

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

Renan Cunha de Oliveira

EQUAÇÃO MESTRA A TEMPERATURA FINITA

Florianópolis

2011

Renan Cunha de Oliveira

EQUAÇÃO MESTRA A TEMPERATURA FINITA

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física para a obtenção do Grau de Mestre em Física.
Orientador: Orientador : Prof. Dr. Jeferson de Lima Tomazelli

Florianópolis

2011

Catálogo na fonte pela Biblioteca Universitária
da
Universidade Federal de Santa Catarina

O48e Oliveira, Renan Cunha de
Equação mestra a temperatura finita [dissertação] / Renan
Cunha de Oliveira ; orientador, Jeferson de Lima Tomazelli. -
Florianópolis, SC, 2011.
87 p.

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

Inclui referências

1. Física. 2. Supercondutividade. 3. Equações diferenciais.
4. Osciladores harmônicos. 5. Reservatórios. I. Tomazelli,
Jeferson de Lima. II. Universidade Federal de Santa Catarina.
Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDU 53

Renan Cunha de Oliveira

EQUAÇÃO MESTRA A TEMPERATURA FINITA

Esta Dissertação foi julgada aprovada para a obtenção do Título de “Mestre em Física”, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Física.

Florianópolis, 05 de agosto 2011.

Luis Guilherme
Coordenador

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Jeferson de Lima Tomazelli
Presidente

Orientador : Prof. Dr. Jeferson de Lima Tomazelli
Orientador

Prof. Dr. Frederico Firmo De Souza Cruz

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Célia e Carlos Roberto, e a minha irmã Raquel pelo apoio, compreensão e paciência.

Ao professor Dr. Jeferson de Lima Tomazelli, pela orientação e discussões ao longo desse período.

Aos professores Dr. Wagner Figueiredo, Dr. Lúcio Campos Costa e Dr. Frederico Firmo De Souza Cruz, membros da Banca do Exame de Qualificação, pela disponibilidade e pelas sugestões para a melhoria da dissertação.

Aos meus colegas de Mestrado e Doutorado, Graziâni, James, Lucio, Marcelo, Maurício, Nara e Victor; do Grupo de Física Matemática, Diego, Gabriel, Gerson, Leonardo e Paulo; do Grupo de Estatística, David, Diego, Marcelo, Robson e Tharnier; do Laboratório Mössbauer, André, Guilherme, Gustavo, Junior e Milena; do Grupo de Nuclear, Bruno e Luiz; do LabSiN, Luana e Paula.

Aos meus grandes amigos espanhóis Manu e Cristina, pelas conversas e incríveis férias.

Aos amigos dos cursos extracurriculares, em especial a Prof. Carolina, pela paciência.

Ao Antônio Machado, pela disponibilidade e esforço, que permitiram que a defesa fosse realizada.

À CAPES, pelo apoio financeiro.

Não basta conquistar a sabedoria, é preciso usá-la.

Cícero

RESUMO

Nesta dissertação estudamos o comportamento de sistemas quânticos constituídos por uma coleção de osciladores aos quais podemos associar um operador densidade separável, permitindo identificarmos dois subsistemas fracamente acoplados. Um deles consiste de um único oscilador, representando um sistema microscópico, enquanto o outro corresponde aos demais osciladores, que desempenham o papel de um *reservoir* com o qual o primeiro se encontra em equilíbrio térmico. Com tal objetivo, construímos a equação mestra que governa a evolução do sistema microscópico a partir da equação de Liouville-Von Neumann para o respectivo operador densidade reduzida, incorporando os efeitos de temperatura via o formalismo da Thermofield Dynamics (TFD) e redefinindo adequadamente o vácuo do sistema macroscópico. Como aplicação, consideramos dois exemplos. O primeiro refere-se a um oscilador em interação com um conjunto de osciladores bosônicos a temperatura finita, usualmente empregado para se descrever, do ponto de vista da mecânica quântica, uma partícula browniana. No segundo, investigamos o comportamento de um oscilador na presença de um banho térmico constituído por um conjunto de osciladores fermiônicos

Palavras-chave: Thermofield Dynamics, transformações de Bogoliubov, equação mestra, oscilador harmônico, reservatório.

ABSTRACT

In this dissertation we study the behavior of two weakly coupled quantum systems, described by a separable density operator. One of them is a single oscillator, representing a microscopic system, while the other is a set of oscillators, which perform the role of a *reservoir* in thermal equilibrium. From the Liouville-Von Neumann equation for the reduced density operator, we devise the master equation that governs the evolution of the microscopic system, incorporating the effects of temperature via Thermofield Dynamics formalism (TFD) and suitably redefining the vacuum of the macroscopic system. As applications, we consider two examples. First, we study an oscillator interacting with a set of boson oscillators at finite temperature, usually employed in quantum mechanics to describe a Brownian particle. Next, we investigate the behavior of an oscillator in the presence of a heat bath consisting of a set of fermion oscillators.

Keywords: Thermofield Dynamics, Bogoliubov transformation, master equation, harmonic oscillator, reservoir.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	15
2 TEORIA DA MEDIDA	17
3 ESTATÍSTICA QUÂNTICA	23
3.1 THERMOFIELD DYNAMICS	23
3.1.1 Caso Bosônico	27
3.1.2 Caso Fermiônico	29
3.2 TRANSFORMAÇÕES DE BOGOLIUBOV	30
3.2.1 Estados <i>Squeezed</i>	31
3.2.2 Estados <i>Squeezed</i> de Dois Modos	32
3.2.3 Estados <i>Squeezed</i> Fermiônicos de Dois Modos	35
3.3 O CAMPO ESCALAR LIVRE	37
4 A EQUAÇÃO MESTRA	41
4.1 EVOLUÇÃO DO SISTEMA A NA REPRESENTAÇÃO DE INTERAÇÃO	41
4.2 PROJETANDO NA BASE DOS AUTOESTADOS	45
4.3 FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DE DOIS PONTOS TÉRMICA	48
4.3.1 A Função de Correlação Simétrica	50
4.3.2 A Susceptibilidade Linear	51
5 OSCILADOR HARMÔNICO	53
5.1 EVOLUÇÃO DA POPULAÇÃO	56
5.2 OSCILADOR HARMÔNICO FERMIONICO	59
6 CONSIDERAÇÕES FINAIS	63
REFERÊNCIAS	65
APÊNDICE A – Expansão do Vácuo Térmico	69
APÊNDICE B – Ruído em Estados Puros	75
APÊNDICE C – Condição de Validade para a Expansão Perturbativa	81
APÊNDICE D – A Aproximação Delta	87

1 INTRODUÇÃO

Com o intuito de introduzir temperatura à teoria de campo, Matsubara (MATSUBARA, 1955) apresenta em 1955 o formalismo de tempo imaginário, que possui a grande vantagem de possibilitar a construção de diagramas de Feynman para amplitudes de transição na série perturbativa de Dyson. Entretanto, apesar do grande avanço alcançado com este formalismo, surgiram algumas dificuldades, especialmente no tratamento de processos dependentes do tempo e da temperatura simultaneamente, tornando-se necessário construir um formalismo de tempo real. O primeiro formalismo de tempo real foi proposto por Schwinger (SCHWINGER, 1961) e Keldysh (KELDYSH, 1964) via métodos funcionais a partir da teoria da medida; mais tarde, Umezawa e Takahashi (TAKAHASHI; UMEZAWA, 1975; UMEZAWA, 1995), em 1975, introduzem um novo formalismo de tempo real, a Thermofield Dynamics (TFD), baseada numa construção via operadores, permitindo incorporar temperatura para o tratamento de sistemas quânticos em equilíbrio térmico.

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 (KHANNA, 2009; UMEZAWA; MATSUMOTO; TACHIKI, 1982), física nuclear, física de partículas, óptica quântica e cosmologia.

O estudo da dinâmica de um sistema quântico interagindo com um *reservoir* não é algo novo, mas ainda um problema importante na mecânica quântica. Ao longo do tempo houve várias tentativas de se descrever o comportamento de sistemas microscópicos, uma das mais primordiais e importantes é a equação de Boltzmann, que visa a função de distribuição de uma partícula, assumindo a hipótese do caos molecular; outra tentativa foi a 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

mestra, na qual estamos particularmente interessados neste trabalho.

Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc e Grynberg (COHEN-TANNOUDJI; DUPONT-ROC; GRYNBERG, 1992) derivaram perturbativamente a equação mestra para um sistema com um espectro denso de energia, 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 2, apresentaremos a teoria da medida no qual introduzimos uma forma “natural” de abordar sistemas quânticos, apresenta por Schwinger (SCHWINGER, 1959, 1970), em 1959; a teoria é baseada na ideia de se efetuar medidas seletivas sobre um ensemble de sistemas. Mostraremos a construção axiomática da teoria e, por fim, construiremos, de maneira heurística, um estado térmico. No Capítulo 3, procedemos à construção dos estados térmicos da TFD na representação de número, apresentando exemplos simples, indicando, com as generalizações adequadas, que é possível estender nossos resultados a teorias de campo, tratando o exemplo do campo escalar livre.

A seguir, no Capítulo 4, construiremos a equação mestra a partir da equação de Von Neumann na aproximação *coarse-grained* e introduziremos a função de correlação de dois pontos que descreve o comportamento do *reservoir*. No Capítulo 5 aplicaremos a equação mestra térmica para um oscilador que descreve uma partícula browniana em interação com um conjunto de osciladores e para um oscilador fermiônico na presença de um banho térmico fermiônico.

No último capítulo faremos algumas considerações finais, apontando para perspectivas de continuação deste trabalho.

2 TEORIA DA MEDIDA

A teoria da medida clássica está implicitamente baseada na ideia de que a interação entre o sistema físico e o aparelho de medida possa ser feita arbitrariamente pequena, de tal forma que se possa falar de uma medida idealizada, na qual não se perturbem as propriedades do sistema ou estas possam ser exatamente compensadas. Porém, é uma característica dos sistemas quânticos que a interação entre sistema e instrumento não pode ser ignorada ou compensada, devido ao seu caráter probabilístico. Assim, a medida de uma propriedade pode produzir mudanças incontroláveis nos valores previamente atribuídos às demais propriedades.

Seja um sistema físico ideal, no qual qualquer observável A assumira 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

$$\sum_{a'} M(a') = 1, \quad (2.1)$$

$$M(a')M(a'') = \delta(a', a'') M(a'), \quad (2.2)$$

onde

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

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 ,

$$M(a'_1, a'_2) = M(a'_1)M(a'_2) = M(a'_2)M(a'_1).$$

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 . O símbolo de medida

$$M(a') = \prod_{i=1}^k M(a'_i)$$

descreve então uma medida completa, tal que os sistemas escolhidos possuem valores definidos para o número máximo de atributos. Um tipo de medida mais geral 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

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

nota-se, do ordenamento das medidas, que a multiplicação de símbolos de medida é não comutativa. Além do conjunto A , podemos formar outros conjuntos completos B, C, \dots mutuamente incompatíveis; para cada escolha de observáveis não interferentes existe um conjunto de medidas $M(b', b''), M(c', c''), \dots$. Assim, a medida mais geral possível envolve dois conjuntos de observáveis incompatíveis. 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

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

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

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

Pode-se escrever com a ajuda da propriedade para soma de símbolos (2.1)

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

e similarmente

$$M(a', b') = \sum_{c'} \langle b' | c' \rangle M(a', c'), \quad (2.3)$$

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

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

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

$$\langle a' | b' \rangle = \text{tr} [M(b', a')]. \quad (2.4)$$

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 (2.1) e (2.4) pode-se determinar a forma de um operador X na representação dos símbolos de medida,

$$X = \sum_{a'b'} M(a') X M(b') = \sum_{a'b'} \langle a' | X | b' \rangle M(a', b'), \quad (2.5)$$

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

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

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

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

$$\langle A \rangle = \sum_{b'} \pi(b') \langle A \rangle_{b'} = \sum_{b'} \pi(b') \text{tr} [AM(b')] = \text{Tr} [\rho A], \quad (2.6)$$

onde define-se o operador densidade

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

Para um estado puro $|b''\rangle$

$$\pi(b') = \delta(b', b''),$$

de modo que

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

de onde segue imediatamente que, para um estado puro,

$$\rho = \rho^2.$$

No próximo capítulo será estudado de forma detalhada o formalismo no qual são introduzidos estados térmicos. Por consistência, mostraremos a seguir que tais estados 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 (2.3), a expressão para ρ torna-se (TOMAZELLI; GOMES, 2009)

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

Para tratarmos de sistemas em equilíbrio térmico, introduzimos um sistema auxiliar, duplicando os graus de liberdade do sistema original, através da relação

$$\delta(n, m) = \delta(\tilde{n}, \tilde{m});$$

logo

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{n,m} \sqrt{\pi(E_n) \pi(E_m)} \delta(n, m) M(n, m) \\ &= \sum_{n,m} \sqrt{\pi(E_n) \pi(E_m)} M(n, \tilde{n}) M(\tilde{m}, m) \end{aligned}$$

$$= \left[\sum_n \sqrt{\pi(E_n)} M(n, \tilde{n}) \right] \left[\sum_m \sqrt{\pi(E_m)} M(\tilde{m}, m) \right] \equiv |0_{(\beta)}\rangle \langle 0_{(\beta)}|,$$

de modo que

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

Para um dado observável, temos então

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

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

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

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 último, se reconhecermos que, para um sistema em equilíbrio térmico,

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

resulta

$$|0_{(\beta)}\rangle = Z^{-\frac{1}{2}} \sum_n e^{-\frac{1}{2}\beta E_n} |n, \tilde{n}\rangle. \quad (2.7)$$

De fato, a expressão anterior 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. Podem-se relacionar os símbolos de medida com os

operadores da mecânica estatística, os quais serão amplamente utilizados nos próximos capítulos. Porém, por conveniência e facilidade de interpretação, será utilizada a notação convencional, lembrando sempre que se pode retornar aos símbolos de medida através das relações anteriores.

3 ESTATÍSTICA QUÂNTICA

Neste capítulo estudaremos o formalismo introduzido por Umezawa e Takahashi (TAKAHASHI; UMEZAWA, 1975) para uma teoria de campo térmica de tempo real; na seção 3.1 desenvolveremos o formalismo via valor esperado no vácuo; na seção 3.2 mostraremos como podemos alcançar estados térmicos através de uma transformação de Bogoliubov; por último, na seção 3.3 implementaremos o formalismo no caso de um campo escalar livre.

3.1 THERMOFIELD DYNAMICS

Para um sistema quântico em equilíbrio térmico a temperatura T , no ensemble canônico, a média estatística de um observável A , é definida como

$$\langle A \rangle \equiv Z^{-1} Tr [A e^{-\beta H}], \quad (3.1.1)$$

onde

$$\begin{aligned} Z &= Tr [e^{-\beta H}], \\ \beta &= (k_B T)^{-1}, \end{aligned}$$

sendo H o hamiltoniano total do sistema, Z a função de partição e k_B a constante de Boltzmann. Busca-se construir uma representação na qual os valores esperados em um vácuo térmico coincidam com as médias estatísticas no ensemble

$$\langle 0_{(\beta)} | A | 0_{(\beta)} \rangle = \langle A \rangle; \quad (3.1.2)$$

definida a atuação nos estados ortonormais

$$\begin{aligned} H |n\rangle &= E_n |n\rangle, \\ \langle m | n \rangle &= \delta_{mn}, \end{aligned}$$

a equação para as médias estatísticas (3.1.1), e conseqüentemente o valor esperado (3.1.2), torna-se

$$\langle 0_{(\beta)} | A | 0_{(\beta)} \rangle = Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle m | A | n \rangle \delta_{mn}. \quad (3.1.3)$$

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

dos autoestados $|n\rangle$

$$|0_{(\beta)}\rangle = \sum_n f_n(\beta) |n\rangle; \quad (3.1.4)$$

substituindo (3.1.4) em (3.1.3) e comparando ambos membros da equação resultante, devemos ter necessariamente

$$f_m^*(\beta) f_n(\beta) = Z^{-1} e^{-\beta E_n} \delta_{mn}. \quad (3.1.5)$$

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, 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

$$\begin{aligned} \tilde{H} |\tilde{n}\rangle &= E_n |\tilde{n}\rangle, \\ \langle \tilde{m} | \tilde{n} \rangle &= \delta_{mn}, \end{aligned}$$

onde os autovalores E_n são, por definição, iguais aos autovalores do sistema original. Da forma da equação (3.1.5) conclui-se que

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

substituindo na expressão (3.1.4) para $|0_{(\beta)}\rangle$ resulta

$$|0_{(\beta)}\rangle = Z^{-\frac{1}{2}} \sum_n e^{-\frac{1}{2}\beta E_n} |n, \tilde{n}\rangle, \quad (3.1.6)$$

onde

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

A expressão acima é equivalente a (2.7) encontrada no capítulo anterior. 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 (3.1.3) 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

$$A \equiv A \otimes \mathbb{I},$$

$$\tilde{A} \equiv \mathbb{I} \otimes \tilde{A}.$$

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

$$\widetilde{AB} = \tilde{A}\tilde{B} \quad (3.1.7)$$

$$(\alpha \widetilde{A} + \beta \widetilde{B}) = \alpha^* \tilde{A} + \beta^* \tilde{B}; \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad (3.1.8)$$

$$\tilde{A}^\dagger = (\tilde{A})^\dagger \quad (3.1.9)$$

$$\tilde{\tilde{A}} = \sigma A, \quad (3.1.10)$$

onde

$$\sigma = \begin{cases} 1, & \text{p/ bósons} \\ -1, & \text{p/ férmions} \end{cases}.$$

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 posteriormente na seção 3.2. A regra (3.1.7) pode ser aplicada ao produto $NM(n, \tilde{n}) \equiv N|n, \tilde{n}\rangle$, no contexto da teoria da medida, fornecendo

$$[NM(n, \tilde{n})]^\sim = \tilde{N}\tilde{M}(n, \tilde{n}) = \tilde{N}M(\tilde{n}, n) = \tilde{N}|\tilde{n}\rangle \langle n|, \quad (3.1.11)$$

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 emerge, 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,

$$M(n, \tilde{n}) = M(\tilde{n}, n). \quad (3.1.12)$$

Segue então das equações (3.1.11) e (3.1.12) que

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

Esta última igualdade é decorrência da propriedade (3.1.7) estendida à teoria da medida, e não uma imposição adicional, como apresentado originalmente (TAKAHASHI; UMEZAWA, 1975). Além destas, da separabilidade dos estados, resulta

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

onde o sinal $(-)$ representa o comutador e $(+)$ o anticomutador, a serem convenientemente utilizados conforme a álgebra tratada seja bosônica ou fermiônica. Agora, será aplicado o formalismo desenvolvido para o caso de osciladores bosônicos e fermiônicos. Apesar da simplicidade dos sistemas, estes serão de utilidade no tratamento de campos a temperatura finita e no estudo de interação com um *reservoir* térmico. Faz-se um breve resumo da teoria espectral para operadores limitados inferiormente; definido o operador N e sua atuação no estado ortonormalizado $|n\rangle$ pertencente ao espaço \mathfrak{H} ,

$$N \equiv a^{\dagger} a,$$

$$N |n\rangle = n |n\rangle. \quad (3.1.13)$$

De (3.1.13) resulta que a atuação individual dos operadores a e a^{\dagger} , devidamente normalizada, deve ser

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle,$$

$$a^{\dagger} |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle.$$

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

$$a |0\rangle = 0; \quad (3.1.14)$$

assim, pode-se construir um estado $|n\rangle$ a partir de sucessivas atuações

de a^\dagger sobre o estado fundamental,

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (3.1.15)$$

3.1.1 Caso Bosônico

Um oscilador harmônico de frequência ω é descrito pelo hamiltoniano

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

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

$$[a, a^\dagger] = 1,$$

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

Da equação (3.1.13) 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

$$Z = Tr [e^{-\beta H}] = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} = \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad (3.1.16)$$

onde foi utilizada a soma de uma série geométrica,

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}. \quad (3.1.17)$$

O mesmo resultado para a função de partição (3.1.16) pode ser encontrado se exigirmos a normalização do estado $|0_{(\beta)}\rangle$; assim sendo, o estado já está normalizado, por construção. A expressão (3.1.6) 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 (3.1.15) é igualmente válida para os estados $|\tilde{n}\rangle$ do espaço dual,

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

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

$$|0_{(\beta)}\rangle = (1 - e^{-\beta\hbar\omega})^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega n} \frac{(a^\dagger)^n (\tilde{a}^\dagger)^n}{n!} |0, \tilde{0}\rangle. \quad (3.1.18)$$

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,

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

A partir da soma da série geométrica (3.1.17) pode-se obter, por diferenciação,

$$\sum_{n=0}^{\infty} n x^n = x \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{x}{(1-x)^2},$$

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

$$\langle 0_{(\beta)} | N | 0_{(\beta)} \rangle = (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1}. \quad (3.1.19)$$

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

3.1.2 Caso Fermiônico

Um oscilador fermiônico de frequência ω é descrito pelo hamiltoniano

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

onde os operadores fermiônicos devem satisfazer a álgebra

$$[a, a^\dagger]_+ = 1,$$

$$[a, a]_+ = [a^\dagger, a^\dagger]_+ = 0,$$

a qual impõe a condição

$$[a^\dagger, a^\dagger]_+ |0\rangle = (a^\dagger)^2 |0\rangle = a^\dagger |1\rangle = 0.$$

Esta expressão mostra que os únicos estados acessíveis são $|0\rangle$ e $|1\rangle$, o que corresponde ao princípio de exclusão de Pauli. Calculando a função de partição, temos

$$Z = \sum_{n=0}^1 e^{-\beta\hbar\omega(n-\frac{1}{2})} = e^{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega} + e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega} = 2\cosh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right),$$

de onde resulta o vácuo térmico

$$\begin{aligned} |0_{(\beta)}\rangle &= [2\cosh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega)]^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^1 e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega(n-\frac{1}{2})} |n, \tilde{n}\rangle \\ &= [2\cosh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega)]^{-\frac{1}{2}} \left(e^{\frac{1}{4}\beta\hbar\omega} + e^{-\frac{1}{4}\beta\hbar\omega} a^\dagger \tilde{a}^\dagger \right) |0, 0\rangle. \end{aligned} \quad (3.1.20)$$

A média estatística do operador número N é

$$\begin{aligned} \langle 0_{(\beta)} | N | 0_{(\beta)} \rangle &= [2\cosh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega)]^{-1} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega} \langle \tilde{1}, 1 | N | 1, \tilde{1} \rangle \\ &= (e^{\beta\hbar\omega} + 1)^{-1}. \end{aligned}$$

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.

3.2 TRANSFORMAÇÕES DE BOGOLIUBOV

Nesta seção mostraremos que o processo de termalização pode ser igualmente alcançado através de uma transformação de Bogoliubov, se as relações entre estas forem corretamente estabelecidas. 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

$$\alpha |0_{(\beta)}\rangle = 0, \quad (3.2.1)$$

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

$$\begin{aligned} \alpha &= U(\theta) a U^{-1}(\theta), \\ \alpha^\dagger &= U(\theta) a^\dagger U^{-1}(\theta), \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

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

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

sendo $G(\theta)$ o gerador da transformação e $\theta \equiv \theta(\beta)$ uma função da temperatura. Utilizando a expressão (3.2.2) pode-se relacionar o estado $|0_{(\beta)}\rangle$ com o estado $|0\rangle \equiv |0, \tilde{0}\rangle$, 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 $|n, \tilde{n}\rangle$ pelo mesmo símbolo $|0\rangle$, ao invés da notação $|0\rangle$ usualmente empregada. Atuando a expressão acima no estado $|0\rangle$ e comparando com (3.2.1), 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

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

3.2.1 Estados *Squeezed*

Naturalmente, os vácuos variam 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

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle \leq \frac{\hbar}{2}$$

ou

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle \leq \frac{\hbar}{2}.$$

O gerador responsável por incorporar tal restrição é o bilinear

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

onde θ é positivo definido; substituindo na transformação (3.2.2) encontra-se

$$\alpha = e^{-\frac{\theta}{2}(a^2 - a^{\dagger 2})} a e^{\frac{\theta}{2}(a^2 - a^{\dagger 2})}. \quad (3.2.3)$$

Utilizando a relação de Baker-Campbell-Hausdorff

$$e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = B + \lambda [A, B] + \frac{1}{2!} \lambda^2 [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} \lambda^3 [A, [A, [A, B]]] + \dots, \quad (3.2.4)$$

obtem-se para α em (3.2.3)

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

calculando os comutadores

$$[(a^2 - a^{\dagger 2}), a] = -[a^{\dagger 2}, a] = 2a^\dagger,$$

$$[(a^2 - a^{\dagger 2}), a^\dagger] = [a^2, a^\dagger] = 2a,$$

encontra-se a forma linear do operador de aniquilação α , dado por

$$\begin{aligned}\alpha &= \left(1 + \frac{1}{2!}(-\theta)^2 + \frac{1}{4!}(-\theta)^4 + \dots\right) a - \left(\theta + \frac{1}{3!}\theta^3 + \frac{1}{5!}\theta^5 + \dots\right) a^\dagger \\ &= \cosh(\theta) a - \sinh(\theta) a^\dagger.\end{aligned}$$

Analogamente, encontra-se o de criação α^\dagger ,

$$\alpha = \cosh(\theta) a - \sinh(\theta) a^\dagger, \quad (3.2.5)$$

$$\alpha^\dagger = \cosh(\theta) a^\dagger - \sinh(\theta) a. \quad (3.2.6)$$

Tais operadores 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,

$$U(\theta) = e^{\frac{\theta}{2}(a^{\dagger 2} - a^2)} = e^{\frac{1}{2}\tanh(\theta)a^{\dagger 2}} e^{\frac{1}{4}\ln[\cosh(\theta)][a^{\dagger 2}, a^2]} e^{\frac{1}{2}\tanh(\theta)a^2}. \quad (3.2.7)$$

A dedução desta última equação pode ser encontrada no apêndice A. Expandindo o termo à direita em série de potências e atuando em $|0\rangle$, resulta

$$|0_{(\beta)}\rangle = U(\theta) |0\rangle = e^{\frac{1}{2}\tanh(\theta)a^{\dagger 2}} e^{\frac{1}{4}\ln[\cosh(\theta)][a^{\dagger 2}, a^2]} |0\rangle;$$

como

$$[a^{\dagger 2}, a^2]^n |0\rangle = (-2)^n |0\rangle,$$

segue que

$$|0_{(\beta)}\rangle = e^{-\frac{1}{2}\ln[\cosh(\theta)]} e^{\frac{1}{2}\tanh(\theta)a^{\dagger 2}} |0\rangle. \quad (3.2.8)$$

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

3.2.2 Estados *Squeezed* 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

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

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

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

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

Procedemos de maneira análoga àquela da seção anterior a fim de obter as equações (3.2.5) e (3.2.6) para α e α^\dagger ; efetuando a transformação acima se obtém para a expansão

$$\alpha = a - \theta [(a\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger), a] + \frac{1}{2!} (-\theta)^2 [(a\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger), [(a\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger), a]] + \dots \quad (3.2.9)$$

Substituindo nesta expressão os comutadores

$$[(a\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger), a] = \tilde{a}^\dagger \quad (3.2.10)$$

e

$$[(a\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger), \tilde{a}^\dagger] = a, \quad (3.2.11)$$

resulta

$$\begin{aligned} \alpha &= \left(1 + \frac{1}{2!} (-\theta)^2 + \frac{1}{4!} (-\theta)^4 + \dots\right) a - \left(\theta + \frac{1}{3!} \theta^3 + \frac{1}{5!} \theta^5 + \dots\right) a^\dagger \\ &= \cosh(\theta) a - \sinh(\theta) \tilde{a}^\dagger. \end{aligned}$$

Analogamente, obtém-se os demais operadores de criação e aniquilação, listados abaixo:

$$\alpha = \cosh(\theta) a - \sinh(\theta) \tilde{a}^\dagger, \quad (3.2.12)$$

$$\alpha^\dagger = \cosh(\theta) a^\dagger - \sinh(\theta) \tilde{a}, \quad (3.2.13)$$

$$\tilde{\alpha} = \cosh(\theta) \tilde{a} - \sinh(\theta) a^\dagger, \quad (3.2.14)$$

$$\tilde{\alpha}^\dagger = \cosh(\theta) \tilde{a}^\dagger - \sinh(\theta) a. \quad (3.2.15)$$

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

$$|0_{(\beta)}\rangle = e^{-\ln[\cosh(\theta)]} e^{\tanh(\theta) a^\dagger \tilde{a}^\dagger} |0, \tilde{0}\rangle. \quad (3.2.16)$$

O vácuo (3.2.16) é um condensado de pares $a\tilde{a}$; devido à sua estrutura, o vácuo é, então, invariante frente a conjugações til

$$|0_{(\beta)}\rangle^{\sim} = |0_{(\beta)}\rangle,$$

o que está de acordo com o discutido na seção 3.1, se considerarmos o vácuo térmico como uma combinação linear de símbolos de medida. Este também apresenta uma estrutura similar ao estado encontrado na seção anterior para o caso do oscilador bosônico (3.1.18). Comparando-os,

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

resultam as relações

$$\begin{aligned} \tanh(\theta) &= e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}, \\ \cosh(\theta) &= (1 - e^{-\beta\hbar\omega})^{-\frac{1}{2}}, \\ \sinh(\theta) &= (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-\frac{1}{2}}, \end{aligned} \tag{3.2.17}$$

possibilitando o mapeamento entre os dois formalismos. Por último, atuando α e $\tilde{\alpha}$ no vácuo $|0_{(\beta)}\rangle$, resulta de (3.2.12) e (3.2.14)

$$\begin{aligned} a^{\dagger} |0_{(\beta)}\rangle &= \tanh(\theta)^{-1} \tilde{a} |0_{(\beta)}\rangle, \\ \tilde{a}^{\dagger} |0_{(\beta)}\rangle &= \tanh(\theta)^{-1} a |0_{(\beta)}\rangle. \end{aligned} \tag{3.2.18}$$

Substituindo em (3.2.13) e (3.2.15), obtém-se

$$\begin{aligned} \alpha^{\dagger} |0_{(\beta)}\rangle &= \sinh(\theta)^{-1} \tilde{a} |0_{(\beta)}\rangle = \cosh(\theta)^{-1} a^{\dagger} |0_{(\beta)}\rangle, \\ \tilde{\alpha}^{\dagger} |0_{(\beta)}\rangle &= \sinh(\theta)^{-1} a |0_{(\beta)}\rangle = \cosh(\theta)^{-1} \tilde{a}^{\dagger} |0_{(\beta)}\rangle. \end{aligned} \tag{3.2.19}$$

Das relações (3.2.18) e (3.2.19) conclui-se que as partículas do espaço dual podem ser interpretadas como “buracos”; as constantes de normalização presentes em (3.2.19) estão relacionadas com o fator de Boltzmann através das relações (3.2.17), o que é característico de processos quânticos onde se adiciona uma partícula a um sistema que contém partículas em equilíbrio térmico.

Neste ponto, é oportuno invocarmos um resultado da teoria dos

operadores lineares, conhecido como II Lema de Schur:

Lema. *Seja A um operador linear, definido sobre o espaço gerado pelos autoestados do operador número N . Se*

$$[A, a] = 0 = [A, a^\dagger],$$

então

$$A = \alpha \mathbb{I}, \quad \alpha \in \mathbb{C}.$$

De acordo com o II lema de Schur, não existem subespaços de estados na representação de número que sejam invariantes sob a ação dos operadores escada e quaisquer representações de número, construídas a partir de um *mesmo* estado fundamental (ou “vácuo”) através dos operadores de levantamento, são equivalentes sob transformações unitárias. Como o estado fundamental do sistema auxiliar distingue-se do respectivo estado associado ao sistema físico, o mesmo pertence a outro espaço de estados, construídos através da atuação de novos operadores de levantamento, cuja representação também é irreduzível; assim, a representação $|n, \tilde{n}\rangle$ constitui uma representação redutível a um dos subespaços gerados por $|0\rangle$ ou $|\tilde{0}\rangle$.

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 irreduzível, inequivalente à representação à qual pertence o dubleto $|n, \tilde{n}\rangle$.

3.2.3 Estados *Squeezed* Fermiônicos de Dois Modos

Repetimos o estudo da seção anterior para o caso fermiônico, respeitando agora a álgebra

$$[a, a^\dagger]_+ = [\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger]_+ = 1,$$

$$[a, \tilde{a}]_+ = [a, \tilde{a}^\dagger]_+ = 0.$$

A transformação de Bogoliubov assume a mesma forma (3.2.9); assim, para encontrar α devemos resolver os comutadores em termos dos anticomutadores, o que pode ser alcançado utilizando a relação

$$[AB, C] = A[B, C]_+ - [A, C]_+ B.$$

As expressões para os comutadores (3.2.10) e (3.2.11) tornam-se

$$[(a\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger), a] = [\tilde{a}^\dagger, a]_+ a^\dagger - \tilde{a}^\dagger [a^\dagger, a]_+ = -\tilde{a}^\dagger,$$

$$[(a\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger), -\tilde{a}^\dagger] = [a, \tilde{a}^\dagger]_+ \tilde{a} - a[\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger]_+ = -a.$$

Substituindo estes últimos na expansão (3.2.9) encontra-se α e, por conseguinte, os demais operadores

$$\alpha = \cos(\theta) a + \sin(\theta) \tilde{a}^\dagger,$$

$$\alpha^\dagger = \cos(\theta) a^\dagger + \sin(\theta) \tilde{a},$$

$$\tilde{\alpha} = \cos(\theta) \tilde{a} - \sin(\theta) a^\dagger,$$

$$\tilde{\alpha}^\dagger = \cos(\theta) \tilde{a}^\dagger - \sin(\theta) a.$$

Para calcular $|0_{(\beta)}\rangle$ expande-se a exponencial $U(\theta)$ em série de potências, atuando sobre o estado $|0\rangle$,

$$|0_{(\beta)}\rangle = e^{-\theta(a\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)} |0, \tilde{0}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \theta^n (\tilde{a}^\dagger a^\dagger - a\tilde{a})^n |0, \tilde{0}\rangle. \quad (3.2.20)$$

Calculando as primeiras atuações, reconhecemos o padrão

$$(\tilde{a}^\dagger a^\dagger - a\tilde{a}) |0, \tilde{0}\rangle = \tilde{a}^\dagger a^\dagger |0, \tilde{0}\rangle,$$

$$(\tilde{a}^\dagger a^\dagger - a\tilde{a})^2 |0, \tilde{0}\rangle = -|0, \tilde{0}\rangle,$$

$$(\tilde{a}^\dagger a^\dagger - a\tilde{a})^3 |0, \tilde{0}\rangle = -\tilde{a}^\dagger a^\dagger |0, \tilde{0}\rangle,$$

$$(\tilde{a}^\dagger a^\dagger - a\tilde{a})^4 |0, \tilde{0}\rangle = |0, \tilde{0}\rangle.$$

Substituindo em (3.2.20), obtém-se

$$|0_{(\beta)}\rangle = [\cos(\theta) + \sin(\theta)\tilde{a}^\dagger a^\dagger] |0, \tilde{0}\rangle. \quad (3.2.21)$$

A expressão para o vácuo (3.2.21) mostra que este é um condensado fermiônico de pares $a\tilde{a}$; da mesma forma, comparando com o

estado fermiônico (3.1.20), tem-se

$$\cos(\theta) + \sin(\theta)\tilde{a}^\dagger a^\dagger = \left[2\cosh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right) \right]^{-\frac{1}{2}} \left(e^{\frac{1}{4}\beta\hbar\omega} + e^{-\frac{1}{4}\beta\hbar\omega} a^\dagger \tilde{a}^\dagger \right),$$

resultando nas relações

$$\begin{aligned} \cos(\theta) &= (1 + e^{-\beta\hbar\omega})^{-\frac{1}{2}}, \\ \sin(\theta) &= -(1 + e^{\beta\hbar\omega})^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

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.

3.3 O CAMPO ESCALAR LIVRE

Os campos livres podem ser considerados como infinitos osciladores harmônicos, por isso não é de estranhar que o formalismo introduzido anteriormente possa ser estendido a campos. Contudo, devem ser introduzidos campos duais aos originais, os quais possibilitarão termalizar o novo sistema via transformações de Bogoliubov. Exemplificaremos esta ideia para o campo de Klein-Gordon. A equação de Klein-Gordon massiva

$$(\square + m^2)\psi = 0,$$

onde

$$\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2,$$

possui como solução, para um campo real, escrito em termos de operadores de criação e aniquilação

$$\psi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \left[a_k e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + a_k^\dagger e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right], \quad (3.3.1)$$

onde \mathbf{p} e \mathbf{x} são quadrivetores do espaço de Minkowski, tais que, $\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} = -\vec{k}\cdot\vec{x} + k^0 x^0$ e $\omega_k = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$. É necessário dobrar os graus de liberdade do sistema; assim, introduz-se o operador de campo dual $\tilde{\psi}(\mathbf{x})$, que pode ser construído aplicando as regras de conjugação til à

equação (3.3.1),

$$\tilde{\psi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3k}{\sqrt{2\omega_k}} \left[\tilde{a}_k e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + \tilde{a}_k^\dagger e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right].$$

Consegue-se reescrever o operador de campo na forma de dubleto

$$\Psi(\mathbf{x}) \equiv \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{x}) \\ \tilde{\psi}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3k}{\sqrt{2\omega_k}} \left[\begin{pmatrix} a_k \\ \tilde{a}_k^\dagger \end{pmatrix} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + \begin{pmatrix} a_k^\dagger \\ \tilde{a}_k \end{pmatrix} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right].$$

Como visto nas secções anteriores, os operadores a_k estão relacionados linearmente com os operadores α_k . Tal ligação pode ser expressa em termo de uma matriz $A(\theta)$, tal que

$$\begin{pmatrix} a_k \\ \tilde{a}_k^\dagger \end{pmatrix} = A_k(\theta) \begin{pmatrix} \alpha_k \\ \tilde{\alpha}_k^\dagger \end{pmatrix}; \quad (3.3.2)$$

para o caso *squeezed* bosônico essa matriz é

$$A_k(\theta) = \begin{pmatrix} \cosh(\theta_k) & \sinh(\theta_k) \\ \sinh(\theta_k) & \cosh(\theta_k) \end{pmatrix}.$$

Substituindo a_k , dado por (3.3.2), em $\Psi(\mathbf{x})$, obtém-se os operadores de campo dependente da temperatura

$$\Psi(\mathbf{x}, \theta) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3k}{\sqrt{2\omega_k}} A_k(\theta) \left[\begin{pmatrix} \alpha_k \\ \tilde{\alpha}_k^\dagger \end{pmatrix} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + \begin{pmatrix} \alpha_k^\dagger \\ \tilde{\alpha}_k \end{pmatrix} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \right],$$

ou, em termo de frequências positivas e negativas,

$$\Psi(\mathbf{x}, \theta)^+ \equiv \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3k}{\sqrt{2\omega_k}} A_k(\theta) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \begin{pmatrix} \alpha_k \\ \tilde{\alpha}_k^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.3.3)$$

$$\Psi(\mathbf{x}, \theta)^- \equiv \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3k}{\sqrt{2\omega_k}} A_k(\theta) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \begin{pmatrix} \alpha_k^\dagger \\ \tilde{\alpha}_k \end{pmatrix}. \quad (3.3.4)$$

Uma vez encontrados os operadores de campo pode-se calcular, por exemplo, a função de Green de dois pontos a temperatura finita. Definimos o dubleto conjugado

$$[\bar{\Psi}(\mathbf{x}, \theta)]^T \equiv \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{x}) \\ -\tilde{\psi}(\mathbf{x}) \end{pmatrix},$$

e o comutador em termos das componentes

$$\Delta_{xy}^{\mu\xi} \equiv [\Psi(\mathbf{x}, \theta), \bar{\Psi}(\mathbf{y}, \theta)]^{\mu\xi} = \Delta_{xy}^{\mu\xi+} + \Delta_{xy}^{\mu\xi-},$$

onde

$$\Delta_{xy}^{\mu\xi+} = \left[\Psi(\mathbf{x}, \theta)^+, \bar{\Psi}(\mathbf{y}, \theta)^- \right]^{\mu\xi}, \quad (3.3.5)$$

$$\Delta_{xy}^{\mu\xi-} = \left[\Psi(\mathbf{x}, \theta)^-, \bar{\Psi}(\mathbf{y}, \theta)^+ \right]^{\mu\xi}. \quad (3.3.6)$$

As relações de comutação entre os operadores de campo $\alpha_k, \alpha_k^\dagger$, $\tilde{\alpha}_k$ e $\tilde{\alpha}_k^\dagger$ são

$$[\alpha_k, \alpha_q^\dagger] = [\tilde{\alpha}_k, \tilde{\alpha}_q^\dagger] = \delta^3(k - q).$$

A partir de $\Delta_{xy}^{\mu\xi+}$ e $\Delta_{xy}^{\mu\xi-}$, podemos deduzir os propagadores avançado, retardado e de Feynman, definidos como

$$\Delta_{(adv)xy}^{\mu\xi} = -\theta(-\tau) \Delta_{xy}^{\mu\xi+} - \theta(-\tau) \Delta_{xy}^{\mu\xi-},$$

$$\Delta_{(ret)xy}^{\mu\xi} = \theta(\tau) \Delta_{xy}^{\mu\xi+} + \theta(\tau) \Delta_{xy}^{\mu\xi-},$$

$$\Delta_{(F)xy}^{\mu\xi} = \theta(\tau) \Delta_{xy}^{\mu\xi+} - \theta(-\tau) \Delta_{xy}^{\mu\xi-},$$

além do invariante

$$\Delta_{(1)xy}^{\mu\xi} = \Delta_{xy}^{\mu\xi+} - \Delta_{xy}^{\mu\xi-},$$

onde $\theta(\tau)$ é a “função” de Heaviside e $\tau = x_0 - y_0$. Estamos principalmente interessados em $\Delta_{(1)xy}^{\mu\xi}$ e $\Delta_{(ret)xy}^{\mu\xi}$ por estarem relacionados com a correlação simétrica e a susceptibilidade (TOMAZELLI; COSTA, 2003).

4 A EQUAÇÃO MESTRA

Neste capítulo voltaremos nossa atenção ao estudo da evolução dinâmica de um sistema de partículas; na seção 4.1 derivaremos uma equação de operadores para descrever esta evolução; na seção 4.2 projetaremos esta numa base e veremos como as partículas evoluem e, finalmente, na seção 4.3 veremos como um sistema microscópico interage com um *reservoir* contendo um número grande de partículas, possibilitando a incorporação de temperatura através dos resultados obtidos no capítulo 3.

Começaremos introduzindo nosso sistema e as restrições sobre o mesmo, estudando o caso de um pequeno sistema A em interação com um sistema R , o qual deve ser muito maior que A , de forma que não ocorram variações macroscópicas; tais sistemas possuem a característica de apresentar duas escalas de tempo muito diferentes: τ_c , o tempo médio de uma flutuação em R e T_A , o tempo médio de uma variação do sistema A ; exigiremos que o acoplamento seja fraco na escala de τ_c , condição normalmente conhecida como *motional narrowing*.

4.1 EVOLUÇÃO DO SISTEMA A NA REPRESENTAÇÃO DE INTERAÇÃO

O hamiltoniano do sistema $A + R$ na representação de Schrödinger será

$$H^S = H_A^S + H_R^S + V^S, \quad (4.1.1)$$

onde H_A^S é o hamiltoniano do sistema A , H_R^S o hamiltoniano do *reservoir* e V^S a interação entre estes. A equação responsável por descrever a evolução de um sistema em termos do operador densidade, na representação de Schrödinger, é a equação de Von Neumann

$$\frac{d}{dt} \rho^S(t) = \frac{1}{i\hbar} [H^S, \rho^S(t)]. \quad (4.1.2)$$

Porém, é de maior interesse trabalhar na representação de interação de $H_A + H_R$; nesta, se a interação for suficientemente pequena, o operador densidade evoluirá mais lentamente. A representação de interação pode ser alcançada através da transformação unitária

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau (H_A + H_R)}.$$

Com $t_0 = 0$, a equação de Von Neumann (4.1.2) na representação de interação torna-se

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [V(t), \rho(t)], \quad (4.1.3)$$

com

$$\begin{aligned} \rho(t) &= U^{-1}(t) \rho^S(t) U(t), \\ V(t) &= U^{-1}(t) V^S U(t). \end{aligned}$$

Neste ponto, serão introduzidas certas considerações a respeito do sistema, as quais serão de utilidade na resolução da equação (4.1.3). Como mencionado, o sistema é composto pelos subsistemas A e R ; no entanto, algumas vezes é conveniente observar apenas um dos subsistemas, permanecendo o outro inalterado. Tal feito pode ser alcançado introduzindo os operadores densidade reduzidos

$$\begin{aligned} \sigma_A(t) &\equiv Tr_R [\rho(t)], \\ \sigma_R(t) &\equiv Tr_A [\rho(t)], \end{aligned}$$

onde Tr_R e Tr_A representam os traços parciais com respeito a R e A , respectivamente. Assim, σ_A descreve completamente o subsistema A e σ_R o subsistema R . Se os subsistemas estiverem fracamente acoplados, a perturbação ao longo do tempo que A provoca em R , em primeira ordem, é muito pequena e pode ser desconsiderada,

$$\sigma_R(t) \simeq \sigma_R(0) \equiv \sigma_R. \quad (4.1.4)$$

A equação anterior equivale a dizer que o *reservoir* está num estado estacionário e, portanto,

$$[H_R, \sigma_R] = 0.$$

O potencial de interação é separável, possuindo na representação de interação a forma

$$V(t) = -R(t) \otimes A(t). \quad (4.1.5)$$

O valor médio de R^S no subsistema R é, por definição, nulo

$$\langle R^S \rangle = Tr [\sigma_R R^S] = Tr [\sigma_R R(t)] = 0; \quad (4.1.6)$$

da equação acima deduz-se, utilizando a propriedade

$$\text{Tr}_A [A \otimes B] = B \text{Tr} [A], \quad (4.1.7)$$

que

$$\text{Tr}_R [\sigma_R V(t)] = \text{Tr}_R [\sigma_R (-R(t) \otimes A(t))] = -A(t) \text{Tr} [\sigma_R R(t)] = 0. \quad (4.1.8)$$

Devido ao sistema ser fracamente acoplado, na aproximação de *coarse-grained* (COHEN-TANNOUJJI; DUPONT-ROC; GRYNBERG, 1992), $T_A \gg \Delta t \gg \tau_c$, é aceitável assumir que o termo de correlação possa ser desprezado

$$\rho(t) = \sigma_A(t) \otimes \sigma_R(t) + \rho_{cor}(t) \simeq \sigma_A(t) \otimes \sigma_R. \quad (4.1.9)$$

A ideia por trás desta aproximação é que a correlação desaparece depois de um tempo da ordem de τ_c , contribuindo muito fracamente para evolução de σ_A no intervalo $[t, t + \Delta t]$. Dadas estas considerações, pode-se resolver a equação diferencial (4.1.3). Integrando entre t e $t + \Delta t$, temos

$$\rho(t + \Delta t) - \rho(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt' [V(t'), \rho(t')] \quad (4.1.10)$$

e, entre t e t' ,

$$\rho(t') - \rho(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t'} dt'' [V(t''), \rho(t'')]. \quad (4.1.11)$$

Substituindo (4.1.11) em (4.1.10) resulta

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

Tomando o traço parcial com respeito a R , obtém-se

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

onde

$$\Delta\sigma_A(t) = Tr_R[\rho(t + \Delta t)] - Tr_R[\rho(t)];$$

substituindo a aproximação (4.1.9) para $\rho(t)$ na equação (4.1), podemos então escrever

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_A(t) &\simeq \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt' Tr_R[V(t'), \sigma_A(t) \otimes \sigma_R] \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' Tr_R[V(t'), [V(t''), \sigma_A(t'') \otimes \sigma_R]]. \end{aligned}$$

Comparando o primeiro termo à direita na equação anterior com (4.1.8), nota-se que

$$Tr_R[V(t'), \sigma_A(t) \otimes \sigma_R] = Tr_R[V(t') \sigma_R] \sigma_A(t) - \sigma_A(t) Tr_R[\sigma_R V(t')] = 0,$$

fornecendo

$$\Delta\sigma_A(t) \simeq \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' Tr_R[V(t'), [V(t''), \sigma_A(t'') \otimes \sigma_R]]; \quad (4.1.12)$$

substituindo $V(t)$ pela expressão (4.1.5), segue que

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_A(t) &\simeq \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \times \\ &Tr_R[R(t') \otimes A(t'), [R(t'') \otimes A(t''), \sigma_A(t'') \otimes \sigma_R]]. \end{aligned} \quad (4.1.13)$$

Expandindo o comutador acima e definindo a função $g(\tau)$

$$g(\tau) \equiv Tr[\sigma_R R(t') R(t'')], \quad (4.1.14)$$

a equação (4.1.13) assume a forma

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_A(t) &\simeq \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' g(\tau) \times \\ &(A(t') A(t'') \sigma_A(t'') - A(t'') \sigma_A(t'') A(t')) \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' g(-\tau) \times \\ &(\sigma_A(t'') A(t'') A(t') - A(t') \sigma_A(t'') A(t'')). \end{aligned} \quad (4.1.15)$$

A equação anterior representa a variação do subsistema A entre os instantes t e $t + \Delta t$; porém, estamos interessados em sua taxa de

variação. Resgatando a aproximação de *coarse-grained*, $T_A \gg \Delta t \gg \tau_c$, pode-se considerar a taxa de variação $\frac{\Delta\sigma_A(t)}{\Delta t}$ como sendo a taxa instantânea $\frac{d\sigma_A(t)}{dt}$, e interpretá-la como a média da taxa instantânea. De fato

$$\frac{\Delta\sigma_A(t)}{\Delta t} = \frac{\sigma_A(t + \Delta t) - \sigma_A(t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \frac{d\sigma_A(t')}{dt'} dt';$$

para tempos menores que Δt , a aproximação é responsável por suavizar as variações instantâneas. No entanto, caracteriza uma boa aproximação para tempos da ordem de T_R , de modo que a taxa de variação *coarse-grained* resulta

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma_A(t)}{\Delta t} &\simeq \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' g(\tau) \times \\ &\quad (A(t') A(t'') \sigma_A(t'') - A(t'') \sigma_A(t'') A(t')) \\ &\quad + \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' g(-\tau) \times \\ &\quad (\sigma_A(t'') A(t'') A(t') - A(t') \sigma_A(t'') A(t')). \end{aligned} \tag{4.1.16}$$

Para prosseguir e integrar a equação (4.1.16), é necessário saber a forma de $\sigma_A(t'')$. Porém, na aproximação de *coarse-grained*, pode-se substituir $\sigma_A(t'')$ por $\sigma_A(t)$; a validade de tal aproximação será discutida no apêndice C. A seguir, a equação (4.1.16) será projetada na base de autoestados do sistema A .

4.2 PROJETANDO NA BASE DOS AUTOESTADOS

Tomando o valor esperado da equação (4.1.16) entre quaisquer dois estados $\langle a |$ e $| b \rangle$ do sistema A e definida a notação contraída

$$\Delta\sigma_{A_{ab}}(t) \equiv \langle a | \Delta\sigma_A(t) | b \rangle, \tag{4.2.1}$$

a equação (4.1.16) torna-se

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta\sigma_{A_{ab}}(t)}{\Delta t} &\simeq \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \times \\
&\langle a | g(\tau) (A(t') A(t'') \sigma_A(t) - A(t'') \sigma_A(t) A(t')) | b \rangle \\
&+ \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \times \\
&\langle a | g(-\tau) (\sigma_A(t) A(t'') A(t') - A(t') \sigma_A(t) A(t'')) | b \rangle.
\end{aligned} \tag{4.2.2}$$

Os quatro valores esperados presentes na equação (4.2.2) são

$$\begin{aligned}
\langle a | A(t') A(t'') \sigma_A(t) | b \rangle &= \sum_{n,c,d} A_{an}(t') A_{nc}(t'') \sigma_{A_{cd}}(t) \delta_{db}, \\
\langle a | A(t'') \sigma_A(t) A(t') | b \rangle &= \sum_{c,d} A_{ac}(t'') A_{db}(t') \sigma_{A_{cd}}(t), \\
\langle a | \sigma_A(t) A(t'') A(t') | b \rangle &= \sum_{n,c,d} A_{dn}(t'') A_{nb}(t') \sigma_{A_{cd}}(t) \delta_{ac}, \\
\langle a | A(t') \sigma_A(t) A(t'') | b \rangle &= \sum_{c,d} A_{ac}(t') A_{db}(t'') \sigma_{A_{cd}}(t),
\end{aligned}$$

onde foram introduzidas, convenientemente, bases completas e adotada a notação contraída. Atuando na base dos autoestados

$$H_A |n\rangle = E_A |n\rangle,$$

é possível reescrever operador $A_{ab}(t)$ como

$$A_{ab}(t) = \langle a | e^{\frac{i}{\hbar} H_A t} A^S e^{-\frac{i}{\hbar} H_A t} | b \rangle = e^{i(\omega_a - \omega_b)t} \langle a | A^S | b \rangle = e^{i\omega_{ab}t} A_{ab},$$

eliminando assim a dependência temporal dos operadores. Os valores esperados tornam-se

$$\begin{aligned}
\langle a | A(t') A(t'') \sigma_A(t) | b \rangle &= \sum_{n,c,d} e^{i\omega_{an}t' + i\omega_{nc}t''} A_{an} A_{nc} \sigma_{A_{cd}}(t) \delta_{db}, \\
\langle a | A(t'') \sigma_A(t) A(t') | b \rangle &= \sum_{c,d} e^{i\omega_{ab}t' + i\omega_{ac}t''} A_{ac} A_{db} \sigma_{A_{cd}}(t), \\
\langle a | \sigma_A(t) A(t'') A(t') | b \rangle &= \sum_{n,c,d} e^{i\omega_{nb}t' + i\omega_{dn}t''} A_{dn} A_{nb} \sigma_{A_{cd}}(t) \delta_{ac}, \\
\langle a | A(t') \sigma_A(t) A(t'') | b \rangle &= \sum_{c,d} e^{i\omega_{ac}t' + i\omega_{db}t''} A_{ac} A_{db} \sigma_{A_{cd}}(t).
\end{aligned} \tag{4.2.3}$$

Admitiremos que a função $g(\tau)$ possa ser escrita como

$$g(\tau) = \sum_{i,j} e^{i\omega_{ij}\tau} K_{ij} \quad (4.2.4)$$

e na seção seguinte mostraremos que, de fato, a dependência temporal da função $g(\tau)$ é exponencial. Substituindo os valores esperados (4.2.3) e $g(\tau)$, dado por (4.2.4), em (4.2.2) e reorganizando, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma_{A_{ab}}(t)}{\Delta t} &\simeq \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_{i,j,c,d,n} K_{ij} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \sigma_{A_{cd}}(t) \times \\ &\left[e^{i(\omega_{an}+\omega_{ij})t'} e^{i(\omega_{nc}-\omega_{ij})t''} A_{an}A_{nc}\delta_{db} - e^{i(\omega_{db}+\omega_{ij})t'} e^{i(\omega_{ac}-\omega_{ij})t''} A_{ac}A_{db} \right. \\ &\left. + e^{i(\omega_{nb}-\omega_{ij})t'} e^{i(\omega_{dn}+\omega_{ij})t''} A_{dn}A_{nb}\delta_{ac} - e^{i(\omega_{ac}-\omega_{ij})t'+i(\omega_{db}+\omega_{ij})t''} A_{ac}A_{db} \right]. \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

Por último, resolvemos as integrais, as quais podem ser divididas em quatro integrais do tipo

$$\begin{aligned} &\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{i(\omega_{an}+\omega_{ij})t'} e^{i(\omega_{nc}-\omega_{ij})t''} A_{an}A_{nc}\delta_{db} = \\ &- \delta_{db}A_{an}A_{nc}(\omega_{nc}-\omega_{ij})^{-1}(\omega_{an}+\omega_{nc})^{-1} \left(e^{i(\omega_{an}+\omega_{nc})(t+\Delta t)} - e^{i(\omega_{an}+\omega_{nc})t} \right) \\ &+ \delta_{db}A_{an}A_{nc}(\omega_{nc}-\omega_{ij})^{-1}(\omega_{an}+\omega_{ij})^{-1} e^{i(\omega_{nc}-\omega_{ij})t} \times \\ &\left(e^{i(\omega_{an}+\omega_{ij})(t+\Delta t)} - e^{i(\omega_{an}+\omega_{ij})t} \right). \end{aligned}$$

Somando e simplificando todas as contribuições, e substituindo na equação (4.2.5), obtém-se a equação para a evolução do sistema A na base dos autoestados na representação de interação

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta \sigma_{A_{ab}}(t)}{\Delta t} &\simeq \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_{i,j,c,d,n} K_{ij} \sigma_{A_{cd}}(t) \left\{ A_{ac} A_{db} (\omega_{ac} - \omega_{ij})^{-1} \times \right. \\
&e^{i(\omega_{ac} + \omega_{db})t} (\omega_{db} + \omega_{ij})^{-1} \left[e^{i(\omega_{ac} + \omega_{db})\Delta t} - e^{i(\omega_{db} + \omega_{ij})\Delta t} - e^{i(\omega_{ac} - \omega_{ij})\Delta t} + 1 \right] \\
&- \delta_{ac} A_{dn} A_{nb} (\omega_{dn} + \omega_{ij})^{-1} e^{i(\omega_{nb} + \omega_{dn})t} (\omega_{nb} + \omega_{dn})^{-1} (e^{i(\omega_{nb} + \omega_{dn})\Delta t} - 1) \\
&+ \delta_{ac} A_{dn} A_{nb} (\omega_{dn} + \omega_{ij})^{-1} e^{i(\omega_{nb} + \omega_{dn})t} (\omega_{nb} - \omega_{ij})^{-1} (e^{i(\omega_{nb} - \omega_{ij})\Delta t} - 1) \\
&- \delta_{db} A_{an} A_{nc} (\omega_{nc} - \omega_{ij})^{-1} e^{i(\omega_{nc} + \omega_{an})t} (\omega_{an} + \omega_{nc})^{-1} (e^{i(\omega_{an} + \omega_{nc})\Delta t} - 1) \\
&\left. + \delta_{db} A_{an} A_{nc} (\omega_{nc} - \omega_{ij})^{-1} e^{i(\omega_{nc} + \omega_{an})t} (\omega_{an} + \omega_{ij})^{-1} (e^{i(\omega_{an} + \omega_{ij})\Delta t} - 1) \right\}. \tag{4.2.6}
\end{aligned}$$

A equação anterior, apesar de correta é de difícil interpretação física. Para extrair informações a partir da mesma, será estudado no capítulo 5 o caso de um oscilador harmônico acoplado a um *reservoir*. A seguir, exibiremos o comportamento da função $g(\tau)$

4.3 FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DE DOIS PONTOS TÉRMICA

A função $g(\tau)$ dada por (4.1.14) é de máxima importância, pois é responsável por incorporar a informação a respeito do sistema R e, por conseguinte, da temperatura. Assim, utilizando-se os resultados encontrados na seção 3.1, pode-se construir uma função de correlação dependente de temperatura $g(\tau, \beta)$. Reescrevendo $g(\tau)$ como

$$g(t', t'') = Tr [\sigma_R R(t') R(t'')] = Tr \left[\sigma_R e^{\frac{i}{\hbar} H_{R\tau}} R^S e^{-\frac{i}{\hbar} H_{R\tau}} R^S \right] = Tr [\sigma_R R(\tau) R], \tag{4.3.1}$$

onde $\tau = t' - t''$, e utilizando o operador densidade térmico

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

obtém-se a função de correlação dependente de temperatura

$$g(\tau, \beta) = Tr [|0_{(\beta)}\rangle \langle 0_{(\beta)}| R(\tau) R] = \langle 0_{(\beta)} | R(\tau) R | 0_{(\beta)} \rangle. \tag{4.3.2}$$

Substituindo o vácuo térmico (3.1.6), obtém-se

$$g(\tau, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{n', n} e^{-\frac{1}{2}\beta(E_{n'} + E_n)} \langle \tilde{n}', n' | R(\tau) R | n, \tilde{n} \rangle, \quad (4.3.3)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \tilde{n}', n' | R(\tau) R | n, \tilde{n} \rangle &= \langle n' | R(\tau) R | n \rangle \delta_{n' n} \\ &= \delta_{n' n} \sum_m \langle n' | R^S | m \rangle \langle m | R^S | n \rangle e^{i(\omega_{n'} - \omega_m)\tau}, \end{aligned}$$

de modo que a equação (4.3.3) para $g(\tau, \beta)$ se torna

$$g(\tau, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{m, n} e^{-\beta E_n} \langle n | R^S | m \rangle \langle m | R^S | n \rangle e^{i(\omega_n - \omega_m)\tau},$$

ou, na notação contraída,

$$g(\tau, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{n, m} e^{-\beta E_n} e^{i\omega_{nm}\tau} |R_{nm}^S|^2. \quad (4.3.4)$$

Uma vez determinada a função de correlação térmica, pode-se facilmente encontrar a taxa de variação térmica $\frac{\Delta\sigma_A(t, \beta)}{\Delta t}$, substituindo $g(\tau, \beta)$ em (4.1.16) ou reconhecendo que $K_{ij} = Z_R^{-1} e^{-\beta E_i} |R_{ij}^S|^2$ em (4.2.6). 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 *reservoir*, que caracterizam como o sistema A é afetado pelo *reservoir*. A equação (4.3.1) pode ser convenientemente reescrita como

$$g(\tau) = \frac{1}{2} Tr [\sigma_R [R(\tau), R]_+] + \frac{1}{2} Tr [\sigma_R [R(\tau), R]], \quad (4.3.5)$$

onde o primeiro termo corresponde à função de correlação simétrica e o segundo à susceptibilidade linear do *reservoir*.

4.3.1 A Função de Correlação Simétrica

Seja $C_R(\tau)$ a parte simétrica de $g(\tau)$,

$$C_R(\tau) = \frac{1}{2} \text{Tr} [\sigma_R R(\tau) R + \sigma_R R R(\tau)] = \frac{1}{2} (g(\tau) + g^*(\tau)).$$

Substituindo a equação (4.3.4) para $g(\tau, \beta)$,

$$C_R(\tau, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^S|^2 \cos(\omega_{nm}\tau), \quad (4.3.6)$$

e efetuando a transformação de Fourier

$$C_R(\omega, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\tau C_R(\tau, \beta) e^{-i\omega\tau},$$

a correlação no espaço das frequências torna-se

$$C_R(\omega, \beta) = Z_R^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^S|^2 \int d\tau \left(e^{-i(\omega - \omega_{nm})\tau} + e^{-i(\omega + \omega_{nm})\tau} \right).$$

Reconhecendo a função delta

$$\sqrt{2\pi} \delta(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\tau e^{-i\omega\tau},$$

segue que

$$C_R(\omega, \beta) = Z_R^{-1} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^S|^2 [\delta(\omega - \omega_{nm}) + \delta(\omega + \omega_{nm})]. \quad (4.3.7)$$

Tanto $C_R(\tau, \beta)$ em (4.3.6) 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 *reservoir* R sob uma perturbação externa.

4.3.2 A Susceptibilidade Linear

Seja uma perturbação da forma

$$V^S(t) = -\lambda(t) R^S, \quad (4.3.8)$$

onde $\lambda(t)$ é uma função clássica. Substituindo a equação (4.3.8) para $V^S(t)$ na equação (4.1.3) para a evolução dos operadores, temos

$$\frac{d}{dt} \sigma_R(t) = \frac{-\lambda(t)}{i\hbar} [R(t), \sigma_R(t)].$$

Note-se que, neste caso, ao tratar somente da evolução do *reservoir*, 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

$$\sigma_R(t') = \sigma_R - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \lambda(t'') [R(t''), \sigma_R(t'')];$$

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 primeiro termo à direita, $\langle R^S \rangle$, na equação anterior é zero, de acordo com (4.1.6), segue que

$$\langle R \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \lambda(t'') \text{Tr} [\sigma_R^S(t'') [R(t''), R]].$$

Efetuada a substituição $t'' = t' - \tau$,

$$\langle R \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} d\tau \lambda(t' - \tau) \text{Tr} [\sigma_R^S(t' - \tau) [R(\tau), R]],$$

e recorrendo à função de Heaviside $\Theta(\tau)$

$$\Theta(\tau) = \begin{cases} 0, & \tau < 0 \\ 1, & \tau \geq 0 \end{cases},$$

pode-se reescrever $\langle R \rangle$ como

$$\langle R \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \lambda(t' - \tau) \chi_R(\tau),$$

onde

$$\chi_R(\tau) = \frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) \text{Tr} [\sigma_R^S(t' - \tau) [R(\tau), R]].$$

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 (4.3.5) para $g(\tau)$,

$$\text{Tr} [\sigma_R [R(\tau), R]] = g(\tau) - g^*(\tau) = i2Z_R^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^S|^2 \sin(\omega_{nm}\tau),$$

resultando

$$\chi_R(\tau, \beta) = -\frac{2}{\hbar} \Theta(\tau) \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^S|^2 \sin(\omega_{nm}\tau)$$

e

$$\langle R \rangle = -\frac{2}{\hbar} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |R_{nm}^S|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(\tau) d\tau \lambda(t - \tau) \sin(\omega_{nm}\tau).$$

5 OSCILADOR HARMÔNICO

Neste capítulo consideraremos o caso onde o sistema A é um oscilador harmônico unidimensional de frequência ω_0 interagindo com um *reservoir* R , constituído de n osciladores independentes de frequência ω_i , em equilíbrio térmico. Logo, definimos o hamiltoniano deste sistema como

$$H = H_A + H_R + V,$$

onde o hamiltoniano H pertence ao espaço de Hilbert $\mathcal{H}^{1+n} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}^n$, e

$$H_A = \hbar\omega_0 \left(b^{S\dagger} b^S + \frac{1}{2} \right) \otimes \mathbb{I},$$

$$H_R = \mathbb{I} \otimes \hbar \sum_i \omega_i \left(a_i^{S\dagger} a_i^S + \frac{1}{2} \right).$$

Para descrever a interação com o *reservoir*, introduz-se o potencial de forma

$$V = \sum_i \left[g_i \left(\epsilon b^S + \eta b^{S\dagger} \right) a_i^S + g_i^* \left(\epsilon b^{S\dagger} + \eta b^S \right) a_i^{S\dagger} \right], \quad (5.1)$$

onde g_i é um parâmetro de acoplamento e ϵ e η constantes não negativas; a expressão (5.1) é a interação bilinear mais geral possível. Fazendo $\eta = 1$ e assumindo a aproximação de onda girante $\epsilon = 0$ obtém-se o potencial

$$V = \sum_i \left[g_i b^{S\dagger} \otimes a_i^S + g_i^* b^S \otimes a_i^{S\dagger} \right].$$

Buscando um potencial com a forma da expressão (4.1.5), reescrevemos o último como

$$V = - \left(b^{S\dagger} \otimes R^S + b^S \otimes R^{S\dagger} \right),$$

onde

$$R^S = - \left(g_1 a_1^S \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \cdots + \mathbb{I} \otimes g_2 a_2^S \otimes \mathbb{I} \cdots + \cdots \right) = - \sum_i g_i a_i^S,$$

$$R^{S\dagger} = - \sum_i g_i^* a_i^{S\dagger},$$

ou, na representação de interação,

$$V(t) = - (b^\dagger(t) \otimes R(t) + b(t) \otimes R^\dagger(t)).$$

Recuperando a equação (4.1.12) para a população $\Delta\sigma_A(t)$ e expandindo o traço contido nesta, temos

$$\begin{aligned} & Tr_R [V(t'), [V(t''), \sigma_A(t) \otimes \sigma_R]] \\ &= (b(t') b^\dagger(t'') \sigma_A(t'') - b^\dagger(t'') \sigma_A(t'') b(t')) Tr [\sigma_R R^\dagger(t') R(t'')] \\ &+ (\sigma_A(t'') b(t'') b^\dagger(t') - b^\dagger(t') \sigma_A(t'') b(t'')) Tr [\sigma_R R^\dagger(t'') R(t')] \\ &+ (b^\dagger(t') b(t'') \sigma_A(t'') - b(t'') \sigma_A(t'') b^\dagger(t')) Tr [\sigma_R R(t') R^\dagger(t'')] \\ &+ (\sigma_A(t'') b^\dagger(t'') b(t') - b(t') \sigma_A(t'') b^\dagger(t'')) Tr [\sigma_R R(t'') R^\dagger(t')]. \end{aligned}$$

Como visto na seção 4.3 o traço está relacionado com o valor esperado no vácuo térmico; assegurando, que o vácuo do sistema seja separável

$$|0_{(\beta)}\rangle = |0_{(\beta)}\rangle_1 \otimes |0_{(\beta)}\rangle_2 \otimes \dots,$$

segue também a separabilidade da função $g(\tau, \beta)$. Das equações (4.3.1) e (4.3.2) para $g(\tau)$, pode-se então escrever

$$\begin{aligned} & Tr [\sigma_R R(t') R(t'')] = \langle 0_{(\beta)} | R(t') R(t'') | 0_{(\beta)} \rangle \\ &= \langle 0_{(\beta)} | R(t') R(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_1 \otimes \langle 0_{(\beta)} | R(t') R(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_2 \otimes \dots \end{aligned}$$

Assim, o primeiro traço resulta

$$\begin{aligned} & Tr [\sigma_R R(t') R^\dagger(t'')] \\ &= \langle 0_{(\beta)} | R(t') R^\dagger(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_1 \otimes \langle 0_{(\beta)} | R(t') R^\dagger(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_2 \otimes \dots \\ &= \langle 0_{(\beta)} | g_1 a_1(t') g_1^* a_1^\dagger(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_1 \otimes \mathbb{I} \otimes \dots \\ &+ \mathbb{I} \otimes \langle 0_{(\beta)} | g_2 a_2(t') g_2^* a_2^\dagger(t'') | 0_{(\beta)} \rangle_2 \otimes \mathbb{I} \otimes \dots \\ &= \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i(t'-t'')} \langle 0_{(\beta)} | a_i a_i^\dagger | 0_{(\beta)} \rangle_i. \end{aligned}$$

Reconhecendo o operador número e substituindo os resultados encontrados na seção 3.1.1 para o número médio de partículas (3.1.19),

neste caso excitações do estado $|0_{(\beta)}\rangle$,

$$\langle 0_{(\beta)} | a_1 a_1^\dagger | 0_{(\beta)} \rangle_1 = 1 + \langle 0_{(\beta)} | a_1^\dagger a_1 | 0_{(\beta)} \rangle_1 = 1 + (e^{\beta \hbar \omega_1} - 1)^{-1},$$

obtém-se, finalmente, para este e demais traços

$$Tr [\sigma_R R^\dagger(t') R(t'')] = \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i(t''-t')} (e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^{-1},$$

$$Tr [\sigma_R R^\dagger(t'') R(t')] = \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i(t'-t'')} (e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^{-1},$$

$$Tr [\sigma_R R(t') R^\dagger(t'')] = \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i(t'-t'')} [1 + (e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^{-1}],$$

$$Tr [\sigma_R R(t'') R^\dagger(t')] = \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i(t''-t')} [1 + (e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^{-1}].$$

Substituindo em $\Delta\sigma_A(t)$, segue que

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_A(t) = & \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \times \\ & [e^{-i\omega_0(t'-t'')} e^{-i\omega_i(t''-t')} (bb^\dagger \sigma_A(t'') - b^\dagger \sigma_A(t'') b) (e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^{-1} \\ & + e^{-i\omega_0(t''-t')} e^{-i\omega_i(t'-t'')} (\sigma_A(t'') bb^\dagger - b^\dagger \sigma_A(t'') b) (e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^{-1} \\ & + e^{-i\omega_0(t'-t'')} e^{-i\omega_i(t''-t')} (\sigma_A(t'') b^\dagger b - b \sigma_A(t'') b^\dagger) [1 + (e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^{-1}] \\ & + e^{-i\omega_0(t''-t')} e^{-i\omega_i(t'-t'')} (b^\dagger b \sigma_A(t'') - b \sigma_A(t'') b^\dagger) [1 + (e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^{-1}]]. \end{aligned}$$

Da mesma maneira, tomamos $\sigma_A(t'') = \sigma_A(t)$ para que possamos resolver a equação anterior, efetuando as integrais

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{-i(\omega_0-\omega_i)(t'-t'')} = \omega_{0i}^{-2} - i\omega_{0i}^{-1} \Delta t - \omega_{0i}^{-2} e^{-i\omega_{0i} \Delta t},$$

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{-i(\omega_0-\omega_i)(t''-t')} = \omega_{i0}^{-2} - i\omega_{i0}^{-1} \Delta t - \omega_{i0}^{-2} e^{-i\omega_{i0} \Delta t}.$$

A equação para a população torna-se então

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_A(t) &= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 \omega_{0i}^{-2} \times \\ &\left[(1 - i\omega_{0i}\Delta t - e^{-i\omega_{0i}\Delta t}) (bb^\dagger\sigma_A(t) - b^\dagger\sigma_A(t)b) (e^{\beta\hbar\omega_i} - 1)^{-1} \right. \\ &+ (1 + i\omega_{0i}\Delta t - e^{i\omega_{0i}\Delta t}) (\sigma_A(t)bb^\dagger - b^\dagger\sigma_A(t)b) (e^{\beta\hbar\omega_i} - 1)^{-1} \\ &+ (1 - i\omega_{0i}\Delta t - e^{-i\omega_{0i}\Delta t}) (\sigma_A(t)b^\dagger b - b\sigma_A(t)b^\dagger) \left[1 + (e^{\beta\hbar\omega_i} - 1)^{-1} \right] \\ &\left. + (1 + i\omega_{0i}\Delta t - e^{i\omega_{0i}\Delta t}) (b^\dagger b\sigma_A(t) - b\sigma_A(t)b^\dagger) \left[1 + (e^{\beta\hbar\omega_i} - 1)^{-1} \right] \right], \end{aligned}$$

ou

$$\Delta\sigma_A(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 (e^{\beta\hbar\omega_i} - 1)^{-1} (\omega_0 - \omega_i)^{-2} (\Gamma + \Gamma^\dagger), \quad (5.2)$$

onde

$$\Gamma = (1 - i\omega_{0i}\Delta t - e^{-i\omega_{0i}\Delta t}) [bb^\dagger\sigma_A(t) - b^\dagger\sigma_A(t)b + (\sigma_A(t)b^\dagger b - b\sigma_A(t)b^\dagger) e^{\beta\hbar\omega_i}].$$

5.1 EVOLUÇÃO DA POPULAÇÃO

Tomando o valor esperado da expressão (5.2) nos autoestados $|n\rangle$ do sistema A ,

$$\Delta\sigma_{A_{nn}}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 (e^{\beta\hbar\omega_i} - 1)^{-1} \omega_{0i}^{-2} (\Gamma_{nn} + \Gamma_{nn}^\dagger),$$

onde

$$\begin{aligned} \Gamma_{nn} &= (1 - i\omega_{0i}\Delta t - e^{-i\omega_{0i}\Delta t}) \times \\ &[\langle n | bb^\dagger\sigma_A(t) - b^\dagger\sigma_A(t)b | n \rangle + e^{\beta\hbar\omega_i} \langle n | \sigma_A(t)b^\dagger b - b\sigma_A(t)b^\dagger | n \rangle]. \end{aligned}$$

Atuando b e b^\dagger nos estados, obtém-se

$$\begin{aligned} \Gamma_{nn} &= (1 - i\omega_{0i}\Delta t - e^{-i\omega_{0i}\Delta t}) \times \\ &[(n+1)\sigma_{A_{nn}}(t) - n\sigma_{A_{n-1,n-1}}(t) + e^{\beta\hbar\omega_i} (n\sigma_{A_{nn}}(t) - (n+1)\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t))]; \end{aligned}$$

notando que $\langle n | \Gamma^\dagger | n \rangle = \langle n | \Gamma | n \rangle^\dagger$ e somando Γ_{nn} e Γ_{nn}^\dagger ,

$$\Gamma_{nn} + \Gamma_{nn}^\dagger = 2[1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)] \times$$

$$[(n+1)\sigma_{A_{nn}}(t) - n\sigma_{A_{n-1,n-1}}(t) + e^{\beta\hbar\omega_i}(n\sigma_{A_{nn}}(t) - (n+1)\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t))],$$

de modo que, na aproximação de *coarse-grained*, a evolução da população do estado $|n\rangle$ é

$$\frac{\Delta\sigma_{A_{nn}}(t)}{\Delta t} = \frac{2}{\Delta t} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 (e^{\beta\hbar\omega_i} - 1)^{-1} \omega_{0i}^{-2} [1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)] \times$$

$$[(n+1)\sigma_{A_{nn}}(t) - n\sigma_{A_{n-1,n-1}}(t) + e^{\beta\hbar\omega_i}(n\sigma_{A_{nn}}(t) - (n+1)\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t))],$$

a qual pode ser convenientemente reescrita como

$$\frac{\Delta\sigma_{A_{nn}}(t)}{\Delta t} = 2\left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 \omega_{0i}^{-2} \left[\frac{1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)}{\Delta t}\right] \times$$

$$\left[-n\sigma_{A_{nn}}(t) + (n+1)\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t) + (e^{\beta\hbar\omega_i} - 1)^{-1} \times$$

$$[(n+1)(\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t) - \sigma_{A_{nn}}(t)) + n(\sigma_{A_{n-1,n-1}}(t) - \sigma_{A_{nn}}(t))]\right];$$

definindo

$$C \equiv 2\left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 \omega_{0i}^{-2} \left[\frac{1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)}{\Delta t}\right],$$

$$T \equiv 2\left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 \omega_{0i}^{-2} \left[\frac{1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)}{\Delta t}\right] (e^{\beta\hbar\omega_i} - 1)^{-1},$$

a expressão para a evolução torna-se

$$\frac{\Delta\sigma_{A_{nn}}(t)}{\Delta t} = -nC\sigma_{A_{nn}}(t) + (n+1)C\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t)$$

$$+ (n+1)T(\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t) - \sigma_{A_{nn}}(t)) + nT(\sigma_{A_{n-1,n-1}}(t) - \sigma_{A_{nn}}(t)). \quad (5.1.1)$$

Pode-se agora interpretar fisicamente os termos da equação anterior. Assim, o termo C esta 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

processo de absorção e emissão estimulada com taxas nT e $(n+1)T$.

Observando os limites termodinâmicos temos que, no limite de baixas temperaturas,

$$\beta E \gg 1,$$

$$T \rightarrow 0,$$

e

$$\frac{\Delta \sigma_{A_{nn}}(t)}{\Delta t} = 2 \left(\frac{1}{\hbar} \right)^2 \sum_i |g_i|^2 \omega_{0i}^{-2} \left[\frac{1 - \cos(\omega_{0i} \Delta t)}{\Delta t} \right] \times \\ (-n \sigma_{A_{nn}}(t) + (n+1) \sigma_{A_{n+1,n+1}}(t)).$$

Como esperado, a temperaturas baixas 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. No limite de altas temperaturas

$$\beta E \ll 1,$$

$$T \rightarrow \infty;$$

a princípio, este resultado poderia parecer inconsistente, porém, ao se tratar um sistema bosônico, deve-se lembrar que 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 *reservoir*.

No limite $\omega_{0i} \Delta t \rightarrow 0$, discutido no apêndice D, pode-se simplificar o termo

$$\frac{1 - \cos(\omega_{0i} \Delta t)}{\omega_{0i}^2 \Delta t} = \pi \delta(\omega_{0i}),$$

eliminando a dependência temporal em Δt ,

$$\frac{\Delta \sigma_{A_{nn}}(t)}{\Delta t} = 2\pi \left(\frac{1}{\hbar} \right)^2 \sum_i |g_i|^2 \delta(\omega_{0i}) \left[-n \sigma_{A_{nn}}(t) + (n+1) \sigma_{A_{n+1,n+1}}(t) \right. \\ \left. + (e^{\beta \hbar \omega_i} - 1)^{-1} \left[(n+1) (\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t) - \sigma_{A_{nn}}(t)) + n (\sigma_{A_{n-1,n-1}}(t) - \sigma_{A_{nn}}(t)) \right] \right].$$

Por último, vale ressaltar que tanto a equação acima como a equação (5.1.1) 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 $|1\rangle$.

5.2 OSCILADOR HARMÔNICO FERMIÔNICO

O tratamento do oscilador fermiônico, embora conceitualmente distinto, não requer grande modificação com relação ao que foi feito para o caso bosônico; as diferenças serão discutidas pontualmente, com o intuito de evitar uma reprodução redundante e desnecessária. Primeiramente, os hamiltonianos são

$$H_A = \hbar\omega_0 \left(b^{S\dagger} b^S - \frac{1}{2} \right) \otimes \mathbb{I},$$

$$H_R = \mathbb{I} \otimes \hbar \sum_i \omega_i \left(a_i^{S\dagger} a_i^S - \frac{1}{2} \right),$$

os quais, apesar de similares aos do caso bosônico, têm energia de ponto zero diferente. Os operadores fermiônicos apresentam a mesma evolução temporal, de modo que a única diferença com respeito à dedução apresentada na seção anterior será a partir do número médio de partículas. Substituindo os resultados pelos encontrados na seção 3.1.2 para o caso fermiônico,

$$\langle 0_{(\beta)} | a_1 a_1^\dagger | 0_{(\beta)} \rangle_1 = 1 - \langle 0_{(\beta)} | a_1^\dagger a_1 | 0_{(\beta)} \rangle_1 = 1 - (e^{\beta\hbar\omega} + 1)^{-1},$$

de onde seguem os traços fermiônicos:

$$\text{Tr} [\sigma_R R^\dagger(t') R(t'')] = \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i(t''-t')} (e^{\beta\hbar\omega} + 1)^{-1},$$

$$\text{Tr} [\sigma_R R^\dagger(t'') R(t')] = \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i(t'-t'')} (e^{\beta\hbar\omega} + 1)^{-1},$$

$$\text{Tr} [\sigma_R R(t') R^\dagger(t'')] = \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i(t'-t'')} \left[1 - (e^{\beta\hbar\omega} + 1)^{-1} \right],$$

$$\text{Tr} [\sigma_R R(t'') R^\dagger(t')] = \sum_i |g_i|^2 e^{-i\omega_i(t''-t')} \left[1 - (e^{\beta\hbar\omega} + 1)^{-1} \right].$$

Substituindo na expressão para a população, resulta

$$\Delta\sigma_A(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 (e^{\beta\hbar\omega_i} + 1)^{-1} \omega_{0i}^{-2} (\Gamma + \Gamma^\dagger),$$

onde

$$\Gamma = (1 - i\omega_{0i}\Delta t - e^{-i\omega_{0i}\Delta t}) [bb^\dagger\sigma_A(t) - b^\dagger\sigma_A(t)b + (\sigma_A(t)b^\dagger b - b\sigma_A(t)b^\dagger) e^{\beta\hbar\omega_i}].$$

Reunindo os termos e definindo as taxas de transição fermiônicas

$$C \equiv 2\left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 \omega_{0i}^{-2} \left[\frac{1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)}{\Delta t} \right],$$

$$T_F \equiv 2\left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \sum_i |g_i|^2 \omega_{0i}^{-2} \left[\frac{1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)}{\Delta t} \right] (e^{\beta\hbar\omega_i} + 1)^{-1},$$

a expressão para a evolução da população assume a forma

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\sigma_{A_{nn}}(t)}{\Delta t} &= -nC\sigma_{A_{nn}}(t) + (n+1)C\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t) \\ &- (n+1)T_F(\sigma_{A_{n+1,n+1}}(t) + \sigma_{A_{nn}}(t)) + nT_F(\sigma_{A_{n-1,n-1}}(t) + \sigma_{A_{nn}}(t)). \end{aligned} \quad (5.2.1)$$

Interpretarmos os termos da equação acima da mesma maneira que no caso bosônico; assim, o termo C continua associado ao processo de emissão espontânea, e T aos processos de absorção e emissão estimulada. No entanto, devemos lembrar que ao se tratar de um oscilador fermiônico os únicos estados acessíveis são os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Desse modo, podemos facilmente encontrar as duas únicas possibilidades

$$\frac{\Delta\sigma_{A_{00}}(t)}{\Delta t} = C\sigma_{A_{11}}(t) - T_F(\sigma_{A_{00}}(t) + \sigma_{A_{11}}(t)),$$

e

$$\frac{\Delta\sigma_{A_{11}}(t)}{\Delta t} = -C\sigma_{A_{11}}(t) + T_F(\sigma_{A_{00}}(t) + \sigma_{A_{11}}(t)).$$

Observando os limites termodinâmicos das taxas de transição, para baixas temperaturas

$$\beta E \gg 1,$$

$$T_F \rightarrow 0,$$

reencontramos, como esperado, os resultados do caso bosônico onde as

únicas variações devem-se às flutuações . Porém, no limite de altas temperaturas,

$$\beta E \ll 1,$$

$$T_F \rightarrow \frac{1}{2}C.$$

Em contraste com o caso bosônico, a taxa de transição assume o valor $\frac{1}{2}$, devido às restrições impostas pela álgebra fermiônica, permitindo a excitação de apenas um modo de energia disponível. A temperaturas progressivamente mais altas, as partículas do banho térmico fermiônico trocam energia com a partícula browniana ao colidirem com esta, excitando ou desexcitando seus dois únicos modos de oscilação, com igual probabilidade. Por ultimo, se quisermos descrever um oscilador bosônico em um banho térmico fermiônico devemos utilizar a expressão (5.2.1) sem restringir os estados acessíveis.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A teoria da medida apresentada nesta dissertação, proposta originalmente por Schwinger (SCHWINGER, 1959), está longe de ser um formalismo completo, no sentido de que, a partir desta, não podemos recuperar completamente os resultados da mecânica quântica; por exemplo, os símbolos de medidas não apresentam nenhuma dependência temporal explícita. No entanto, a ideia de uma teoria baseada em filtros, ou experimentos do tipo Stern-Gerlach, é altamente intuitiva, facilitando enormemente a construção e interpretação dos resultados, especialmente na mecânica estatística quântica, onde vimos que estados térmicos surgem naturalmente. Pretendemos futuramente descrever a evolução dinâmica de um sistema microscópico em TFD, considerando símbolos de medida parametrizados pelo tempo com o intuito de se reproduzir as funções de Green térmicas (SCHWINGER, 1961).

Reproduzimos os resultados tradicionais do formalismo TFD, para um sistema descrito pelos seus níveis de energia ou quasipartículas, cujos estados pertencem ao espaço de Hilbert correspondente na representação de número. Vimos que as transformações de Bogoliubov são responsáveis por mesclar estados puros de sistemas para os quais $\rho = \rho^2$ e $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}^2$, dando origem a novos estados associados a $\rho(\beta) = \rho^2(\beta)$. Assim, como discutido, os estados mistos pertencem a uma nova representação irredutível, sendo gerados a partir de um vácuo térmico.

Em *stricto sensu* nossa construção no espaço de Hilbert diz respeito a excitações de estados de energia. Porém, conseguimos facilmente estender o formalismo ao espaço de Fock para partículas idênticas (QUEIROZ, 2002), lembrando que este é a soma direta de espaços de Hilbert de m partículas,

$$F^\pm(H) = \bigoplus_{m=0}^{\infty} S^\pm \mathcal{H}^{\otimes m},$$

onde S^\pm é o operador responsável por simetrizar (+) ou antissimetrizar (−) os estados do sistema conforme as partículas sejam bósons ou férmions, respectivamente. Com esta modificação, podemos tratar de sistemas de partículas em segunda quantização. Vale ressaltar que para se encontrar as funções de Green térmicas é necessário introduzir um duplete conjugado, caso contrário o sistema não termaliza, de modo que o duplete conjugado é, na verdade, um dos postulados fundamentais das teorias de campo térmicas de tempo real.

Posteriormente, estudamos o comportamento de um oscilador

que represente, por exemplo, uma partícula browniana em interação com um banho térmico, composto por osciladores harmônicos. Esta proposta levou ao desenvolvimento de uma equação mestra para a evolução do sistema microscópico A da forma

$$\frac{\Delta\sigma_A(t)}{\Delta t} = \frac{\sigma_A(t + \Delta t) - \sigma_A(t)}{\Delta t},$$

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. Um aspecto importante a ser discutido é a ideia de equilíbrio térmico que foi utilizada; de fato, o sistema estudado está globalmente em equilíbrio térmico, embora, localmente, ocorram flutuações devido as constantes colisões entre A e as partículas do *reservoir*; são estas flutuações que nos permitem estabelecer uma equação para a evolução de A , respeitando o teorema da flutuação-dissipação.

No caso do oscilador bosônico foi visto que a ausência de uma restrição com relação a trocas de energia com o banho térmico levou a taxas de transição divergentes; assim, temos como perspectiva futura introduzir um multiplicador de Lagrange ao hamiltoniano, conjecturando que tal restrição leva a taxas finitas e uma possível temperatura crítica, abaixo da qual o sistema decai a um estado fundamental de equilíbrio em que não há absorção ressonante e as colisões tornam-se quase elásticas.

Nosso estudo centrou-se quase exclusivamente no desenvolvimento do formalismo, criando diversas possibilidades de aplicação, dentre as quais temos como perspectiva futura estudar a evolução da média de operadores associados ao sistema microscópico, com o intuito de re-derivar a equação de Heisenberg-Langevin a temperatura finita. Pretendemos também examinar a taxa com que o sistema microscópico e o *reservoir* trocam energia, através das funções de Green térmicas da TFD, e estudar nesse mesmo contexto (FAN; LU, 2004; BARNETT; KNIGHT, 1985) o modelo de Jaynes-Cummings (JAYNES; CUMMINGS, 1963), o qual descreve um sistema de dois níveis interagindo com um único modo de uma cavidade.

REFERÊNCIAS

- BARNETT, S.; KNIGHT, P. Thermofield analysis of squeezing and statistical mixtures in quantum optics. *JOSA B*, Optical Society of America, v. 2, n. 3, p. 467–479, 1985.
- COHEN-TANNOUJDI, C.; DUPONT-ROC, J.; GRYNBERG, G. Atom-photon interactions: basic processes and applications. Wiley, 1992.
- FAN, H.; LU, H. Thermo jaynes-cummings model and its diagonalization. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 332, n. 1-2, p. 1–7, 2004.
- JAYNES, E.; CUMMINGS, F. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. *Proceedings of the IEEE*, IEEE, v. 51, n. 1, p. 89–109, 1963.
- KELDYSH, L. Diagram technique for nonequilibrium processes, [sov. phys. jetp 20, 1018 (1965)] zh. *Eksp. Teor. Fiz*, v. 47, p. 1515, 1964.
- KHANNA, F. Thermal quantum field theory: algebraic aspects and applications. World Scientific Pub Co Inc, 2009.
- MATSUBARA, T. A new approach to quantum-statistical mechanics. *Progress of theoretical physics*, v. 14, n. 4, p. 351–378, 1955.
- QUEIROZ, H. O operador espalhamento para férmions num campo externo em thermofield dynamics. Tese de Doutorado, IFT, 2002.
- SCHWINGER, J. The algebra of microscopic measurement. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, National Academy of Sciences, v. 45, n. 10, p. 1542, 1959.
- SCHWINGER, J. Brownian motion of a quantum oscillator. *Journal of Mathematical Physics*, v. 2, p. 407, 1961.
- SCHWINGER, J. *Quantum kinematics and dynamics*. [S.1.]: WA Benjamin (New York), 1970.
- TAKAHASHI, Y.; UMEZAWA, H. Collective phenomena 2 55; reprinted in. *Int. J. Mod. Phys*, 1975.

TOMAZELLI, J.; COSTA, L. Atomic radiative transitions in thermo field dynamics. *International journal of modern physics*, World Scientific, v. 18, n. 7-9, p. 1079, 2003.

TOMAZELLI, J.; GOMES, G. Dissipative quantum systems in thermofield dynamics. *Arxiv preprint arXiv:0911.1321*, 2009.

UMEZAWA, H. *Advanced field theory: micro, macro, and thermal physics*. [S.l.]: Amer Inst of Physics, 1995.

UMEZAWA, H.; MATSUMOTO, H.; TACHIKI, M. *Thermo field dynamics and condensed states*. [S.l.]: North Holland, 1982.

APÊNDICE A - Expansão do Vácuo Térmico

Na seção 3.2.1 fatorou-se a exponencial (3.2.7) em produtos de exponenciais. Deduz-se aqui uma maneira de realizar tal expansão. Primeiramente, propomos a expansão da forma

$$e^{\frac{\theta}{2}(a^{\dagger 2} - a^2)} = e^{f(\theta)a^{\dagger 2}} e^{-g(\theta)[a^{\dagger 2}, a^2]} e^{-h(\theta)a^2}, \quad (\text{A.1})$$

onde os operadores foram convenientemente ordenados com o intuito de serem aplicados posteriormente ao vácuo. Para facilitar os cálculos, será utilizada a notação

$$\begin{aligned} A &= a^{\dagger 2}, \\ B &= -a^2, \\ C &= [B, A] = -2(a^{\dagger}a + aa^{\dagger}), \end{aligned}$$

de modo que

$$U = e^{\frac{\theta}{2}(A+B)} = e^{Af(\theta)} e^{Cg(\theta)} e^{Bh(\theta)}. \quad (\text{A.2})$$

Antes de proceder, para que a expressão (A.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 (A.2) em relação a θ , temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta}U &= \frac{1}{2}(A+B)U \\ &= AU \frac{d}{d\theta}f(\theta) + e^{Af(\theta)} C e^{Cg(\theta)} e^{Bh(\theta)} \frac{d}{d\theta}g(\theta) + UB \frac{d}{d\theta}h(\theta) \end{aligned}$$

$$= \left[A \frac{d}{d\theta} f(\theta) + e^{Af(\theta)} C e^{-Af(\theta)} \frac{d}{d\theta} g(\theta) + U B U^{-1} \frac{d}{d\theta} h(\theta) \right] U,$$

de modo que

$$\left(\frac{1}{2} - \frac{d}{d\theta} f(\theta) \right) A + \frac{1}{2} B - U_s B U_s^{-1} \frac{d}{d\theta} h(\theta) - e^{Af(\theta)} C e^{-Af(\theta)} \frac{d}{d\theta} g(\theta) = 0.$$

Multiplicando por $e^{-Af(\theta)}$ à esquerda e por $e^{Af(\theta)}$ à direita, resulta

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2} - \frac{d}{d\theta} f(\theta) \right) A + \frac{1}{2} e^{-Af(\theta)} B e^{Af(\theta)} \\ & - e^{Cg(\theta)} B e^{-Cg(\theta)} \frac{d}{d\theta} h(\theta) - C \frac{d}{d\theta} g(\theta) = 0. \end{aligned} \tag{A.3}$$

Utilizando a relação de Baker-Campbell-Hausdorff, obtemos para os termos exponenciais

$$\begin{aligned} & e^{-Af(\theta)} B e^{Af(\theta)} \\ = & B - f(\theta) [A, B] + \frac{f^2(\theta)}{2!} [A, [A, B]] - \frac{f^3(\theta)}{3!} \underbrace{[A, [A, [A, B]]]}_0 + \dots \\ = & B + f(\theta) C - 4f^2(\theta) A, \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} & e^{Cg(\theta)} B e^{-Cg(\theta)} \\ = & B + g(\theta) [C, B] + \frac{g^2(\theta)}{2!} [C, [C, B]] + \frac{g^3(\theta)}{3!} [C, [C, [C, B]]] + \dots \\ = & B + 8g(\theta) B + \frac{g^2(\theta)}{2!} 8^2 B + \frac{g^3(\theta)}{3!} 8^3 B + \dots \\ = & B \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(8g(\theta))^n}{n!} = B e^{8g(\theta)}. \end{aligned}$$

Substituindo em (A.3),

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2} - \frac{d}{d\theta} f(\theta) \right) A + \frac{1}{2} (B + f(\theta) C - 4f^2(\theta) A) \\ & - B e^{8g(\theta)} \frac{d}{d\theta} h(\theta) - \frac{d}{d\theta} C g(\theta) = 0, \end{aligned}$$

e fatorando os operadores, segue que

$$\left(\frac{1}{2} - 2f^2(\theta) - \frac{d}{d\theta}f(\theta)\right)A + \left(\frac{1}{2} - e^{8g(\theta)}\frac{d}{d\theta}h(\theta)\right)B \\ + \left(\frac{1}{2}f(\theta) - \frac{d}{d\theta}g(\theta)\right)C = 0.$$

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

$$\theta = 2 \int \frac{df}{1 - 4f^2} = \operatorname{arctanh}(2f) \Rightarrow f(\theta) = \frac{1}{2}\operatorname{tanh}(\theta).$$

Substituindo $f(\theta)$,

$$\frac{d}{d\theta}g(\theta) = \frac{1}{2}f(\theta) = \frac{1}{4}\operatorname{tanh}(\theta),$$

resulta

$$g(\theta) = \frac{1}{4}\ln[\operatorname{cosh}(\theta)].$$

Finalmente, resolvendo para $h(\theta)$,

$$\frac{d}{d\theta}h(\theta) = \frac{1}{2}e^{-8g(\theta)} = \frac{1}{2}\operatorname{cosh}^{-2}(\theta),$$

obtemos

$$h(\theta) = \frac{1}{2}\operatorname{tanh}(\theta).$$

A equação (A.1) torna-se então

$$U = e^{\frac{1}{2}\operatorname{tanh}(\theta)a^{\dagger 2}} e^{\frac{1}{4}\ln[\operatorname{cosh}(\theta)]}[a^{\dagger 2}, a^2] e^{\frac{1}{2}\operatorname{tanh}(\theta)a^2},$$

que é exatamente a equação (3.2.7).

APÊNDICE B - Ruído em Estados Puros

Na subsecção 3.2.2 foi apresentada a transformação de Bogoliubov para estados *squeezed* de dois modos. Aqui mostraremos que esta transformação é responsável por criar ruído em um estado puro. As variáveis canônicas para os espaços \mathfrak{H} , $\tilde{\mathfrak{H}}$ e \mathcal{H} são

$$\begin{aligned} q &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger), & p &= \frac{1}{\sqrt{2}i} (a - a^\dagger), \\ \tilde{q} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger), & \tilde{p} &= \frac{-1}{\sqrt{2}i} (\tilde{a} - \tilde{a}^\dagger), \\ q(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha + \alpha^\dagger), & p(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{2}i} (\alpha - \alpha^\dagger), \\ \tilde{q}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{\alpha} + \tilde{\alpha}^\dagger), & \tilde{p}(\theta) &= \frac{-1}{\sqrt{2}i} (\tilde{\alpha} - \tilde{\alpha}^\dagger). \end{aligned}$$

Se $\theta = 0$ as variáveis são equivalentes $(q(\theta), p(\theta), \tilde{q}(\theta), \tilde{p}(\theta)) = (q, p, \tilde{q}, \tilde{p})$. Das expressões acima, encontram-se as relações de comutação canônicas

$$\begin{aligned} [q, p] &= -[\tilde{q}, \tilde{p}] = i\hbar, \\ [q(\theta), p(\theta)] &= -[\tilde{q}(\theta), \tilde{p}(\theta)] = i\hbar. \end{aligned}$$

Com a notação

$$\begin{aligned} q^1 &= q, & p^1 &= p, \\ q^2 &= \tilde{q}, & p^2 &= \tilde{p}, \\ q(\theta)^1 &= q(\theta), & p(\theta)^1 &= p(\theta), \\ q(\theta)^2 &= \tilde{q}(\theta), & p(\theta)^2 &= \tilde{p}(\theta), \end{aligned}$$

as relações entre os operadores podem ser escritas como

$$\begin{aligned} q^\mu &= A(\theta)^{\mu\nu} q(\theta)^\nu, \\ p^\mu &= A(\theta)^{\mu\nu} p(\theta)^\nu, \end{aligned}$$

onde

$$A(\theta)^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \cosh(\theta) & \sinh(\theta) \\ \sinh(\theta) & \cosh(\theta) \end{pmatrix}.$$

Definimos o invariante frente à transformação de Bogoliubov

$$I \equiv \langle q^\mu q^\nu \rangle \tau_{3\mu\sigma} \tau_{3\nu\rho} \langle p^\sigma p^\rho \rangle, \quad (\text{B.1})$$

onde τ_3 é a matriz de Pauli $\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ e o valor esperado é efetuado sobre um estado qualquer $|\mathbf{n}_{(\beta)}\rangle$ produzido por sucessivas atuações de $\alpha^\dagger(\theta)$ e $\tilde{\alpha}^\dagger(\theta)$ em $|\mathbf{0}_{(\beta)}\rangle$. Devido à linearidade dos operadores, pode-se substituir

$$q^\mu \rightarrow \Delta q^\mu,$$

$$p^\mu \rightarrow \Delta p^\mu,$$

onde

$$\Delta q^\mu = q^\mu - \langle q^\mu \rangle,$$

no invariante (B.1). Desta, segue que

$$\begin{aligned} & \langle \Delta q^\mu \Delta q^\nu \rangle \tau_{3\mu\sigma} \tau_{3\nu\rho} \langle \Delta p^\sigma \Delta p^\rho \rangle \\ &= \langle \Delta q(\theta)^\mu \Delta q(\theta)^\nu \rangle \tau_{3\mu\sigma} \tau_{3\nu\rho} \langle \Delta p(\theta)^\sigma \Delta p(\theta)^\rho \rangle; \end{aligned}$$

efetuando o somatório e reconhecendo que τ_3 só possui elementos diferente de zero quando $\mu = \sigma$ e $\nu = \rho$, a expressão acima torna-se

$$\begin{aligned} & \langle (\Delta q)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle + \langle (\Delta \tilde{q})^2 \rangle \langle (\Delta \tilde{p})^2 \rangle - 2 \langle \Delta q \Delta \tilde{q} \rangle \langle \Delta p \Delta \tilde{p} \rangle \\ &= \langle (\Delta q(\theta))^2 \rangle \langle (\Delta p(\theta))^2 \rangle + \langle (\Delta \tilde{q}(\theta))^2 \rangle \langle (\Delta \tilde{p}(\theta))^2 \rangle \\ & \quad - 2 \langle \Delta q(\theta) \Delta \tilde{q}(\theta) \rangle \langle \Delta p(\theta) \Delta \tilde{p}(\theta) \rangle. \end{aligned}$$

Por definição os autovalores \mathbf{E} e $\tilde{\mathbf{E}}$ são iguais, logo

$$\langle \tilde{\mathbf{A}} \rangle = \langle \mathbf{A} \rangle;$$

assim, simplificando,

$$\begin{aligned} & \langle (\Delta q)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle - \langle \Delta q \Delta \tilde{q} \rangle \langle \Delta p \Delta \tilde{p} \rangle \\ &= \langle (\Delta q(\theta))^2 \rangle \langle (\Delta p(\theta))^2 \rangle \tag{B.2} \\ & \quad - \langle \Delta q(\theta) \Delta \tilde{q}(\theta) \rangle \langle \Delta p(\theta) \Delta \tilde{p}(\theta) \rangle. \end{aligned}$$

Reparemos individualmente nos termos à direita. Expandindo o segundo termo, temos

$$\langle \Delta q(\theta) \Delta \tilde{q}(\theta) \rangle = \langle q(\theta) \tilde{q}(\theta) \rangle - \langle q(\theta) \rangle \langle \tilde{q}(\theta) \rangle;$$

além disso, segue da ortogonalidade dos estados que

$$\langle \mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}) \tilde{\mathbf{q}}(\boldsymbol{\theta}) \rangle = \langle \mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}) \rangle = \mathbf{0}.$$

Substitui-se no primeiro termo

$$\begin{aligned} & \langle (\Delta \mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle \langle (\Delta \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle \\ &= \left[\langle (\mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle - \langle \mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}) \rangle^2 \right] \left[\langle (\mathbf{p}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle - \langle \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta}) \rangle^2 \right] \\ &= \langle (\mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle \langle (\mathbf{p}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle \end{aligned}$$

a desigualdade de Cauchy-Schwarz

$$\langle (\mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle \langle (\mathbf{p}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle \geq |\langle \mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta}) \rangle|^2.$$

Por outro lado,

$$\langle \mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta}) \rangle = \left\langle \frac{1}{2} [\mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}), \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta})]_+ \right\rangle + i \left\langle \frac{1}{2i} [\mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}), \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta})] \right\rangle$$

e como

$$|z|^2 = (\text{Re}(z))^2 + (\text{Im}(z))^2 \geq (\text{Im}(z))^2,$$

segue que

$$|\langle \mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta}) \rangle|^2 \geq \left\langle \frac{1}{2i} [\mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}), \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta})] \right\rangle^2.$$

Dos resultados acima, substituindo o comutador canônico, obtém-se o princípio de incerteza

$$\langle (\Delta \mathbf{q}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle \langle (\Delta \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta}))^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

No entanto, o princípio de incerteza das variáveis independentes da temperatura nos estados térmicos resulta

$$\langle (\Delta \mathbf{q})^2 \rangle \langle (\Delta \mathbf{p})^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} + \langle \Delta \mathbf{q} \Delta \tilde{\mathbf{q}} \rangle \langle \Delta \mathbf{p} \Delta \tilde{\mathbf{p}} \rangle;$$

na expressão acima, o segundo termo à direita pode ser interpretado como um ruído criado pela transformação de Bogoliubov, apesar desses estados serem puros. Se o estado $|\mathbf{n}_{(\beta)}\rangle$ for o vácuo térmico $|\mathbf{0}_{(\beta)}\rangle$,

podemos calcular os valores esperados

$$\langle \Delta q \Delta \tilde{q} \rangle = \langle q \tilde{q} \rangle - \langle q \rangle \langle \tilde{q} \rangle ,$$

$$\langle \Delta p \Delta \tilde{p} \rangle = \langle p \tilde{p} \rangle - \langle p \rangle \langle \tilde{p} \rangle ;$$

rescrevendo o operador q em função dos operadores α , α^\dagger , $\tilde{\alpha}$ e $\tilde{\alpha}^\dagger$, temos

$$q = \frac{1}{\sqrt{2}} [\cosh(\theta) (\alpha + \alpha^\dagger) + \sinh(\theta) (\tilde{\alpha} + \tilde{\alpha}^\dagger)]$$

e, substituindo e atuando no vácuo térmico cada operador, as expressões anteriores tornam-se

$$\langle \Delta q \Delta \tilde{q} \rangle = \frac{\hbar}{2} \sinh(2\theta) ,$$

$$\langle \Delta p \Delta \tilde{p} \rangle = \frac{\hbar}{2} \sinh(2\theta) .$$

O princípio de incerteza “térmico” pode então ser reescrito como

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} + \frac{\hbar^2}{4} \sinh^2(2\theta) .$$

Conclui-se deste apêndice que qualquer transformação de Bogoliubov bosônica cria um ruído nos estados puros, causando flutuações da ordem de \hbar , as quais, como visto, estão relacionadas com a temperatura. Utilizando as expressões (3.2.17) para θ , segue que

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \left(1 + \frac{4e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} \right) .$$

Nos limites termodinâmicos, para

$$\beta E \gg 1, \quad \langle (\Delta q)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \rightarrow \frac{\hbar^2}{4}$$

e para

$$\beta E \ll 1, \quad \langle (\Delta q)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \rightarrow \infty ,$$

obtém-se os resultados esperados. A baixas temperaturas, recupera-se o princípio de incerteza tradicional, enquanto que a temperaturas altas perdemos a informação com relação a ambos operadores canônicos.

**APÊNDICE C - Condição de Validade para a Expansão
Perturbativa**

No final da secção 4.1 o operador $\sigma_A(t'')$ foi substituído por $\sigma_A(t)$, o que equivale a expandir (4.1.10) até segunda ordem. Se aplicado recursivamente, este procedimento irá gerar contribuições para ordens superiores, com termos do tipo triplo comutador, quádruplo comutador, etc. O estudo “formal” da convergência desta série é de extrema dificuldade e complexidade, fugindo totalmente do escopo desta dissertação. No entanto, apresentaremos elementos de plausibilidade, os quais indicam que, ao menos, a série deva convergir assintoticamente. Faz-se, então, uma avaliação da ordem de magnitude dos próximos termos em comparação com o de segunda ordem. A expressão exata para a população $\Delta\sigma_A(t)$ é

$$\Delta\sigma_A(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \text{Tr}_R [V(t'), [V(t''), \rho(t'')]]. \quad (\text{C.1})$$

Integrando a equação (4.1.3) entre t e t'' ,

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

e substituindo em (C.1) surgem naturalmente os termos de segunda e terceira ordem na expansão

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_A(t) &= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \text{Tr}_R [V(t'), [V(t''), \rho(t)]] \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \int_t^{t''} dt''' \text{Tr}_R [V(t'), [V(t''), [V(t'''), \rho(t''')]]]. \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Devido à forma do potencial, vimos que os traços podem ser fatorados em uma parte referente ao sistema A e outra, $g(\tau)$, ao sistema R . Esta última nos permitirá ignorar os termos de ordem superior. Devemos mostrar que, decorrido um intervalo de tempo Δt suficientemente grande, as correlações de três pontos para os observáveis do *reservoir* são mais fortemente suprimidas que as de dois pontos. Projetando na base de R , encontra-se

$$\begin{aligned} g(t', t'') &= \text{Tr} [\sigma_R R(t' - t'') R] \\ &= Z_R^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \langle n | R^S | m \rangle \langle m | R^S | n \rangle e^{-i\omega_{nm}(t' - t'')}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
g(t', t'', t''') &= \text{Tr} [\sigma_R R(t' - t'') R R(t''' - t'')] \\
&= Z_R^{-1} \sum_{m,n,l} e^{-\beta E_n} \langle n | R^S | m \rangle \langle m | R^S | l \rangle \langle l | R^S | n \rangle \times \\
&\quad e^{-i\omega_{nm}(t' - t'')} e^{-i\omega_{nl}(t'' - t''')}.
\end{aligned}$$

Este é o máximo que podemos avançar sem mais informações sobre o *reservoir*. No entanto, o *reservoir* possui espectro denso de energia, quase contínuo, de modo que assumimos que as diferentes fases em $g(t', t'')$ acarretam interferências destrutivas conforme τ aumente no argumento das exponenciais. Assim, $g(t', t'')$ oscila rapidamente e sua contribuição para a integral (C.2) torna-se cada vez menor. Considerando duas escalas de tempo distintas (COHEN-TANNOUJDI; DUPONT-ROC; GRYNBERG, 1992), T_A e τ_c , tais que

$$T_A \gg \Delta t \gg \tau_c,$$

onde τ_c representa o tempo de correlação entre observáveis do *reservoir* e T_A o tempo de evolução daqueles associados ao sistema microscópico, temos, em segunda ordem,

$$\left| \frac{\Delta \sigma_A}{\Delta t} \right|^{(2)} \sim \frac{1}{\Delta t} \frac{v^2}{\hbar^2} \sigma_A \left| \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{-i\omega(t'-t'')} \right|,$$

nas vizinhanças de uma determinada frequência característica dominante

$$\omega_{mn} \equiv \omega \sim \tau_c^{-1}.$$

Na expressão acima, $v \equiv \langle V(\beta) \rangle$ é o valor típico do potencial de interação no equilíbrio, onde os observáveis do sistema microscópico são tomados num dado instante, em torno do qual não variam apreciavelmente, dentro dos intervalos de integração. Efetuando as integrais, obtém-se

$$\begin{aligned}
\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{-i\omega(t'-t'')} &= \frac{2}{\omega} \int_t^{t+\Delta t} dt' e^{-i\frac{\omega}{2}(t'-t)} \text{sin} \left[\frac{\omega}{2} (t' - t) \right] \\
&\cong \frac{2}{\omega} e^{-i\omega \frac{\Delta t}{4}} \text{sin} \left[\frac{\omega \Delta t}{4} \right] \Delta t
\end{aligned}$$

e, portanto,

$$\left| \frac{\Delta\sigma_A}{\Delta t} \right|^{(2)} \sim 2\tau_c \frac{v^2}{\hbar^2} \sigma_A \sim \frac{\sigma_A}{T_R} \sim \sigma_A \left(\frac{\tau_c}{T_R} \right) \tau_c^{-1}.$$

Como $\tau_c \ll T_A$,

$$\frac{v^2}{\hbar^2} \tau_c^2 \ll 1.$$

Já em terceira ordem,

$$\left| \frac{\Delta\sigma_A}{\Delta t} \right|^{(3)} \sim \frac{1}{\Delta t} \frac{v^3}{\hbar^3} \sigma_A \left| \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \int_t^{t''} dt''' e^{-i\omega(t'-t''')} \right|;$$

porém,

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \int_t^{t''} dt''' e^{-i\omega(t'-t''')} \\ &= \frac{2}{\omega} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' e^{-i\frac{\omega}{2}(t''-t)} \sin \left[\frac{\omega}{2}(t''-t) \right] \\ &= \frac{4}{\omega^2} \int_t^{t+\Delta t} dt' \sin^2 \left[\frac{\omega}{4}(t'-t) \right] \simeq \frac{4}{\omega^2} \sin^2 \left[\frac{\omega\Delta t}{8} \right] \Delta t, \end{aligned}$$

de modo que

$$\left| \frac{\Delta\sigma_A}{\Delta t} \right|^{(3)} \sim 4 \frac{v^3}{\hbar^3} \tau_c^2 \sigma_A \sim \left| \frac{\Delta\sigma_A}{\Delta t} \right|^{(2)} 2 \frac{v}{\hbar} \tau_c \ll \left| \frac{\Delta\sigma_A}{\Delta t} \right|^{(2)}.$$

Assim, para sistemas fracamente acoplados, a contribuição de termos de ordens superiores é menor do que a de ordens mais baixas; mesmo que a série não convirja uniformemente, trata-se de uma série assintótica e aproximá-la até segunda ordem é suficiente aos nossos propósitos.

APÊNDICE D – A Aproximação Delta

Neste apêndice será discutida a aproximação feita no final da seção 5.1. A expressão pode ser convenientemente reescrita como

$$\frac{1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)}{\omega_{0i}^2\Delta t} = (\omega_{0i}^2\Delta t)^{-1} 2\sin^2\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right) =$$

$$\left[(\omega_{0i}\Delta t)^{-1} \sin\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right) \right] \left[\left(\frac{\omega_{0i}}{2}\right)^{-1} \sin\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right) \right].$$

No limite $\Delta t \rightarrow \infty$, pode-se reconhecer o segundo termo como sendo a distribuição delta de Dirac

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} (x)^{-1} \sin(nx);$$

assim,

$$2\pi\delta(\omega_{0i}) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left(\frac{\omega_{0i}}{2}\right)^{-1} \sin\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right).$$

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

$$\lim_{\omega_{0i}\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right)^{-1} \sin\left(\frac{\omega_{0i}\Delta t}{2}\right) = 1$$

e, portanto,

$$\lim_{\substack{\Delta t \rightarrow \infty \\ \Delta t\omega_{0i} \rightarrow 0}} \frac{1 - \cos(\omega_{0i}\Delta t)}{\omega_{0i}^2\Delta t} = \pi\delta(\omega_{0i}).$$