respectivamente, o ordenamento normal e antinormal do produto de \hat{F}^+ e \hat{F} . Para calcular essas integrais utiliza-se (4.66) e (4.67), bem como as definições de Γ e Γ' de (4.44) e (4.45),

$$2D_N = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \sum_i |g_i|^2 \langle n_i \rangle e^{i(\omega_0 - \omega_i + i\eta)\tau} = \Gamma', \quad (4.70)$$

$$2D_A = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \sum_i |g_i|^2 (\langle n_i \rangle + 1) e^{i(\omega_0 - \omega_i + i\eta)\tau} = \Gamma' + \Gamma. \quad (4.71)$$

Assim, pode-se reescrever (4.66) e (4.67) na forma

$$\langle \hat{F}^+(t) \hat{F}(t') \rangle = 2D_N g_N(t - t'), \quad (4.72)$$

$$\langle \hat{F}(t) \hat{F}^+(t') \rangle = 2D_A g_A(t - t'), \quad (4.73)$$

onde $g_N(\tau)$ e $g_A(\tau)$ são duas funções de τ normalizadas e de largura τ_c .

Finalmente, supondo que $\langle n_i \rangle$ depende unicamente de ω_i , os autores utilizam a relação $\Gamma' = \langle n(\omega_0) \rangle \Gamma$ (onde $\langle n(\omega_0) \rangle$ é o número médio de quanta dos modos do reservatório tendo a mesma frequência ω_0 de \mathcal{S}), para reescrever (4.70) e (4.71) na forma

$$2D_N = \Gamma \langle n(\omega_0) \rangle, \quad (4.74)$$

$$2D_A = \Gamma(1 + \langle n(\omega_0) \rangle). \quad (4.75)$$

Os operadores \hat{F} e \hat{F}^+ podem ser considerados forças de Langevin que flutuam muito rapidamente em torno do valor médio nulo. Entretanto, como os autores concluem, deve-se notar que estes operadores não comutam entre si, como pode ser visto pela diferença entre (4.74) e (4.75).

c) Conexão entre flutuações e dissipação

As equações (4.74) e (4.75) estabelecem uma relação quantitativa entre as flutuações de \hat{F} e \hat{F}^+ , caracterizadas por D_N e D_A , e o amortecimento Γ , característico da dissipação associada à dinâmica de b e b^\dagger . Se o reservatório está em equilíbrio termodinâmico, $\langle n(\omega_0) \rangle$ é igual a $[\exp \hbar\omega_0/k_B T - 1]^{-1}$, e a expressão (4.74), p.ex., torna-se

$$2D_N = \frac{\Gamma}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1}, \quad (4.76)$$

uma equação que pode ser considerada como uma expressão para o teorema flutuaçõ-

dissipação quântico. Em contraste com o que Cohen *et al* fizeram na sub-seção anterior, a relação (4.76) é derivada a partir das equações de movimento de Heisenberg, ao invés de partir de uma equação fenomenológica. Isto também é válido quaisquer que sejam os valores relativos de $\hbar\omega_0$ e $k_B T$. Em particular, se $\hbar\omega_0 \ll k_B T$ (limite clássico), (4.76) torna-se

$$2D_N = \frac{\Gamma k_B T}{\hbar\omega_0}, \quad (4.77)$$

a qual, a exemplo da relação de difusão de Einstein, estabelece uma relação entre D e $\Gamma k_B T$.

No próximo capítulo aplicaremos as idéias até aqui desenvolvidas ao nosso sistema de interesse: um oscilador interagindo com um banho térmico constituído por uma coleção de osciladores acoplados.

Capítulo 5

Equação Mestra e Reservatório como um Campo Escalar

O modelo FKM estudado apresentado no capítulo 1 deste trabalho apresenta-se como protótipo de um acoplamento linear entre um oscilador e um banho térmico constituído por uma coleção de osciladores acoplados, nos moldes do formalismo de Cohen *et al* [10], discutido no capítulo anterior. No entanto, ao invés de utilizarmos as equação de Heisenberg-Langevin, utilizaremos um campo escalar como modelo de banho térmico. Construiremos também a Equação Mestra e de evolução das populações para o potencial considerado. Primeiramente, porém, faremos algumas considerações importantes sobre a função de correlação térmica.

5.1 A Função de Correlação Térmica

A função de correlação de dois pontos térmica $g(\tau)$, dada por (4.23), é de máxima importância, pois é responsável por incorporar a informação a respeito do sistema R e, por conseguinte, da temperatura. Assim, utilizando-se da TFD apresentada no capítulo 3, podemos construir uma função de correlação dependente de temperatura $g(\tau, \beta)$. Reescrevendo $g(\tau)$ como

$$\begin{aligned} g(t', t'') &= \text{Tr} \{ \sigma_R R(t') R(t'') \} = \text{Tr} \left\{ \sigma_R e^{\frac{i}{\hbar} H_{RT}} R^S e^{-\frac{i}{\hbar} H_{RT}} R^S \right\} \\ &= \text{Tr} \{ \sigma_R R(\tau) R \}, \end{aligned} \tag{5.1}$$

onde $\tau = t' - t''$, e utilizando o operador densidade térmico definido a partir dos estados de vácuo térmico da TFD

$$\sigma_R = |0_{(\beta)}\rangle \langle 0_{(\beta)}|, \tag{5.2}$$

obtem-se a função de correlação dependente de temperatura

$$g(\tau, \beta) = \text{Tr} \{ |0_{(\beta)}\rangle \langle 0_{(\beta)} | R(\tau) R \} = \langle 0_{(\beta)} | R(\tau) R | 0_{(\beta)} \rangle. \quad (5.3)$$

Substituindo o vácuo térmico (3.8), obtém-se

$$g(\tau, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{n', n} e^{-\frac{1}{2}\beta(E_{n'} + E_n)} \langle \tilde{n}', n' | R(\tau) R | n, \tilde{n} \rangle, \quad (5.4)$$

onde o subíndice em Z_R indica que a função de partição refere-se somente ao subsistema R , e não ao total. Atuando na base dos autoestados do sistema R encontra-se

$$\langle \tilde{n}', n' | R(\tau) R | n, \tilde{n} \rangle = \langle n' | R(\tau) R | n \rangle \delta_{n'n} = \delta_{n'n} \sum_m \langle n' | R^s | m \rangle \langle m | R^s | n \rangle e^{i(\omega_{n'} - \omega_m)\tau},$$

de modo que a equação (5.4) para $g(\tau, \beta)$ torna-se

$$g(\tau, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{m, n} e^{-\beta E_n} \langle n | R^s | m \rangle \langle m | R^s | n \rangle e^{i(\omega_n - \omega_m)\tau}, \quad (5.5)$$

ou, numa notação contraída,

$$g(\tau, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{n, m} e^{-\beta E_n} e^{i\omega_{nm}\tau} |R_{nm}^s|^2. \quad (5.6)$$

Uma vez determinada a função de correlação térmica, pode-se facilmente encontrar a taxa de variação térmica $\Delta\sigma_S(t, \beta)/\Delta t$, substituindo $g(\tau, \beta)$ em (4.30).

Observa-se que a função $g(\tau, \beta)$ não é uma função real, pois

$$g^*(\tau, \beta) = g(-\tau, \beta);$$

pode-se, então, dividi-la nas respectivas partes real e imaginária; estas por sua vez, estão relacionadas com funções estatísticas do reservatório, que caracterizam como o sistema S é afetado por esse. A equação (5.1) pode ser convenientemente reescrita como

$$g(\tau) = \frac{1}{2} \text{Tr} \{ \sigma_R [R(\tau), R]_+ \} + \frac{1}{2} \text{Tr} \{ \sigma_R [R(\tau), R] \}, \quad (5.7)$$

onde o primeiro termo corresponde à função de correlação simétrica e o segundo à susceptibilidade linear do reservatório. Exploremos um pouco essas funções.

5.1.1 A Função de Correlação Simétrica

Seja $C_R(\tau)$ a parte simétrica de $g(\tau)$,

$$C_R(\tau) = \frac{1}{2} \text{Tr} \{ \sigma_R R(\tau) R + \sigma_R R R(\tau) \} = \frac{1}{2} (g(\tau) + g^*(\tau)). \quad (5.8)$$

Substituindo a equação (5.6) para $g(\tau, \beta)$,

$$C_R(\tau, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^s|^2 \cos(\omega_{nm}\tau), \quad (5.9)$$

e efetuando a transformação de Fourier

$$C_R(\omega, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int d\tau C_R(\tau, \beta) e^{-i\omega\tau}, \quad (5.10)$$

a correlação no espaço das frequências torna-se

$$C_R(\omega, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^s|^2 \int d\tau (e^{-i(\omega-\omega_{nm})\tau} + e^{-i(\omega+\omega_{nm})\tau}). \quad (5.11)$$

Reconhecendo a função delta

$$\delta(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int d\tau e^{-i\omega\tau}, \quad (5.12)$$

segue que

$$C_R(\omega, \beta) = Z_R^{-1} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^s|^2 [\delta(\omega - \omega_{nm}) + \delta(\omega + \omega_{nm})]. \quad (5.13)$$

Tanto $C_R(\tau, \beta)$ em (5.9) quanto sua transformada $C_R(\omega, \beta)$ acima são funções de autocorrelação, responsáveis por descrever a dinâmica das flutuações do observável R no estado σ_R . A susceptibilidade linear, apresentada a seguir, dita a dinâmica do reservatório R sob uma perturbação externa.

5.1.2 A Susceptibilidade Linear

Seja então uma perturbação da forma

$$V^S(t) = -\lambda(t) R^s, \quad (5.14)$$

onde $\lambda(t)$ é uma função clássica. Substituindo a equação (5.14) para $V^s(t)$ na equação (4.3) para a evolução dos operadores, temos

$$\frac{d}{dt} \sigma_R(t) = \frac{-\lambda(t)}{i\hbar} [R(t), \sigma_R(t)]. \quad (5.15)$$

Note-se que, neste caso, ao tratar somente da evolução do reservatório, os operadores ρ e σ_R coincidem. Integrando a equação anterior no intervalo $(-\infty, t']$, com as condições de contorno $V(t) \rightarrow 0$ e $\sigma_R(t) = \sigma_R$ para $t \rightarrow -\infty$, o que equivale a assumir que o sistema estava inicialmente isolado e em equilíbrio, obtém-se

$$\sigma_R(t') = \sigma_R - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \lambda(t'') [R(t''), \sigma_R(t'')]; \quad (5.16)$$

multiplicando por $R(t')$ e tomando o traço resulta

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \sigma_R(t') R(t') \} &= \text{Tr} \{ \sigma_R R(t') \} + \\ &- \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \lambda(t'') \text{Tr} \{ (R(t'') \sigma_R(t'') - \sigma_R(t'') R(t'')) R(t') \}. \end{aligned}$$

Reconhecendo que $\text{Tr} \{ \sigma_R(t') R(t') \} = \text{Tr} \{ \sigma_R^s(t') R \} = \langle R \rangle$, e que o valor médio de R^s no subsistema R , primeiro termo à direita, é nulo, segue que

$$\langle R \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \lambda(t'') \text{Tr} \{ \sigma_R^s(t'') [R(t''), R] \}. \quad (5.17)$$

Efetuada a substituição $t'' = t' - \tau$,

$$\langle R \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} d\tau \lambda(t' - \tau) \text{Tr} \{ \sigma_R^s(t' - \tau) [R(\tau), R] \}, \quad (5.18)$$

e recorrendo à função de Heaviside $\Theta(\tau)$

$$\Theta(\tau) = \begin{cases} 0, & \tau < 0 \\ 1 & \tau \geq 0 \end{cases} \quad (5.19)$$

pode-se reescrever $\langle R \rangle$ como

$$\langle R \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \lambda(t' - \tau) \chi_R(\tau), \quad (5.20)$$

onde

$$\chi_R(\tau) = \frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) \text{Tr} \{ \sigma_R^s(t' - \tau) [R(\tau), R] \}. \quad (5.21)$$

Lembrando que a evolução do operador densidade na representação de Schrödinger é, neste caso,

$$\sigma_R^s(t' - \tau) = e^{\frac{-i}{\hbar} H_R(t' - \tau)} \sigma_R^s e^{\frac{i}{\hbar} H_R(t' - \tau)} = \sigma_R,$$

onde foi utilizado o fato do operador H_R comutar com σ_R . Substituindo em $\chi_R(\tau)$ encontra-se, como esperado, o segundo termo da equação (5.7) para $g(\tau)$,

$$\text{Tr} [\sigma_R [R(\tau), R]] = g(\tau) - g^*(\tau) = 2i Z_R^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^s|^2 \text{sen}(\omega_{nm}\tau), \quad (5.22)$$

resultando

$$\chi_R(\tau, \beta) = -\frac{2}{\hbar} \Theta(\tau) \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^s|^2 \text{sen}(\omega_{nm}\tau) \quad (5.23)$$

e

$$\langle R \rangle = -\frac{2}{\hbar} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^s|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(\tau) d\tau \lambda(t - \tau) \text{sen}(\omega_{nm}\tau). \quad (5.24)$$

A transformada de Fourier de (5.23), definida como em (5.10) é dada por

$$\chi_R(\omega) = \chi_R'(\omega) + i\chi_R''(\omega), \quad (5.25)$$

sendo

$$\chi_R'(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^s|^2 \left\{ \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_{mn} + \omega} \right) + \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_{mn} - \omega} \right) \right\} \quad (5.26)$$

$$\chi_R''(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^s|^2 [\delta(\omega_{mn} + \omega) - \delta(\omega_{mn} - \omega)]. \quad (5.27)$$

5.2 Equação Mestra para uma Coleção de Osciladores

O potencial do modelo FKM pode ser escrito, na representação de Schrödinger, na forma

$$V^s = \sum_j (b^{*s} + b^s) A_{0j} (a_j^{*s} + a_j^s), \quad (5.28)$$

onde fizemos a separação dos operadores associados à partícula browniana, a_0^* e a_0 , e os renomeamos como b^* e b , respectivamente. Aos operadores do banho podemos associar um campo escalar, como um campo de Schrödinger. Podemos também escrever uma Equação Mestra a partir dessa interação e, desta forma, calcular evoluções temporais e

propagadores térmicos, tais como $g(\tau)$, equação (4.23) que, como vimos, está relacionado às correlações e susceptibilidades do reservatório.

Partimos então de um potencial, na representação de interação, que sem a aproximação de onda girante pode ser escrito na forma

$$V(t) = - (b^*(t)R^*(t) + b^*(t)R(t) + b(t)R^*(t) + b(t)R(t)) , \quad (5.29)$$

com as definições $R(t) = -\sum_j A_{0j}a_j$ e seu conjugado, semelhantes às (4.36). Lembramos que a matriz de interação A é hermitiana e independente do tempo e que os operadores na representação de interação têm a dependência temporal do tipo $b(t) = be^{-i\omega_0 t}$.

Na taxa de variação coarse-grained $\Delta\sigma_S(t)$, equação (4.27), surge o duplo comutador envolvendo os potenciais em dois instantes distintos. Passemos a este cálculo. Abrindo um dos comutadores temos

$$\left[V(t'), [V(t''), \sigma_S(t) \otimes \sigma_R] \right] = [V(t'), V(t'') \sigma_S(t) \otimes \sigma_R] - [V(t'), \sigma_S(t) \otimes \sigma_R V(t'')] .$$

Para o primeiro comutador teremos dezesseis termos, mais os conjugados hermitianos, do tipo

$$\begin{aligned} [V(t'), V(t'') \sigma_S(t) \otimes \sigma_R] &= b^*(t')b^*(t'')[R^*(t'), R(t'')] \sigma_S(t) \otimes \sigma_R + \\ &+ b^*(t'')R(t'')[b^*(t')R^*(t'), \sigma_S(t) \otimes \sigma_R] + \\ &+ [b^*(t'), b(t'')]R^*(t')R^*(t'') \sigma_S(t) \otimes \sigma_R + \dots ; \end{aligned}$$

analogamente para o segundo comutador. Abrindo esses comutadores, aplicando o traço parcial nas variáveis do reservatório e colecionando os termos chegamos na seguinte expressão para o traço do duplo comutador

$$\begin{aligned} Tr_R \left[V(t'), [V(t''), \sigma_S(t) \otimes \sigma_R] \right] &= (b^*(t'')b^*(t') \sigma_S(t) - b^*(t'') \sigma_S(t) b^*(t') + \\ &+ b^*(t')b(t'') \sigma_S(t) - b(t'') \sigma_S(t) b^*(t') + \\ &+ \sigma_S(t) b^*(t') b^*(t'') - \sigma_S(t) b^*(t'') b^*(t')) \times \\ &\times (Tr_R \{ \sigma_R R(t') R^*(t'') \} + Tr_R \{ \sigma_R R^*(t') R(t'') \}) + \\ &+ (-b^*(t') \sigma_S(t) b^*(t'') + \sigma_S(t) b^*(t'') b^*(t') + \\ &- b^*(t') \sigma_S(t) b(t'') + \sigma_S(t) b(t'') b^*(t')) \times \\ &\times (Tr_R \{ \sigma_R R(t'') R^*(t') \} + Tr_R \{ \sigma_R R^*(t'') R(t') \}) \\ &+ c.h. , \end{aligned}$$

onde já descartamos os termos cujo traço será nulo.

Como visto, o traço está relacionado com o valor esperado no vácuo térmico, assegurando que o vácuo do sistema seja separável

$$|0_{(\beta)}\rangle = |0_{(\beta)}\rangle_1 \otimes |0_{(\beta)}\rangle_2 \otimes \cdots,$$

segue também a separabilidade da função $g(\tau, \beta)$. Das equações (5.1) e (5.3) para $g(\tau)$, pode-se então escrever

$$\begin{aligned} Tr [\sigma_R R(t') R(t'')] &= \langle 0_{(\beta)} | R(t') R(t'') | 0_{(\beta)} \rangle \\ &= \langle 0_{(\beta)} | R(t') R(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_1 \otimes \langle 0_{(\beta)} | R(t') R(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_2 \otimes \cdots. \end{aligned}$$

Assim, o primeiro traço resulta

$$\begin{aligned} Tr [\sigma_R R(t') R^*(t'')] &= \langle 0_{(\beta)} | R(t') R^*(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_1 \otimes \langle 0_{(\beta)} | R(t') R^*(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_2 \otimes \cdots \\ &= \langle 0_{(\beta)} | A_{01} a_1(t') A_{01} a_1^*(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_1 \otimes \mathbb{I} \otimes \cdots \\ &\quad + \mathbb{I} \otimes \langle 0_{(\beta)} | A_{02} a_2(t') A_{02} a_2^*(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_2 \otimes \mathbb{I} \otimes \cdots \\ &= \sum_j A_{0j}^2 e^{-i\omega_j(t'-t'')} \langle 0_{(\beta)} | a_j a_j^* | 0_{(\beta)} \rangle_j. \end{aligned}$$

Reconhecendo o operador número e substituindo o resultado (3.21) para o número médio de partículas, neste caso excitações do estado $|0_{(\beta)}\rangle$,

$$\langle 0_{(\beta)} | a_1 a_1^* | 0_{(\beta)} \rangle_1 = 1 + \langle 0_{(\beta)} | a_1^* a_1 | 0_{(\beta)} \rangle_1 = 1 + (e^{\beta\hbar\omega_1} - 1)^{-1},$$

obtém-se então, para este e demais traços

$$Tr [\sigma_R R(t') R^*(t'')] = \sum_j A_{0j}^2 e^{-i\omega_j(t'-t'')} \left[1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1} \right],$$

$$Tr [\sigma_R R^*(t') R(t'')] = \sum_j A_{0j}^2 e^{i\omega_j(t'-t'')} (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1},$$

$$Tr [\sigma_R R^*(t'') R(t')] = \sum_j A_{0j}^2 e^{-i\omega_j(t'-t'')} (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1},$$

$$Tr [\sigma_R R(t'') R^*(t')] = \sum_j A_{0j}^2 e^{i\omega_j(t'-t'')} \left[1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1} \right].$$

Substituindo em $\Delta\sigma_S(t)$, segue que

$$\begin{aligned}
\Delta\sigma_S(t) = & -\frac{1}{\hbar^2} \sum_j A_{0j}^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \times \\
& \times \{ e^{i\omega_0(t'+t'')} e^{i\omega_j(t'-t'')} [(b^* b^* \sigma_S(t) - b^* \sigma_S(t) b^*) (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1} + \\
& + (\sigma_S(t) b^* b^* - b^* \sigma_S(t) b^*) (1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1})] + \\
& + e^{i\omega_0(t'+t'')} e^{-i\omega_j(t'-t'')} [(b^* b^* \sigma_S(t) - b^* \sigma_S(t) b^*) (1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1})] + \\
& + (\sigma_S(t) b^* b^* - b^* \sigma_S(t) b^*) (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}] + \\
& + e^{i\omega_0(t'-t'')} e^{i\omega_j(t'-t'')} [(b^* b \sigma_S(t) - b \sigma_S(t) b^*) (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1} + \\
& + (\sigma_S(t) b b^* - b^* \sigma_S(t) b) (1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1})] + \\
& + e^{i\omega_0(t'-t'')} e^{-i\omega_j(t'-t'')} [(b^* b \sigma_S(t) - b \sigma_S(t) b^*) (1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}) + \\
& + (\sigma_S(t) b b^* - b^* \sigma_S(t) b) (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}] + \\
& + e^{-i\omega_0(t'+t'')} e^{-i\omega_j(t'-t'')} [(\sigma_S(t) b b - b \sigma_S(t) b) (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1} + \\
& + (b b \sigma_S(t) - b \sigma_S(t) b) (1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1})] + \\
& + e^{-i\omega_0(t'+t'')} e^{i\omega_j(t'-t'')} [(\sigma_S(t) b b - b \sigma_S(t) b) (1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}) + \\
& + (b b \sigma_S(t) - b \sigma_S(t) b) (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}] + \\
& + e^{-i\omega_0(t'-t'')} e^{-i\omega_j(t'-t'')} [(\sigma_S(t) b^* b - b \sigma_S(t) b^*) (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1} + \\
& + (b b^* \sigma_S(t) - b^* \sigma_S(t) b) (1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1})] + \\
& + e^{-i\omega_0(t'-t'')} e^{i\omega_j(t'-t'')} [(\sigma_S(t) b^* b - b \sigma_S(t) b^*) (1 + (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}) + \\
& + (b b^* \sigma_S(t) - b^* \sigma_S(t) b) (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}] \}.
\end{aligned}$$

Efetuando as integrais no tempo

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{i\omega_0(t'+t'')} e^{\pm i\omega_j(t'-t'')} = e^{2i\omega_0 t} \left(\frac{e^{i(\omega_0 \pm \omega_j)\Delta t} - 1}{\omega_0^2 - \omega_j^2} - \frac{e^{2i\omega_0 \Delta t} - 1}{2\omega_0(\omega_0 \mp \omega_j)} \right),$$

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{-i\omega_0(t'+t'')} e^{\mp i\omega_j(t'-t'')} = e^{-2i\omega_0 t} \left(\frac{e^{-i(\omega_0 \pm \omega_j)\Delta t} - 1}{\omega_0^2 - \omega_j^2} - \frac{e^{-2i\omega_0 \Delta t} - 1}{2\omega_0(\omega_0 \mp \omega_j)} \right),$$

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{i\omega_0(t'-t'')} e^{\mp i\omega_j(t'-t'')} = \frac{e^{i(\omega_0 \mp \omega_j)\Delta t} - 1}{-(\omega_0 \mp \omega_j)^2} - \frac{\Delta t}{i(\omega_0 \mp \omega_j)},$$

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{-i\omega_0(t'-t'')} e^{\mp i\omega_j(t'-t'')} = \frac{e^{-i(\omega_0 \pm \omega_j)\Delta t} - 1}{-(\omega_0 \pm \omega_j)^2} + \frac{\Delta t}{i(\omega_0 \pm \omega_j)},$$

a Equação Mestra para a população finalmente torna-se

$$\Delta\sigma_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_j A_{0j}^2 \frac{(e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}}{(\omega_0 - \omega_j)^2} [(\Gamma_1 + \Gamma_1^*) + (\Gamma_2 + \Gamma_2^*) + \Gamma'], \quad (5.30)$$

com

$$\Gamma_1 = (1 - i\omega_{0j}\Delta t - e^{-i\omega_{0j}\Delta t}) \times \\ \times [(bb^*\sigma_S(t) - b^*\sigma_S(t)b) + (\sigma_S(t)b^*b - b\sigma_S(t)b^*)e^{\beta\hbar\omega_j}], \quad (5.31)$$

$$\Gamma_2 = \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}} \left(1 - i\Delta t\omega'_{0j} - e^{-i\omega'_{0j}\Delta t}\right) \times \\ \times [(\sigma_S(t)b^*b - b\sigma_S(t)b^*) + (bb^*\sigma_S(t) - b^*\sigma_S(t)b)e^{\beta\hbar\omega_j}], \quad (5.32)$$

as definições $\omega_{0j} = \omega_0 - \omega_j$, $\omega'_{0j} = \omega_0 + \omega_j$ e $\Gamma' = \Gamma_3 + \Gamma_3^* + \Gamma_4 + \Gamma_4^*$, onde

$$\Gamma_3 = -\frac{\omega_{0j}}{\omega'_{0j}} e^{-2i\omega_0 t} \left(1 + \frac{(e^{-2i\omega_0\Delta t} - 1)\omega'_{0j}}{2\omega_0} - e^{-i\omega'_{0j}\Delta t}\right) \times \\ \times [(bb\sigma_S(t) - b\sigma_S(t)b) + (\sigma_S(t)bb - b\sigma_S(t)b)e^{\beta\hbar\omega_j}],$$

$$\Gamma_4 = -\frac{\omega_{0j}}{\omega'_{0j}} e^{-2i\omega_0 t} \left(1 + \frac{(e^{-2i\omega_0\Delta t} - 1)\omega_{0j}}{2\omega_0} - e^{-i\omega_{0j}\Delta t}\right) \times \\ \times [(\sigma_S(t)bb - b\sigma_S(t)b) + (bb\sigma_S(t) - b\sigma_S(t)b)e^{\beta\hbar\omega_j}].$$

5.3 Evolução das Populações

Afim de calcularmos a evolução das populações tomamos o valor esperado da expressão (5.30) nos autoestados $|n\rangle$ do sistema S ,

$$\Delta\sigma_{S_{n,n}}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_j A_{0j}^2 \frac{(e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}}{\omega_{0j}^2} \left[(\Gamma_{1_{n,n}} + \Gamma_{1_{n,n}}^*) + (\Gamma_{2_{n,n}} + \Gamma_{2_{n,n}}^*) + \Gamma'_{n,n} \right], \quad (5.33)$$

onde

$$\Gamma_{1_{n,n}} = (1 - i\omega_{0j}\Delta t - e^{-i\omega_{0j}\Delta t}) \times \\ \times [\langle n | bb^*\sigma_S(t) - b^*\sigma_S(t)b | n \rangle + e^{\beta\hbar\omega_j} \langle n | \sigma_S(t)b^*b - b\sigma_S(t)b^* | n \rangle], \quad (5.34)$$

idem para os demais. Sabendo-se que os termos de Γ' anulam-se quando atuam nos estados, obtemos

$$\Gamma_{1_{n,n}} = (1 - i\omega_{0j}\Delta t - e^{-i\omega_{0j}\Delta t}) \times \\ \times [(n+1)\sigma_{S_{n,n}}(t) - n\sigma_{S_{n-1,n-1}}(t) + e^{\beta\hbar\omega_j} (n\sigma_{S_{n,n}}(t) - (n+1)\sigma_{S_{n+1,n+1}}(t))],$$

e

$$\begin{aligned} \Gamma_{2n,n} &= \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}} \left(1 - i\Delta t \omega'_{0j} - e^{-i\omega'_{0j}\Delta t} \right) \times \\ &\times \left[n\sigma_{S_{n,n}}(t) - (n+1)\sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) + e^{\beta\hbar\omega_j} \left((n+1)\sigma_{S_{n,n}}(t) - n\sigma_{S_{n-1,n-1}}(t) \right) \right]. \end{aligned}$$

Observando que $\langle n | \Gamma^* | n \rangle = \langle n | \Gamma | n \rangle^*$ e somando os gamas temos

$$\begin{aligned} \Gamma_{1,n,n} + \Gamma_{1,n,n}^* &= 2 \left[1 - \cos(\omega_{0j}\Delta t) \right] \times \\ &\left[(n+1)\sigma_{S_{n,n}}(t) - n\sigma_{S_{n-1,n-1}}(t) + e^{\beta\hbar\omega_j} \left(n\sigma_{S_{n,n}}(t) - (n+1)\sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) \right) \right], \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \Gamma_{2n,n} + \Gamma_{2n,n}^* &= 2 \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}} \left[1 - \cos(\omega_{0j}\Delta t) \right] \times \\ &\left[n\sigma_{S_{n,n}}(t) - (n+1)\sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) + e^{\beta\hbar\omega_j} \left((n+1)\sigma_{S_{n,n}}(t) - n\sigma_{S_{n-1,n-1}}(t) \right) \right], \end{aligned}$$

de tal modo que, na aproximação de *coarse-grained*, a evolução da população do estado $|n\rangle$ é

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma_{S_{n,n}}(t)}{\Delta t} &= -\frac{2}{\hbar^2} \sum_j A_{0j}^2 \frac{(e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}}{\omega_{0j}^2 \Delta t} \left[1 - \cos(\omega_{0j}\Delta t) \right] \times \\ &\times \left\{ (n+1)\sigma_{S_{n,n}}(t) - n\sigma_{S_{n-1,n-1}}(t) + \right. \\ &+ e^{\beta\hbar\omega_j} \left(n\sigma_{S_{n,n}}(t) - (n+1)\sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) \right) + \\ &+ \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}} \left[n\sigma_{S_{n,n}}(t) - (n+1)\sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) + \right. \\ &\left. \left. + e^{\beta\hbar\omega_j} \left((n+1)\sigma_{S_{n,n}}(t) - n\sigma_{S_{n-1,n-1}}(t) \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.35)$$

a qual pode ser convenientemente reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma_{S_{n,n}}(t)}{\Delta t} &= \frac{2}{\hbar^2} \sum_j \frac{A_{0j}^2}{\omega_{0j}^2} \left[\frac{1 - \cos(\omega_{0j}\Delta t)}{\Delta t} \right] \left\{ - \left(1 + \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}} \right) \sigma_{S_{n,n}}(t) + \right. \\ &+ \left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_j} - 1} + \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}} \frac{e^{\beta\hbar\omega_j}}{e^{\beta\hbar\omega_j} - 1} \right) n \left(\sigma_{S_{n,n}}(t) - \sigma_{S_{n-1,n-1}}(t) \right) + \\ &\left. + \left(\frac{e^{\beta\hbar\omega_j}}{e^{\beta\hbar\omega_j} - 1} + \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_j} - 1} \right) (n+1) \left(\sigma_{S_{n,n}}(t) - \sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) \right) \right\}. \end{aligned}$$

Definindo

$$C \equiv \frac{2}{\hbar^2} \sum_j \frac{A_{0j}^2}{\omega_{0j}^2} \left[\frac{1 - \cos(\omega_{0j}\Delta t)}{\Delta t} \right], \quad T \equiv C (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1}, \quad (5.36)$$

a expressão para a evolução torna-se

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma_{S_{n,n}}(t)}{\Delta t} = & - \left(n + \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}{}^2} (n+1) \right) C \sigma_{S_{n,n}}(t) + (n+1) C \sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) + \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}{}^2} n C \sigma_{S_{n-1,n-1}} \\ & + \left(1 + \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}{}^2} \right) (n+1) T (\sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) - \sigma_{S_{n,n}}(t)) + \\ & + \left(1 + \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}{}^2} \right) n T (\sigma_{S_{n-1,n-1}}(t) - \sigma_{S_{n,n}}(t)). \end{aligned} \quad (5.37)$$

Podemos agora interpretar fisicamente os termos desta expressão, resgatando a discussão seguinte à equação (4.51). O termo C está associado ao processo de emissão espontânea e T aos processos de absorção e emissão estimulada. Mais precisamente, nC é a taxa de emissão espontânea entre os estados $|n\rangle$ e $|n-1\rangle$; assim, o estado $|n\rangle$ decai a uma taxa nC enquanto o estado $|n+1\rangle$ é populado a uma taxa $(n+1)C$. Similarmente, ocorrem os processos de absorção e emissão estimulada com taxas nT e $(n+1)T$. Destacamos ainda que o resultado de considerarmos todos os termos do potencial (5.29), indo além da aproximação de onda girante discutida na seção 2.2.3, torna-se claro nesta equação: uma correção quadrática, expressa por $\omega_{0j}^2/\omega'_{0j}{}^2$, nas taxas de transição entre os níveis. Observamos que esse termo é regular e tende a zero próximo à frequência de ressonância. Como podemos ver em (5.37), o estado $|n\rangle$ decai a uma taxa $\frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}{}^2}(n+1)C$ enquanto o estado $|n-1\rangle$ é populado a uma taxa $\frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}{}^2}nC$.

Observando os limites termodinâmicos temos que, no limite de baixas temperaturas,

$$\beta\hbar\omega_j \gg 1, \quad T \rightarrow 0, \quad (5.38)$$

levando à expressão para (5.37)

$$\frac{\Delta\sigma_{S_{n,n}}(t)}{\Delta t} = - \left(n + \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}{}^2} (n+1) \right) C \sigma_{S_{n,n}}(t) + (n+1) C \sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) + \frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}{}^2} n C \sigma_{S_{n-1,n-1}}. \quad (5.39)$$

Como esperado, a baixas temperaturas, as transições estimuladas são suprimidas e as flutuações são responsáveis por preencher o sistema microscópico com taxa C a partir dos estados de maior energia e com uma pequena taxa $\frac{\omega_{0j}^2}{\omega'_{0j}{}^2}nC$ a partir dos estados de menor

energia. Este termo surge apenas se considerarmos o potencial na forma geral (5.29). No limite de altas temperaturas

$$\beta\hbar\omega_j \ll 1, \quad T \rightarrow \infty. \quad (5.40)$$

Este resultado é consistente com o sistema bosônico tratado, pois neste não existe nenhuma restrição que limite a ocupação dos níveis de energia. Assim, fornecendo-se energia suficiente, o sistema termalizará em estados para os quais modos de energia cada vez mais alta estarão disponíveis, com igual probabilidade de serem ocupados por um número correspondentemente grande de excitações bosônicas, resultando em uma taxa de transição divergente; para contornar esse problema deve-se impor alguma restrição ao sistema (introduzindo um multiplicador de Lagrange) que limite as trocas de energia entre o sistema microscópico e o reservatório.

No limite $\omega_{0j}\Delta t \rightarrow 0$, discutido no Apêndice C, podemos fazer a aproximação

$$\frac{1 - \cos(\omega_{0j}\Delta t)}{\omega_{0j}^2\Delta t} = \pi\delta(\omega_{0j}), \quad (5.41)$$

eliminando a dependência temporal em Δt ,

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma_{S_{n,n}}(t)}{\Delta t} &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_j A_{0j}^2 (e^{\beta\hbar\omega_j} - 1)^{-1} \times \\ &\times \{ -(n+1)\sigma_{S_{n,n}}(t) + n\sigma_{S_{n-1,n-1}}(t) + \\ &- e^{\beta\hbar\omega_j} (n\sigma_{S_{n,n}}(t) - (n+1)\sigma_{S_{n+1,n+1}}(t)) \} + \\ &- \frac{\omega_{0j}^2}{\omega_j^2} [n\sigma_{S_{n,n}}(t) - (n+1)\sigma_{S_{n+1,n+1}}(t) + \\ &- e^{\beta\hbar\omega_j} ((n+1)\sigma_{S_{n,n}}(t) - n\sigma_{S_{n-1,n-1}}(t))] \}, \quad (5.42) \end{aligned}$$

Por fim, vale ressaltar que tanto esta equação como a (5.37) podem ser utilizadas para descrever um oscilador fermiônico em um banho térmico de osciladores bosônicos se restringirmos os autoestados do oscilador aos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$. A seguir veremos como tratar o reservatório considerando-o um campo escalar.

5.4 Reservatório como um Campo Escalar

O modelo FKM proporcionou um exemplo de interação linear entre a partícula (oscilador) e o banho térmico (coleção de osciladores acoplados) que pudemos explorar construindo a Equação Mestra e calculando as funções de correlação térmicas. Seguindo a idéia do formalismo DDC (ver Cohen *et al*, cap.4 [10]), iremos agora aplicá-la a uma interação

do tipo FKM, mas de uma maneira inversa: consideraremos o reservatório térmico como um campo escalar. Para tal realização identificaremos os operadores de levantamento e abaixamento a_j^\dagger e a_j relativos ao banho e associaremos a esses um campo escalar Ψ , que pode ser interpretado como um campo de excitações bosônicas, devido à presença dos demais osciladores que constituem o reservatório.

Seja então um campo escalar, real e homogêneo, dependente do tempo, em uma dimensão,

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j \left(a_j e^{-i\omega_j t} + a_j^\dagger e^{i\omega_j t} \right), \quad (5.43)$$

onde L é uma dimensão de comprimento (posteriormente passaremos ao contínuo).

Construindo o dubleto térmico

$$\Psi_k(t) \equiv \begin{pmatrix} \psi_k(t) \\ \tilde{\psi}_k(t) \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

e o seu transposto

$$\bar{\Psi}_k(t) \equiv \left(\psi_k(t), -\tilde{\psi}_k(t) \right), \quad (5.45)$$

podemos separar suas componentes positivas e negativas

$$\psi_k(t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j \left(a_j e^{-i\omega_j t} + a_j^\dagger e^{i\omega_j t} \right) = \psi_k^{(+)}(t) + \psi_k^{(-)}(t) \quad (5.46)$$

$$\tilde{\psi}_k(t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j \left(\tilde{a}_j e^{-i\omega_j t} + \tilde{a}_j^\dagger e^{i\omega_j t} \right) = \tilde{\psi}_k^{(+)}(t) + \tilde{\psi}_k^{(-)}(t). \quad (5.47)$$

Por construção os dois campos, $\psi_k(t)$ e $\tilde{\psi}_k(t)$, são *independentes* e seus operadores satisfazem a álgebra usual

$$[a_j, a_{j'}^\dagger] = [\tilde{a}_j, \tilde{a}_{j'}^\dagger] = \delta_{j,j'}.$$

Com o objetivo de encontrar os propagadores térmicos calculamos o comutador

$$\left[\Psi_k^\mu(t'), \bar{\Psi}_l^\nu(t'') \right] = \Delta_{kl}^{\mu\nu}, \quad (5.48)$$

onde $\mu, \nu = 1, 2$ e os índices k e l referentes ao espaço serão omitidos por trabalharmos em uma única dimensão. A componente $\mu = \nu = 1$ pode ser escrita como

$$\Delta^{11} = \Delta^{11(+)} + \Delta^{11(-)}, \quad (5.49)$$

sendo

$$\Delta^{11(+)}(t' - t'') = [\psi^{(+)}(t'), \psi^{(-)}(t'')] \quad (5.50)$$

$$\Delta^{11(-)}(t' - t'') = [\psi^{(-)}(t'), \psi^{(+)}(t'')] . \quad (5.51)$$

Para estes comutadores obtemos

$$\Delta^{11(+)}(t' - t'') = \frac{1}{L} \sum_j e^{-i\omega_j \tau} \quad (5.52)$$

$$\Delta^{11(-)}(t' - t'') = -\frac{1}{L} \sum_j e^{i\omega_j \tau} , \quad (5.53)$$

com $\tau = t' - t''$. Definindo os funcionais

$$\begin{aligned} \Delta_{(ret)}^{11}(\tau) &= \Delta^{11(+)}(\tau) \theta(\tau) + \Delta^{11(-)}(\tau) \theta(\tau) \\ &= \Delta_{(ret)}^{11(+)}(\tau) + \Delta_{(ret)}^{11(-)}(\tau) , \end{aligned} \quad (5.54)$$

e

$$\Delta_{(I)}^{11}(\tau) = \Delta^{11(+)}(\tau) - \Delta^{11(-)}(\tau) \theta(\tau) , \quad (5.55)$$

utilizamos a identidade

$$\theta(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\lambda\tau} d\lambda}{\lambda - i\varepsilon} , \quad \varepsilon \rightarrow 0 , \quad (5.56)$$

para calcular a transformada de Fourier dos mesmos. Assim

$$\Delta_{(ret)}^{11(+)}(\tau) = \frac{1}{2\pi i L} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_j \frac{e^{-i\omega_j \tau} e^{i\lambda\tau}}{\lambda - i\varepsilon} d\lambda = \frac{1}{2\pi L} \int d\omega \sum_j e^{-i\omega\tau} \left(\frac{i}{\omega - \omega_j + i\varepsilon} \right) , \quad (5.57)$$

de onde reconhecemos que

$$\Delta_{(ret)}^{11(+)}(\omega) = \frac{1}{L} \sum_j \frac{i}{\omega - \omega_j + i\varepsilon} . \quad (5.58)$$

E, da mesma forma,

$$\Delta_{(ret)}^{11(-)}(\omega) = -\frac{1}{L} \sum_j \frac{i}{\omega + \omega_j + i\varepsilon} . \quad (5.59)$$

Juntando estas expressões obtemos

$$\Delta_{(ret)}^{11}(\omega) = \frac{1}{L} \sum_j \left(\frac{i}{\omega - \omega_j + i\varepsilon} - \frac{i}{\omega + \omega_j + i\varepsilon} \right) . \quad (5.60)$$

Para (5.55) a transformada de Fourier é escrita como

$$\Delta_{(I)}^{11}(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int \Delta_{(I)}^{11}(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega;$$

portanto

$$\Delta_{(I)}^{11}(\omega) = \int \Delta_{(I)}^{11}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau. \quad (5.61)$$

Sendo $\delta(t \mp t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(t \mp t')\omega} d\omega$, temos

$$\Delta_{(I)}^{11}(\omega) = \frac{2\pi}{L} \sum_j [\delta(\omega + \omega_j) + \delta(\omega - \omega_j)]. \quad (5.62)$$

Para a componente $\mu = \nu = 2$ temos que $\Delta^{22} = \Delta^{22(+)} + \Delta^{22(-)}$, onde

$$\Delta^{22(+)}(t' - t'') = [\tilde{\psi}^{(+)}(t'), -\tilde{\psi}^{(-)}(t'')] = -\frac{1}{L} \sum_j e^{-i\omega_j\tau} \quad (5.63)$$

$$\Delta^{22(-)}(t' - t'') = [\tilde{\psi}^{(-)}(t'), -\tilde{\psi}^{(+)}(t'')] = \frac{1}{L} \sum_j e^{i\omega_j\tau}, \quad (5.64)$$

e também

$$\begin{aligned} \Delta_{(ret)}^{22}(\tau) &= \Delta^{22(+)}(\tau) \theta(\tau) + \Delta^{22(-)}(\tau) \theta(\tau) \\ &= \Delta_{(ret)}^{22(+)}(\tau) + \Delta_{(ret)}^{22(-)}(\tau), \end{aligned} \quad (5.65)$$

e

$$\Delta_{(I)}^{22}(\tau) = \Delta^{22(+)}(\tau) - \Delta^{22(-)}(\tau) \theta(\tau). \quad (5.66)$$

Assim obtemos

$$\Delta_{(ret)}^{22}(\omega) = -\frac{1}{L} \sum_j \left(\frac{i}{\omega - \omega_j + i\varepsilon} - \frac{i}{\omega + \omega_j + i\varepsilon} \right) = -\Delta_{(ret)}^{11}(\omega), \quad (5.67)$$

e

$$\Delta_{(I)}^{22}(\omega) = -\frac{2\pi}{L} \sum_j [\delta(\omega + \omega_j) + \delta(\omega - \omega_j)]. \quad (5.68)$$

Aqui, é importante salientar que o campo $\tilde{\psi}$ em (5.47) foi expandido nos modos de frequência positiva e negativa e não obtido por conjugação tilde a partir de ψ ; caso contrário, deveríamos fazer a substituição $\tilde{a}_j \Leftrightarrow \tilde{a}_j^\dagger$ nessa equação e redefinir $\Delta^{22(+)}(\tau)$ como $\Delta^{22(-)}(-\tau)$ e $\Delta^{22(-)}(\tau)$ como $\Delta^{22(+)}(-\tau)$ em (5.63) e (5.64), respectivamente.

O propagador térmico a temperatura zero relaciona-se àquele calculado no vácuo

térmico através da transformação de Bogoliubov

$$\Delta_{(ret)}^{\mu\nu\beta}(\omega) = \{B_j^{-1}(\beta)\Delta_{(ret)}(\omega)B_j(\beta)\}^{\mu\nu}, \quad (5.69)$$

$$\Delta_{(I)}^{\mu\nu\beta}(\omega) = \{B_j^{-1}(\beta)\Delta_{(I)}(\omega)B_j(\beta)\}^{\mu\nu}, \quad (5.70)$$

onde a forma mais geral da matriz de transformação $B_j(\beta)$ é [8]

$$B_j(\beta) = (1 + n_j)^{1/2} e^{s_j\tau_3} \begin{bmatrix} 1 & -f_j^\alpha \\ -f_j^{1-\alpha} & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.71)$$

Em nosso caso $\alpha = 1/2$, $f_j = \exp\{-\hbar\omega_j\beta\}$, $s_j = 0$ e $n_j = (f_j^{-1} - 1)^{-1}$. Assim a componente $\mu = \nu = 1$ de (5.69) fica

$$\Delta_{(ret)}^{11\beta}(\omega) = \frac{i}{L} \sum_j (1 + 2n_j) \left\{ \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \omega_j} \right) - \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega + \omega_j} \right) - i\pi [\delta(\omega - \omega_j) - \delta(\omega + \omega_j)] \right\}, \quad (5.72)$$

e para (5.70),

$$\Delta_{(I)}^{11\beta}(\omega) = \frac{2\pi}{L} \sum_j (1 + 2n_j) [\delta(\omega + \omega_j) + \delta(\omega - \omega_j)]. \quad (5.73)$$

Reconhecemos, a partir de (5.3), (5.7), (5.8) e (5.22), as funções de correlação e susceptibilidade térmicas, respectivamente, como

$$C^\beta(\omega) = \Delta_{(I)}^{11\beta}(\omega), \quad (5.74)$$

$$\chi^\beta(\omega) = \frac{i}{\hbar} \Delta_{(ret)}^{11\beta}(\omega) = \chi^{I\beta}(\omega) + i\chi^{II\beta}(\omega), \quad (5.75)$$

onde

$$\chi^{I\beta}(\omega) = -\frac{1}{\hbar L} \sum_j (1 + 2n_j) \left\{ \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \omega_j} \right) - \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega + \omega_j} \right) \right\} \quad (5.76)$$

$$\chi^{II\beta}(\omega) = \frac{\pi}{\hbar L} \sum_j (1 + 2n_j) [\delta(\omega - \omega_j) - \delta(\omega + \omega_j)], \quad (5.77)$$

que correspondem às funções anteriormente obtidas, (5.13), (5.26) e (5.27).

Procedendo como no formalismo DDC, passamos ao contínuo, substituindo a somatória sobre os modos por uma integral, obtemos

$$\begin{aligned} C^\beta(\omega) &= \int_0^{\omega_c} d\omega' \hbar\omega' (1 + 2n(\omega')) [\delta(\omega + \omega') + \delta(\omega - \omega')] \\ &= \hbar|\omega| (2n(|\omega|) + 1) \end{aligned} \quad (5.78)$$

$$\chi'^{\beta}(\omega) = - \int_0^{\omega_c} d\omega' \omega' (1 + 2n(\omega')) \left\{ \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \omega'} \right) - \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega + \omega'} \right) \right\} \quad (5.79)$$

$$\begin{aligned} \chi''^{\beta}(\omega) &= - \int_0^{\omega_c} d\omega' \omega' (1 + 2n(\omega')) [\delta(\omega + \omega') - \delta(\omega - \omega')] \\ &= \omega (2n(|\omega|) + 1) \end{aligned} \quad (5.80)$$

Devemos notar que $\chi'^{\beta}(\omega)$ em (5.79) é uma função par, de modo que os desvios (4.46) e (4.47), que podem ser escritos como [10]

$$\hbar\Delta_s^{fb} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \chi'_{S_s}(\omega) C_R(\omega) \quad (5.81)$$

e

$$\hbar\Delta_s^{rb} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \chi'_R(\omega) C_{S_s}(\omega), \quad (5.82)$$

não se anulam. Nessas expressões $C_{S_s}(\omega)$ e $\chi'_{S_s}(\omega)$ são, respectivamente, a função de correlação simétrica e a susceptibilidade linear do observável S do sistema \mathcal{S} no autoestado $|s\rangle$, dadas por expressões análogas às (5.13) e (5.25). A quantidade $C_R(\omega)d\omega/2\pi$ representa a densidade espectral para as flutuações do observável R do reservatório na faixa de frequências $d\omega$, enquanto $-\frac{1}{2}\chi'_R(\omega)C_{S_s}(\omega)d\omega$ é a energia de polarização do sistema \mathcal{S} no estado $|s\rangle$ perturbado por essas flutuações. Portanto, Δ_s^{fb} representa a energia de polarização de \mathcal{S} no estado $|s\rangle$ induzida pelas flutuações da variável R do banho térmico (fb = flutuação do banho) [10].

Em (5.82) os papéis de \mathcal{S} e \mathcal{R} estão invertidos: Δ_s^{rb} representa a energia de polarização do reservatório devida ao sistema \mathcal{S} . O movimento do observável \mathcal{S} no estado $|s\rangle$, caracterizado por C_{S_s} , perturba o equilíbrio do banho térmico, e a interação de \mathcal{S} com a polarização criada em \mathcal{R} , proporcional à χ'_R , dá origem ao desvio de energia $\hbar\Delta_s^{rb}$. Este desvio representa, portanto, o efeito de “reação do reservatório” sobre o sistema \mathcal{S} (rb = reação do banho).

Gostaríamos de destacar que a abordagem aqui realizada para o reservatório não é a única possível, nem a mais geral. Partindo da expressão para o campo escalar, equação (5.43), poderíamos invertê-la, escrevendo os operadores em função do campo,

$$a = \int \psi(t) e^{i\omega t} d\omega, \quad (5.83)$$

e assim recalculer os desvios (4.46) e (4.47). De todo modo, tais quantidades estão relacionadas aos desvios de energia da partícula browniana, os quais não são diretamente mensuráveis. As funções de correlação e susceptibilidades térmicas, (5.78)-(5.80), são úteis para analisarmos a estabilidade do sistema no equilíbrio termodinâmico, para uma

interação do tipo $V = -\lambda b\Psi + c.c.$, onde b e b^\dagger são operadores associados ao oscilador na presença do banho térmico, assim como feito em [45]. Este trabalho, além de evidenciar as relações entre o formalismo DDC e a TFD, mostra como esta teoria corrige a primeira, no que tange à estabilidade de um sistema atômico interagindo com um campo de radiação. O papel fundamental cabe à energia de ponto zero dos osciladores, que garante a validade do balanço detalhado de energia.

CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS

Os sistemas quânticos dissipativos constituem-se numa importante área de estudos da física atual. Em particular, o problema quântico de uma partícula acoplada a um banho térmico é fundamental em várias áreas da física: mecânica estatística, matéria condensada e óptica quântica, entre outras [40, 41, 42, 43]. A abordagem mais bem sucedida de tais sistemas é aquela na qual o sistema microscópico é um oscilador harmônico e o banho térmico constituído de uma coleção de osciladores acoplados.

Nesta tese realizamos uma revisão dos trabalhos de Ford e colaboradores [11, 21, 28], estudando criticamente as deduções da Equação de Langevin Quântica. Investigamos o comportamento de osciladores unidimensionais, interagindo (linearmente) com um banho térmico, composto também de osciladores harmônicos. A construção, em nível clássico, da Equação de Langevin e sua quantização canônica foram apresentadas, enfatizando-se a importância da escolha adequada de uma escala temporal, bem como o papel das condições de contorno.

Reproduzimos os resultados tradicionais do formalismo TFD [8], para um sistema descrito pelos seus níveis de energia ou quasipartículas, estabelecendo uma conexão com a teoria da medida proposta por Schwinger [34]. Introduzimos assim uma forma “natural” de abordar sistemas quânticos, e construímos, de maneira heurística, um estado térmico. Mostramos também uma aplicação da TFD ao modelo FKM, implementando a temperatura nas funções de correlação de pares através dos valores esperados no vácuo térmico.

Estudamos o comportamento de um oscilador S representando uma partícula browniana em interação com um banho térmico, composto por osciladores harmônicos, através do formalismo do operador densidade [10]. Esta proposta levou ao desenvolvimento de uma Equação Mestra para a evolução do sistema microscópico de modo que na aproximação *coarse-grained*, ou seja, numa resolução temporal não muito fina, a dinâmica desse sistema não depende de sua história, o que caracteriza um processo Markoviano.

O modelo FKM apresentado proporcionou um exemplo de interação linear entre a

partícula (oscilador) e o banho térmico (coleção de osciladores acoplados) que pudemos explorar construindo a Equação Mestra e calculando as funções de correlação térmicas. Utilizamos, para isso, uma interação de forma mais geral, sem recorrer à aproximação de onda girante. O efeito de irmos além desta aproximação tornou-se explícito nas equações (5.30) e (5.37), gerando termos que de outro modo não se fariam presentes. Tais termos não são apenas correções àqueles bem conhecidos, mas passam a desempenhar um papel importante a medida que nos afastamos da frequência de ressonância, abrindo novos canais de transição.

Consideramos também o reservatório térmico como um campo escalar. Para tal realização destacamos os operadores de levantamento e abaixamento a_j^\dagger e a_j relativos ao banho e associamos a esses um campo escalar real Ψ . Este campo homogêneo simula a presença das demais partículas do banho, o que equivale à passagem ao contínuo no modelo FKM. Salientamos que a construção da teoria TFD transparece em nossa abordagem: os campos (5.46) e (5.47) são independentes e, portanto, *não* se constituem no conjugado tilde um do outro. Poderíamos também aplicar a regra de conjugação da TFD ao campo (5.46), porém deve-se inverter o sinal do tempo, afim de preservarmos a simetria por reversão temporal do sistema global. Prosseguindo com o tratamento do reservatório como campo escalar, uma outra vantagem é que, ao final, pudemos identificar os propagadores térmicos da TFD com as respectivas funções de correlação e susceptibilidade do campo escalar.

A interação desse campo com a partícula browniana (sistema) pode ser analisada com o auxílio da Equação Mestra projetada na base de autoestados da partícula. A partir dessa equação e das funções de correlação térmicas, calculadas através da TFD, pode-se escrever a taxa de variação média da energia do sistema em função de quantidades que representam as flutuações e dissipações causadas pelo reservatório. Tal estudo encontra-se atualmente em andamento.

Finalmente, com vistas a trabalhos futuros, pretendemos lançar mão do formalismo apresentado e construir um FKM fermiônico, bem como considerar outros tipos de potenciais de interação. Uma questão de fundamentos que ainda resta esclarecer, é a equivalência dos modelos de banho térmico, em especial entre o FKM e o modelo de Lamb. Este, em particular, revelou-se bastante fértil e merece atenção. De fato, Ford e O'Connell [33] fazem uso desse modelo para deduzir a Equação de Langevin Quântica, aplicando-a ao estudo de um detector (oscilador) quântico, submetido à aceleração uniforme com respeito ao vácuo do campo de radiação, numa controversa interpretação desse fenômeno.

Apêndice A

Cálculo de Algumas Funções de Correlação

A.1 Funções de Correlação em um Sistema de Osciladores Clássicos Acoplados

Os valores iniciais das coordenadas e momentos estão associados à distribuição canônica, equação (1.6),

$$D(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)) = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{-(2N+1)} (\det \mathbf{A})^{1/2} e^{-\beta H(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))}.$$

Como esta é uma distribuição gaussiana, todas as correlações de ordem mais alta podem ser expressas em termos de pares de correlações (segundo momento da distribuição). Estas são calculadas da seguinte forma. Consideremos primeiramente a autocorrelação dos momentos no instante inicial. Aplicando a definição (1.7), temos

$$\begin{aligned} \langle p_k(0)p_l(0) \rangle &= \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{-(2N+1)} (\det \mathbf{A})^{1/2} \cdot \int dq_{-N}(0) \dots dq_N(0) e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{j=-N}^N A_j q_j^2(0)} \\ &\quad \times \int dp_{-N}(0) \dots dp_N(0) p_k(0)p_l(0) e^{-\frac{\beta}{2} \sum_j p_j^2(0)} \\ &= \frac{2\pi}{\beta}^{-(2N+1)} (\det \mathbf{A})^{1/2} \cdot \overbrace{\int dq_{-N}(0) e^{-\frac{\beta}{2} A_{-N} q_{-N}^2(0)} \dots \int dq_N(0) e^{-\frac{\beta}{2} A_N q_N^2(0)}}^{(2N+1) \text{ integrais}} \\ &\quad \times \int dp_{-N}(0) e^{-\frac{\beta}{2} p_{-N}^2(0)} \dots \int dp_k(0) p_k(0) p_l(0) e^{-\frac{\beta}{2} p_k^2(0)} \dots \\ &\quad \times \int dp_N(0) e^{-\frac{\beta}{2} p_N^2(0)}. \end{aligned} \tag{A.1}$$

Observe-se que na última expressão temos $2N + 1$ integrais tanto em dq como em dp , mas em dp temos $2N$ integrais somente com o fator de Boltzmann e apenas 1 integral que inclui também o fator $p_k(0)p_l(0)$, i.e., não há soma nos índices repetidos (para k e l distintos, temos 2 integrais que se anulam por integração simétrica). Todas as integrais correm de menos a mais infinito.

Utilizando as integrais

$$I_n(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-\alpha x^2} dx, \quad (\text{A.2})$$

que para $n = 0$ e $n = 2$ valem, respectivamente, $\sqrt{\pi/\alpha}$ e $\sqrt{\pi/4\alpha^3}$, e estando \mathbf{A} diagonalizada, $\det \mathbf{A} = A_{11} \cdot A_{22} \dots$, etc, chegamos à primeira das equações (1.8),

$$\langle p_k(0)p_l(0) \rangle = k_B T \delta_{kl}.$$

Um cálculo semelhante a este leva à terceira das equações (1.8), a função de correlação entre as posições no instante inicial,

$$\langle q_k(0)q_l(0) \rangle = k_B T [\mathbf{A}^{-1}]_{kl},$$

apenas reforçando que a notação $[\mathbf{A}^{-1}]_{kl}$ representa o elemento da j -ésima linha e k -ésima coluna da inversa da matriz \mathbf{A} .

A função de correlação entre posição e momento no instante inicial, $\langle p_k(0)q_l(0) \rangle$, apresentará 2 integrais do tipo (A.2), com $n = 1$. Como esta integral se anula no intervalo de integração simétrico, obtemos a segunda das equações (1.8),

$$\langle p_k(0)q_l(0) \rangle = 0.$$

As correlações para as coordenadas e momentos dependentes do tempo são calculadas a partir das soluções (1.5) e utilizando-se as correlações no instante inicial, equações (1.8), calculadas acima. Iniciando com a autocorrelação dos momentos, primeiramente escrevemos suas expressões

$$\begin{aligned} p_k(t) &= \sum_m \left\{ -[\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{km} q_m(0) + [\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{km} p_m(0) \right\}, \quad (\text{A.3}) \\ p_l(t + \tau) &= \sum_n \left\{ -[\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}(t + \tau))]_{ln} q_n(0) + [\cos(\mathbf{A}^{1/2}(t + \tau))]_{ln} p_n(0) \right\}. \end{aligned}$$

Podemos ver que no cálculo da autocorrelação $\langle p_k(t)p_l(t + \tau) \rangle$ os termos cruzados de $q(0)$ e $p(0)$ irão se anular devido ao resultado mostrado acima, $\langle p_k(0)q_l(0) \rangle = 0$. Utilizando

novamente as eqs. (1.8), temos

$$\begin{aligned} \langle p_k(t)p_l(t+\tau) \rangle &= \sum_{m,n} \{ [\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{km} [\mathbf{A}^{1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}(t+\tau))]_{ln} k_B T [\mathbf{A}^{-1}]_{mn} \\ &\quad + [\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{km} [\cos(\mathbf{A}^{1/2}(t+\tau))]_{ln} k_B T \delta_{mn} \}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Tomando-se o devido cuidado na manipulação dos índices, temos, para o primeiro termo, simbolicamente,

$$\sum_{m,n} B_{km} C_{ln} D_{mn} = \sum_{m,n} B_{km} D_{mn} (C)_{nl}^t = \sum_{m,n} B_{km} D_{mn} C_{nl} = E_{kl},$$

onde nos valemos do fato da matriz \mathbf{A} ser simétrica*. Da mesma forma, para o segundo termo,

$$\sum_{m,n} B_{km} C_{ln} \delta_{mn} = \sum_m B_{km} C_{lm} = \sum_m B_{km} (C)_{ml}^t = D_{kl}.$$

Aplicando-se estes procedimentos à (A.4), temos

$$\langle p_k(t)p_l(t+\tau) \rangle = k_B T [\text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}t)\text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}(t+\tau)) + \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)\cos(\mathbf{A}^{1/2}(t+\tau))]_{kl}.$$

Usando-se agora a identidade trigonométrica, $\sin a \cdot \sin b + \cos a \cdot \cos b = \cos(a-b)$, chegamos à equação (1.9),

$$\langle p_k(t)p_l(t+\tau) \rangle = k_B T [\cos(\mathbf{A}^{1/2}\tau)]_{kl}.$$

Cálculos análogos levam às (1.10) e (1.11),

$$\begin{aligned} \langle q_k(t)p_l(t+\tau) \rangle &= -k_B T [\mathbf{A}^{-1/2} \text{sen}(\mathbf{A}^{1/2}\tau)]_{kl}, \\ \langle q_k(t)q_l(t+\tau) \rangle &= k_B T [\mathbf{A}^{-1} \cos(\mathbf{A}^{1/2}\tau)]_{kl}. \end{aligned}$$

A.2 Funções de Correlação em um Sistema de Osciladores Quânticos Acoplados

O sistema de osciladores quânticos é descrito pelo hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=-N}^N p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=-N}^N q_i A_{ij} q_j, \quad (\text{A.5})$$

* Na verdade, neste cálculo, temos uma função da matriz $f(\mathbf{A})$, e não a matriz propriamente dita. Entretanto, expandindo-se essa função, podemos mostrar que a propriedade de simetria permanece válida.

onde os operadores q_j e p_j satisfazem as relações de comutação (1.64)

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0, \quad [q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}.$$

O valor esperado de qualquer operador F com respeito ao ensemble canônico à temperatura T é definido por

$$\langle F \rangle \equiv \frac{\text{Tr}[F e^{-\beta H}]}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}, \quad (\text{A.6})$$

onde o traço (parcial) é tomado no espaço de autofunções do operador hamiltoniano. O interesse aqui está nos casos onde o operador F é escrito como um produto dos q 's e p 's.

Para efetuar esses cálculos, consideramos a equação de autovalores da matriz \mathbf{A} , eq.(1.69),

$$\sum_k A_{jk} \xi_k^{(s)} = \omega_s^2 \xi_j^{(s)}, \quad (\text{A.7})$$

com os autovetores normalizados,

$$\sum_j \xi_j^{(s)} \xi_j^{(r)} = \delta_{rs}, \quad \sum_r \xi_j^{(r)} \xi_k^{(r)} = \delta_{jk}. \quad (\text{A.8})$$

Introduzindo os operadores (utilizados em (1.68)),

$$\begin{aligned} a_s &= (2\hbar\omega_s)^{-1/2} \sum_j \xi_j^{(s)} (p_j - i\omega_s q_j), \\ a_s^* &= (2\hbar\omega_s)^{-1/2} \sum_j \xi_j^{(s)} (p_j + i\omega_s q_j), \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

suas relações de comutação seguem de (1.64) (ver acima) e (A.8), sendo dadas por (1.70),

$$[a_s, a_r^*] = \delta_{sr}, \quad [a_s, a_r] = [a_s^*, a_r^*] = 0.$$

A inversão de (A.9) é obtida usando (A.8), levando a (ver eq.(1.72))

$$\begin{aligned} q_j &= i \sum_s \xi_j^{(s)} \left(\frac{\hbar}{2\omega_s} \right)^{1/2} (a_s - a_s^*) \\ p_j &= i \sum_s \xi_j^{(s)} \left(\frac{\hbar\omega_s}{2} \right)^{1/2} (a_s + a_s^*). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Inserindo estas expressões no hamiltoniano (A.5) e fazendo uso das relações (A.7) e (A.8),

chegamos ao hamiltoniano do oscilador quântico

$$H_{quant} = \sum_s \hbar\omega_s \left(a_s^* a_s + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{A.11})$$

O operador $a_s^* a_s$ é o operador número para o s -ésimo modo normal, e seus autovalores são inteiros não-negativos. Os operadores de levantamento e abaixamento (a_s^* e a_s , respectivamente) possuem elementos de matriz apenas entre os auto-estados do operador número que diferem em 1 unidade.

A média estatística, (A.6), será diferente de zero somente para produtos com igual número de a_s^* 's e a_s 's. O caso mais simples é o de pares:

$$\begin{aligned} \langle a_s^* a_r \rangle &= \text{Tr}[a_s^* a_r e^{-\beta H}] / \text{Tr}[e^{-\beta H}] = \delta_{sr} \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \exp\left\{-\frac{\hbar\omega_s}{k_B T} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right\}}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left\{-\frac{\hbar\omega_s}{k_B T} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right\}}, \\ &= \delta_{sr} \left[\exp\left\{\frac{\hbar\omega_s}{k_B T}\right\} - 1 \right]^{-1}; \end{aligned}$$

ou

$$\langle a_s^* a_r \rangle = \frac{1}{2} \delta_{sr} [\text{ctgh}(\hbar\omega_s/2k_B T) - 1]. \quad (\text{A.12})$$

Utilizando as relações de comutação, obtemos

$$\langle a_s a_r^* \rangle = \frac{1}{2} \delta_{sr} [\text{ctgh}(\hbar\omega_s/2k_B T) + 1]. \quad (\text{A.13})$$

O resultado para produtos de ordens superiores obedece à seguinte regra: o valor esperado de um produto de a^* 's e a 's é igual à soma dos produtos de valores esperados de pares, sendo a soma sobre todos os pares possíveis, com a ordem de cada par preservada; p.ex.,

$$\langle a_s^* a_r a_u a_v^* \rangle = \langle a_s^* a_r \rangle \langle a_u a_v^* \rangle + \langle a_s^* a_u \rangle \langle a_r a_v^* \rangle + \langle a_s^* a_v^* \rangle \langle a_r a_u \rangle.$$

Voltando aos q 's e p 's, devido à linearidade das equações (A.10), vale a mesma regra: o valor esperado de um número ímpar de q 's e p 's anula-se; para um número par, é igual à soma de produtos de valores esperados de pares, a soma correndo sobre todos os pares, com a ordem de cada par preservada. Por ex.,

$$\langle q_i q_j p_k q_l \rangle = \langle q_i q_j \rangle \langle p_k q_l \rangle + \langle q_i p_k \rangle \langle q_j q_l \rangle + \langle q_i q_l \rangle \langle q_j p_k \rangle.$$

De (A.9), juntamente com (A.12) e (A.13), temos então

$$\langle q_j q_k \rangle = \sum_s \frac{\hbar}{2\omega_s} \text{ctgh} \left(\frac{\hbar\omega_s}{2k_B T} \right) \xi_j^{(s)} \xi_k^{(s)}. \quad (\text{A.14})$$

Esta equação pode ser reescrita, com o auxílio de (A.7), como

$$\langle q_j q_k \rangle = \left[\frac{\hbar \mathbf{A}^{-\frac{1}{2}}}{2} \text{ctgh} \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{\frac{1}{2}}}{2k_B T} \right) \right]_{jk}. \quad (\text{A.15})$$

Analogamente,

$$\langle p_j p_k \rangle = \left[\frac{\hbar \mathbf{A}^{\frac{1}{2}}}{2} \text{ctgh} \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{\frac{1}{2}}}{2k_B T} \right) \right]_{jk}, \quad (\text{A.16})$$

e

$$\langle q_j p_k \rangle = -\langle p_j q_k \rangle = \frac{i\hbar}{2} \delta_{jk}. \quad (\text{A.17})$$

Consideramos agora as funções de correlação dependentes do tempo, nas quais os operadores em um instante t são escritos em termos dos operadores no instante inicial através das relações (1.5), entendidas aqui como as soluções formais das equações de movimento de Heisenberg. Novamente, vale a mesma regra anterior, p.ex.,

$$\begin{aligned} \langle q_j(t_1) q_k(t_2) p_l(t_3) q_m(t_4) \rangle &= \langle q_j(t_1) q_k(t_2) \rangle \langle p_l(t_3) q_m(t_4) \rangle \\ &+ \langle q_j(t_1) p_l(t_3) \rangle \langle q_k(t_2) q_m(t_4) \rangle \\ &+ \langle q_j(t_1) q_m(t_4) \rangle \langle q_k(t_2) p_l(t_3) \rangle. \end{aligned}$$

A correlações de pares são, utilizando (A.15), (A.16) e (A.17) para os valores esperados iniciais, as expressões (1.67):

$$\begin{aligned} \langle q_j(t) p_k(t + \tau) \rangle &= \left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{A}^{1/2} \left(-\text{ctgh} \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{2k_B T} \right) \text{sen} \mathbf{A}^{1/2} \tau + i \cdot \text{cos} \mathbf{A}^{1/2} \tau \right) \right]_{jk}, \\ \langle q_j(t) q_k(t + \tau) \rangle &= \left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{A}^{-1/2} \left(\text{ctgh} \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{2k_B T} \right) \text{cos} \mathbf{A}^{1/2} \tau + i \cdot \text{sen} \mathbf{A}^{1/2} \tau \right) \right]_{jk}, \\ \langle p_j(t) p_k(t + \tau) \rangle &= \left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{A}^{1/2} \left(\text{ctgh} \left(\frac{\hbar \mathbf{A}^{1/2}}{2k_B T} \right) \text{cos} \mathbf{A}^{1/2} \tau + i \cdot \text{sen} \mathbf{A}^{1/2} \tau \right) \right]_{jk}. \end{aligned}$$

Apêndice B

Solução de Algumas Integrais e Equações Diferenciais

B.1 FKM - Solução da Integral (1.48)

Vamos mostrar que $f(\theta) = \alpha^2 \operatorname{tg}^2(\theta/2)$, eq.(1.45), é a solução da integral (1.44), e que no limite $\omega_L \rightarrow \infty$ esta expressão torna-se $e^{-\alpha|t|}$, caracterizando o processo como markoviano.

A integral (1.48), com a substituição $\omega = \alpha \operatorname{tg}(\theta/2)$, torna-se

$$[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos \left[\alpha \left(\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right) t \right] d\theta = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos \alpha t y}{1 + y^2} dy,$$

onde fizemos a substituição $y = \operatorname{tg} \theta/2$. Para simplificar, escrevemos $z = by$, sendo $b = \alpha t$. Assim,

$$\begin{aligned} [\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00} &= \frac{1}{\pi b} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos z}{1 + z^2/b^2} dz = \frac{b}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re}[e^{iz}]}{b^2 + z^2} dz \\ &= \frac{b}{\pi} \operatorname{Re} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iz}}{b^2 + z^2} dz \right]. \end{aligned}$$

Esta última integral apresenta dois pólos de primeira ordem em $z = \pm ib$. Fechando o contorno de integração pelo semi-plano superior, englobamos o pólo $z = +ib$; utilizando o teorema dos resíduos, esta integral será igual à $2\pi i \cdot \operatorname{Res}[f(z)]$. Então,

$$[\cos(\mathbf{A}^{1/2}t)]_{00} = \frac{b}{\pi} 2\pi i \cdot \operatorname{Res} \left[\frac{e^{-b}}{2ib} \right] = e^{-\alpha t}.$$

B.2 FKM - Soluções das Equações Diferenciais (1.49) através do Método de Variação dos Parâmetros

As equações (1.49) podem ser escritas como uma só equação diferencial de segunda ordem

$$\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{A}\mathbf{q} = \mathbf{F}(t). \quad (\text{B.1})$$

O método de variação dos parâmetros (ver Kreyzig, vol.1, pág.166 [46]) consiste em introduzir dois parâmetros dependentes do tempo, $u(t)$ e $v(t)$, tais que uma solução particular de (B.1) pode ser escrita na forma

$$q_p = u(t)q_1(t) + v(t)q_2(t), \quad (\text{B.2})$$

onde q_1 e q_2 são as soluções da equação homogênea, i.e, tomando-se $F = 0$ em (B.1) (ver soluções (1.5)). É possível determinar u e v tais que

$$\dot{u}q_1 + \dot{v}q_2 = 0. \quad (\text{B.3})$$

Aplicando as derivadas em (B.2) temos

$$\ddot{q}_p = \dot{u}\dot{q}_1 + u\ddot{q}_1 + \dot{v}\dot{q}_2 + v\ddot{q}_2. \quad (\text{B.4})$$

Inserindo esta última equação e (B.2) em (B.1), resulta

$$u(\ddot{q}_1 + Aq_1) + v(\ddot{q}_2 + Aq_2) + \dot{u}\dot{q}_1 + \dot{v}\dot{q}_2 = F.$$

Entretanto, como q_1 e q_2 são soluções da equação homogênea, os termos entre parênteses desta equação são nulos. Este fato, juntamente com a relação (B.3), leva ao sistema de equações

$$\begin{aligned} \dot{u}\dot{q}_1 + \dot{v}\dot{q}_2 &= F, \\ \dot{u}q_1 + \dot{v}q_2 &= 0. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Multiplicando (B.5) por q_2 , (B.3) por $-\dot{q}_2$, e somando-as, temos

$$(\dot{q}_1q_2 - q_1\dot{q}_2)\dot{u} = Fq_2.$$

Multiplicando agora (B.5) por $-q_1$, (B.3) por \dot{q}_1 , e somando-as, temos

$$(\dot{q}_1 q_2 - q_1 \dot{q}_2) \dot{v} = -F q_1.$$

Estas equações podem ser reescritas, respectivamente, nas formas

$$\dot{u} = \frac{F q_2}{W}, \quad \dot{v} = -\frac{F q_1}{W}, \quad (\text{B.6})$$

onde

$$W \equiv \dot{q}_1 q_2 - q_1 \dot{q}_2 = \begin{vmatrix} \dot{q}_1 & \dot{q}_2 \\ q_1 & q_2 \end{vmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

é o wronskiano (ver Kreyzig, vol.1, pág.136 [46]). As equações (B.6) podem ser integradas e inseridas em (B.2), levando assim, à solução particular

$$q_p(t) = \int q_1(t) \frac{F(t') q_2(t')}{W} dt' - \int q_2(t) \frac{F(t') q_1(t')}{W} dt'. \quad (\text{B.8})$$

Voltando ao nosso problema dos osciladores acoplados, as soluções da equação homogênea são compostas por (ver (1.5)), $q_1 = \cos(\mathbf{A}^{1/2}t)$ e $q_2 = \sin(\mathbf{A}^{1/2}t)$; portanto, o wronskiano vale $W = -\mathbf{A}^{1/2}$. A solução particular, (B.8), fica então

$$\begin{aligned} q_p(t) &= -\mathbf{A}^{1/2} \int \cos(\mathbf{A}^{1/2}t) F(t') \sin(\mathbf{A}^{1/2}t') dt' \\ &\quad + \mathbf{A}^{1/2} \int \sin(\mathbf{A}^{1/2}t) F(t') \cos(\mathbf{A}^{1/2}t') dt'. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

A equação (B.1) apresenta a solução geral $q = q_h + q_p$, que é a combinação de (1.5) e (B.9); através da relação $\sin(a \pm b) = \sin a \cos b \pm \cos a \sin b$, chegamos finalmente à solução (1.50),

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(t) &= \cos(\mathbf{A}^{1/2}t) \mathbf{q}(0) + \mathbf{A}^{-1/2} \sin(\mathbf{A}^{1/2}t) \mathbf{p}(0) \\ &\quad + \mathbf{A}^{-1/2} \int_0^t F(t') \sin(\mathbf{A}^{1/2}(t - t')) dt'. \end{aligned}$$

A solução (1.51) é obtida imediatamente a partir da primeira das equações (1.49).

B.3 FK - Solução das Equações Diferenciais (2.8) via Funções de Green

As equações (2.8) podem ser escritas como uma só equação diferencial de segunda ordem (omitindo os sub-índices 'j')

$$\ddot{q} + \omega^2 q = \omega^2 x(t) \equiv X(t). \quad (\text{B.10})$$

O método de variação de parâmetros exposto acima não é o mais adequado à solução desta equação, sendo mais apropriado utilizarmos as funções de Green do problema associado (uma excelente introdução às funções de Green pode ser encontrada no livro de Byron, vol.2, capítulo 7 [47]).

Consideremos as transformadas de Fourier (em 1 dimensão):

$$\tilde{X}(k) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikt} X(t) dt, \quad \tilde{q}(k) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikt} q(t) dt. \quad (\text{B.11})$$

Substituindo as anti-transformadas em (B.10), obtemos

$$\tilde{q}(k) = \frac{\tilde{X}(k)}{\omega^2 - k^2}, \quad (\text{B.12})$$

e, aplicando novamente a transformada de Fourier,

$$q(t) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{X}(k)}{\omega^2 - k^2} e^{-ikt} dk. \quad (\text{B.13})$$

Usando a definição de $\tilde{X}(k)$, temos

$$q(t) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{X(t') e^{ikt'}}{\omega^2 - k^2} e^{-ikt} dk. \quad (\text{B.14})$$

Finalmente, somando-se à parte homogênea a solução particular, chegamos à solução geral de (B.10),

$$q(t) = q_h(t) + \int_{-\infty}^{\infty} G(t, t') X(t') dt', \quad (\text{B.15})$$

onde

$$G(t, t') = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik(t-t')}}{\omega^2 - k^2} dk, \quad (\text{B.16})$$

é a função de Green do problema. Do exposto, torna-se claro que calcular esta função é

equivalente a resolver a equação diferencial. Vamos, então, ao cálculo de $G(t, t')$.

Esta função apresenta dois pólos no eixo real, em $k = \mp\omega$. Precisamos, portanto, de uma indicação de como o caminho de integração deve ser deformado, de modo a conferir um significado preciso à função de Green. Esta dependerá fortemente das condições de contorno escolhidas para o problema, daí a importância da escolha. Poderemos ter funções de Green de vários tipos: avançadas, retardadas, causais, acausais e combinações dessas. No Capítulo 4 vimos que foram escolhidas as soluções *retardadas* para o presente problema.

Consideremos o caso em que $t > t'$. O contorno de integração deve então ser fechado por baixo, para que a contribuição do semicírculo maior seja nula. Os pólos no eixo real serão contornados por cima, no sentido horário. Assim, do teorema dos resíduos, escrevemos a função de Green como

$$G = \int_{-\infty}^{\infty} f(z) dz = 2\pi i \sum \text{Res}[f(z)],$$

com

$$f(z) = \frac{e^{-i(t-t')z}}{(\omega + z)(\omega - z)}. \tag{B.17}$$

Separamos o contorno de integração da seguinte maneira: semi-círculo grande Γ (no semi-plano inferior); de $-R$ a $-\omega - \rho$; semi-círculo pequeno γ_1 (sobre o pólo $-\omega$); de $-\omega + \rho$ a $\omega - \rho$; semi-círculo pequeno γ_2 (sobre o pólo $+\omega$); de $\omega + \rho$ a $+R$, onde ρ é o raio das circunferências pequenas sobre os pólos, e todos os semi-círculos são percorridos no sentido horário. Simbolicamente,

$$G = \left(\int_{\Gamma} + \int_{-R}^{-\omega-\rho} + \int_{\gamma_1} + \int_{-\omega+\rho}^{\omega-\rho} + \int_{\gamma_2} + \int_{\omega+\rho}^{+R} \right) f(z) dz = 2\pi i \sum \text{Res}[f(z)].$$

Fazendo $z = Re^{i\theta}$ e $R \rightarrow \infty$, a integral sobre Γ anula-se e as integrais sobre γ_1 e γ_2 terão uma contribuição de $\pi i \text{Res}[f(z)]$, cada uma (ver Byron, vol.2, pág.365 [47]). Temos então, lembrando do sinal negativo para o percurso no sentido horário,

$$\begin{aligned} G(t, t') &= -3\pi i \left(\lim_{z \rightarrow -\omega} \frac{e^{-i(t-t')z}}{(\omega - z)} - \lim_{z \rightarrow \omega} \frac{e^{-i(t-t')z}}{(\omega + z)} \right) \\ &= \frac{3\pi}{\omega} \left(\frac{e^{i(t-t')\omega} - e^{-i(t-t')\omega}}{2i} \right) \\ &= \frac{3\pi}{\omega} \text{sen}[\omega(t - t')]. \end{aligned} \tag{B.18}$$

Portanto, (B.16) torna-se

$$G(t, t') = \frac{3}{2\omega} \text{sen}[\omega(t - t')],$$

expressão que substituída em (B.15), leva à solução particular

$$q_p(t) = \frac{3}{2\omega} \int_{-\infty}^t \text{sen}[\omega(t - t')] \omega^2 x(t') dt',$$

onde o limite superior da primeira integral foi cortado em $t = t'$, pois assumimos a condição $t' < t$. Resolvendo esta integral por partes, obtemos

$$\begin{aligned} q_p(t) &= \frac{3}{2} \left[x(t') \cdot \cos \omega(t - t') \Big|_{-\infty}^t - \int_{-\infty}^t \cos \omega(t - t') \dot{x}(t') dt' \right] \\ &= \frac{3}{2} \left[x(t) - \int_{-\infty}^t \cos \omega(t - t') \dot{x}(t') dt' \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Cabe aqui, uma observação importante. No artigo de Ford et al. (capítulo 4) fez-se a consideração que $x(-\infty) \rightarrow 0$, o que nos leva (a menos de constantes) à resposta acima. No artigo FK (capítulo 3) os autores, possivelmente, equivocaram-se quanto ao limite inferior desta integral, tomando-o a partir de zero, ao invés de $-\infty$. Esta é a origem do termo extra (2.22), divergente, que aparece nesse trabalho.

Finalmente, voltando à (B.15), chegamos à solução geral de (B.10), equação (2.35):

$$q(t) = q_h(t) + x(t) - \int_{-\infty}^t \cos \omega(t - t') \dot{x}(t') dt'. \quad (\text{B.20})$$

Apêndice C

Expansão do Vácuo Térmico

No capítulo 3 fatorou-se a exponencial (3.31) em produtos de exponenciais. Deduz-se aqui uma maneira de realizar tal expansão. Primeiramente, propomos a expansão da forma

$$e^{\frac{\theta}{2}(a^\dagger - a^2)} = e^{f(\theta)a^\dagger} e^{-g(\theta)[a^\dagger, a^2]} e^{-h(\theta)a^2}, \quad (\text{C.1})$$

onde os operadores foram convenientemente ordenados com o intuito de serem aplicados posteriormente ao vácuo. Para facilitar os cálculos, será utilizada a notação

$$A = a^\dagger,$$

$$B = -a^2,$$

$$C = [B, A] = -2(a^\dagger a + a a^\dagger),$$

de modo que

$$U = e^{\frac{\theta}{2}(A+B)} = e^{Af(\theta)} e^{Cg(\theta)} e^{Bh(\theta)}. \quad (\text{C.2})$$

Antes de proceder, para que a expressão (C.1) possa ser alcançada, os operadores A , B e C , necessariamente devem formar uma álgebra fechada, ou seja, satisfazem a identidade de Jacobi

$$[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]] = 0.$$

De fato,

$$[B, C] = -8B,$$

$$[A, B] = C,$$

$$[C, A] = -8A;$$

logo

$$[A, -8B] + [C, C] + [B, -8A] = 0;$$

uma vez verificado o fechamento da álgebra resta determinar os coeficientes $f(\theta)$, $g(\theta)$ e $h(\theta)$. Diferenciando (C.2) em relação a θ , temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta}U &= \frac{1}{2}(A+B)U \\ &= AU \frac{d}{d\theta}f(\theta) + e^{Af(\theta)}Ce^{Cg(\theta)}e^{Bh(\theta)} \frac{d}{d\theta}g(\theta) + UB \frac{d}{d\theta}h(\theta) \\ &= \left[A \frac{d}{d\theta}f(\theta) + e^{Af(\theta)}Ce^{-Af(\theta)} \frac{d}{d\theta}g(\theta) + UBU^{-1} \frac{d}{d\theta}h(\theta) \right] U, \end{aligned}$$

de modo que

$$\left(\frac{1}{2} - \frac{d}{d\theta}f(\theta) \right) A + \frac{1}{2}B - U_sBU_s^{-1} \frac{d}{d\theta}h(\theta) - e^{Af(\theta)}Ce^{-Af(\theta)} \frac{d}{d\theta}g(\theta) = 0.$$

Multiplicando por $e^{-Af(\theta)}$ à esquerda e por $e^{Af(\theta)}$ à direita, resulta

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{2} - \frac{d}{d\theta}f(\theta) \right) A + \frac{1}{2}e^{-Af(\theta)}Be^{Af(\theta)} \\ &- e^{Cg(\theta)}Be^{-Cg(\theta)} \frac{d}{d\theta}h(\theta) - C \frac{d}{d\theta}g(\theta) = 0. \end{aligned} \tag{C.3}$$

Utilizando a relação de Baker-Campbell-Hausdorff, obtemos para os termos exponenciais

$$\begin{aligned} &e^{-Af(\theta)}Be^{Af(\theta)} \\ &= B - f(\theta)[A, B] + \frac{f^2(\theta)}{2!}[A, [A, B]] - \frac{f^3(\theta)}{3!} \sum_0 \underbrace{[A, [A, [A, B]]]} + \dots \\ &= B + f(\theta)C - 4f^2(\theta)A, \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} &e^{Cg(\theta)}Be^{-Cg(\theta)} \\ &= B + g(\theta)[C, B] + \frac{g^2(\theta)}{2!}[C, [C, B]] + \frac{g^3(\theta)}{3!}[C, [C, [C, B]]] + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= B + 8g(\theta)B + \frac{g^2(\theta)}{2!}8^2B + \frac{g^3(\theta)}{3!}8^3B + \dots \\
&= B \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(8g(\theta))^n}{n!} = Be^{8g(\theta)}.
\end{aligned}$$

Substituindo em (C.3),

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{1}{2} - \frac{d}{d\theta}f(\theta)\right)A + \frac{1}{2}(B + f(\theta)C - 4f^2(\theta)A) \\
&\quad - Be^{8g(\theta)}\frac{d}{d\theta}h(\theta) - \frac{d}{d\theta}Cg(\theta) = 0,
\end{aligned}$$

e fatorando os operadores, segue que

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{1}{2} - 2f^2(\theta) - \frac{d}{d\theta}f(\theta)\right)A + \left(\frac{1}{2} - e^{8g(\theta)}\frac{d}{d\theta}h(\theta)\right)B \\
&\quad + \left(\frac{1}{2}f(\theta) - \frac{d}{d\theta}g(\theta)\right)C = 0.
\end{aligned}$$

Como os operadores A , B e C são linearmente independentes, para que a equação anterior seja válida, cada termo deve ser nulo; resolvendo as equações diferenciais com as condições de contorno

$$U(0) = 1 \Rightarrow f(0) = g(0) = h(0) = 0,$$

a equação

$$\frac{d}{d\theta}f(\theta) = \frac{1}{2} - 2f^2(\theta)$$

tem como solução

$$\theta = 2 \int \frac{df}{1 - 4f^2} = \operatorname{arctgh}(2f) \Rightarrow f(\theta) = \frac{1}{2}\operatorname{tgh}(\theta).$$

Substituindo $f(\theta)$,

$$\frac{d}{d\theta}g(\theta) = \frac{1}{2}f(\theta) = \frac{1}{4}\operatorname{tgh}(\theta),$$

resulta

$$g(\theta) = \frac{1}{4}\ln[\cosh(\theta)].$$

Finalmente, resolvendo para $h(\theta)$,

$$\frac{d}{d\theta}h(\theta) = \frac{1}{2}e^{-8g(\theta)} = \frac{1}{2}\cosh^{-2}(\theta),$$

obtemos

$$h(\theta) = \frac{1}{2} \operatorname{tgh}(\theta).$$

A equação (C.1) torna-se então

$$U = e^{\frac{1}{2} \operatorname{tgh}(\theta) a^{i2}} e^{\frac{1}{4} \ln[\cosh(\theta)] [a^{i2}, a^2]} e^{\frac{1}{2} \operatorname{tgh}(\theta) a^2},$$

que é exatamente a equação (3.31).

Apêndice D

A Aproximação Delta

Neste apêndice será discutida a aproximação feita no final da seção 5.3. A expressão pode ser convenientemente reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)}{\omega_{0i}^2\Delta t} &= (\omega_{0i}^2\Delta t)^{-1} 2\text{sen}^2\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right) \\ &= \left[(\omega_{0i}\Delta t)^{-1} \text{sen}\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right) \right] \left[\left(\frac{\omega_{0i}}{2}\right)^{-1} \text{sen}\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

No limite $\Delta t \rightarrow \infty$, pode-se reconhecer o segundo termo como sendo a distribuição delta de Dirac

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} (x)^{-1} \text{sen}(nx); \quad (\text{D.2})$$

assim,

$$2\pi\delta(\omega_{0i}) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left(\frac{\omega_{0i}}{2}\right)^{-1} \text{sen}\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right).$$

Agora, efetuando o limite $\omega_{0i} \rightarrow 0$ e garantindo que este convirja mais rapidamente do que Δt cresce, tal que, $\omega_{0i}\Delta t \rightarrow 0$, reconhece-se o limite fundamental

$$\lim_{\omega_{0i}\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right)^{-1} \text{sen}\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right) = 1 \quad (\text{D.3})$$

e, portanto,

$$\lim_{\substack{\Delta t \rightarrow \infty \\ \Delta t\omega_{0i} \rightarrow 0}} \frac{1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)}{\omega_{0i}^2\Delta t} = \pi\delta(\omega_{0i}).$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill Book Company (1965).
- [2] S. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, Ed. 2, EDUSP (1997).
- [3] M. Oliveira e T. Tomé, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, EDUSP (2001).
- [4] T. Brandes, *Lectures on Background to Quantum Information*, Cap. 7: Quantum Dissipation, extraído de www.itp.physik.tu-berlin.de/brandes/public.../notes/ (2004).
- [5] I. R. Senitzky, *Dissipation in Quantum Mechanics. The Harmonic Oscillator*, Phys. Rev. **119**, n.2 (1960) 670; *Dissipation in Quantum Mechanics. The Harmonic Oscillator II*, Phys. Rev. **124**, n.3 (1961) 642.
- [6] R.P. Feynman e F.L. Vernon Jr., *The Theory of a General Quantum System Interacting with a Linear Dissipative System*, Ann. Phys. **24** (1963) 118.
- [7] J.L. Tomazelli e L.C. Costa, *Operator Ordering in Quantum Radiative Processes*, Physica A **323** (2003) 435.
- [8] H. Umezawa, *Advanced Field Theory: micro, macro and thermal physics*, Amer. Inst. of Physics (1995);
- [9] H. Umezawa, H. Matsumoto, M. Tachiki, *ThermoField Dynamics and Condensed States*, North Holland (1982);
- [10] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc e G. Grynberg, *Atom-Photon Interactions: Basic Processes and Applications*, Wiley (2004); ver também os artigos: J. Dalibard, J. Dupont-Roc e C. Cohen-Tannoudji, *Vacuum fluctuations and radiation reaction: identification of their respective contributions*, J. Physique, **43** (1982) 1617; *Dynamics of a small system coupled to a reservoir: reservoir fluctuations and self-reaction*, J. Physique **45** (1984) 637.

- [11] G.W. Ford, M. Kac e P. Mazur, *Statistical Mechanics of Assemblies of Coupled Oscillators*, J. Math. Phys. **6** n.4 (1965) 504.
- [12] R.M. Gray, *Toeplitz and Circulant Matrices: a review*, extraído de ee.stanford.edu/gray/toeplitz.pdf (s/d).
- [13] P.M. Morse e K.U. Ingard, *Theoretical Acoustics*, McGraw-Hill Book Company (1968).
- [14] J.V. José e E.J. Saletan *Classical Dynamics: a contemporary approach*, Cambridge University Press (1998).
- [15] J.B. Marion e S.T. Thornton, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, 4ª Ed., Harcourt Brace & Company (1995).
- [16] G.L. Kotkin e V.G. Serbo, *Problemas de Mecânica Clássica*, Ed. Mir (1980).
- [17] S. Kim, *Brownian motion in assemblies of coupled harmonic oscillators*, J. Math. Phys. **15** n.5 (1974) 578.
- [18] K. Saito et.al, *Energy transport in the integrable system in contact with various types of phonon reservoirs*, Phys. Rev. E **61** n.3 (2000) 2397.
- [19] J.B. Keller e L.L. Bonilla, *Irreversibility and Nonrecurrence*, J. Stat. Phys. **42** n.5/6 (1986) 1115.
- [20] J.T. Lewis e H. Maassen, "Hamiltonian Models of Classical and Quantum Stochastic Processes", in L. Accardi et al., *Quantum Probability and Applications to the Quantum Theory of Irreversible Processes*, Proceedings of the International Workshop, 1982.
- [21] G.W. Ford e M. Kac, *On The Quantum Langevin Equation*, J. Stat. Phys. **46** (1987) 803.
- [22] A.O. Caldeira e A.J. Leggett, *Influence of Dissipation on Quantum Tunneling in Macroscopic Systems*, Phys. Rev. Lett. **46** (1981) 211.
- [23] V. B. Magalinskij, *Dynamical model in the theory of the Brownian motion*, Sov. Phys. JETP **9** (1959) 1381.
- [24] G.W. Ford, J.T. Lewis e R.F. O'Connell, *Quantum oscillator in a blackbody radiation field II: Direct calculation of the energy using the fluctuation-dissipation theorem*, Ann. Phys. **185** (1988) 270.

- [25] R. Benguria e M. Kac, *Quantum Langevin Equation*, Phys. Rev. Lett., **46** n.1 (1981) 1.
- [26] N.G. van Kampen, *Derivation of the Quantum Langevin Equation*, J. Mol. Liq., **71** (1997) 97.
- [27] C.W. Gardiner, *Quantum Noise and Quantum Langevin Equations*, IBM J. Res. Develop., **32** n.1 (1988) 1.
- [28] G.W. Ford, J.T. Lewis e R.F. O'Connell, *Quantum Langevin Equation*, Phys. Rev. A **37** n.11 (1988) 4419.
- [29] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc e G. Grynberg, *Photons and Atoms: Introduction to Quantum Electrodynamics*, Wiley (2004).
- [30] P. Ullersma, *An exactly solvable model for Brownian motion : I. Derivation of the Langevin equation*, Physica **32** (1966) 27.
- [31] H. Lamb, *On a peculiarity of the wave-system due to the free vibrations of a nucleus in an extended medium*, Proc. London Math. Soc., s1-32 (1900) 208.
- [32] J.T. Lewis e L.C. Thomas, "How to make a heat bath", in *Functional Integration*, edited by A.M. Arhurs, Proceedings of the International Conference on Functional Integration, Cumberland Lodge, London, 1974 (Clarendon Press. Oxford, 1975).
- [33] G.W. Ford e R.F. O'Connell, *Is there Unruh radiation?*, Phys. Rev. A **350** (2006) 17.
- [34] J. Schwinger, *Brownian motion of a quantum oscillator*, J. Math. Phys. **2** 407 (1961);
- [35] Y. Takahashi, H. Umezawa, *Collective phenomena*, reprinted in Int. J. Mod. Phys., **55** (1975);
- [36] P. W. Milonni, *The Quantum Vacuum: an Introduction to Quantum Electrodynamics*, Academic Press (1994);
- [37] R. H. Koch, D. J. van Harlingen, J. Clark, *Observation of Zero-Point Fluctuations in a Resistively Shunted Josephson Tunnel Junction*, Phys. Rev. Lett **47** 1216 (1981);
- [38] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press (2002);
- [39] D. M. Gitman, I. V. Tiutin, *Quantization of Fields With Constrains*, Springer-Verlag (1991).

- [40] W. H. Louisell, *Quantum Statistical Properties of Radiation*, John Wiley & Sons (1973).
- [41] M.O. Scully e M.S. Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press (1997).
- [42] N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, 3ª Ed., Elsevier (2007).
- [43] C.W. Gardiner e P. Zoller, *Quantum Noise: a handbook of markovian and non-markovian quantum stochastic methods with applications to quantum optics*, 2ª Ed., Springer-Verlag (2000).
- [44] W.H. Furry, *On Bound States and Scattering in Positron Theory*, Phys. Rev. **81** (1951) 115.
- [45] J. L. Tomazelli, L. C. Costa, *Atomic Radiative Transitions in Thermo Field Dynamics*, Int. J. Mod. Phys. A **18** 7 (2003) 1079.
- [46] E. Kreyzig, *Matemática Superior* vol. 1 e 4, Livros Técnicos e Científicos (1975).
- [47] F.W. Byron e R.W. Fuller, *Mathematics of Classical and Quantum Physics*, Addison-Wesley Publ. & Co. (1970).