

Universidade Estadual de Campinas  
Instituto de Física Gleb Wataghin

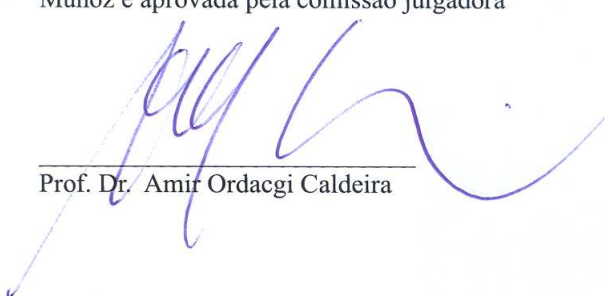
**Oscar Salomón Duarte Muñoz**

**Estudo da dinâmica de partículas brownianas quânticas**

Tese apresentada ao Instituto de Física  
Gleb Wataghin para a obtenção do título  
de Doutor em Física

**Orientador: Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira**

Este exemplar corresponde à versão final da tese  
defendida pelo aluno Oscar Salomón Duarte  
Muñoz e aprovada pela comissão julgadora

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira

Campinas, São Paulo  
Dezembro de 2011

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA POR  
VALKÍRIA SUCCI VICENTE – CRB8/5398 - BIBLIOTECA DO IFGW  
UNICAMP**

D85e	Duarte Muñoz, Oscar Salomón, 1981- Estudo da dinâmica de partículas brownianas quânticas / Oscar Salomón Duarte Muñoz.-- Campinas, SP : [s.n.], 2011.  Orientador: Amir Ordacgi Caldeira. Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física “Gleb Wataghin”.  1. Movimento Browniano quântico. 2. Acoplamento efetivo. 3. Emaranhamento bipartite. I. Caldeira, Amir Ordacgi, 1950- II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física “Gleb Wataghin”. III. Título.
------	---

Informações para Biblioteca Digital

**Título em inglês:** Study of the dynamics of quantum brownian particles

**Palavras-chave em inglês:**

Quantum Brownian motion

Effective coupling

Bipartite entanglement

**Área de Concentração:** Física da Matéria Condensada

**Titulação:** Doutor em Ciências

**Banca Examinadora:**

Amir Ordacgi Caldeira [Orientador]

Kyoko Furuya

José Antonio Roversi

Thiago Rodrigues de Oliveira

Frederico Borges de Brito

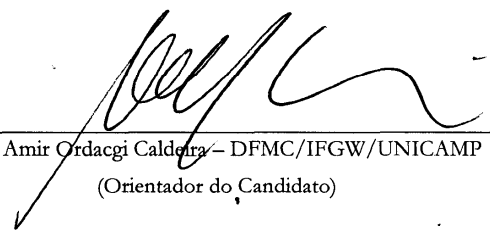
**Data da Defesa:** 12-12-2011

**Programa de Pós-Graduação em:** Física



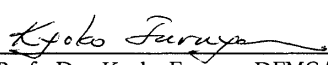
MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE OSCAR SALOMÓN DUARTE MUÑOZ – RA 29477, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN” DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 12/12/2011.

COMISSÃO JULGADORA:




---

Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldera – DFMC/IFGW/UNICAMP  
(Orientador do Candidato)



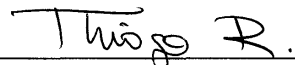
---

Profa. Dra. Kyoko Furuya – DFMC/IFGW/UNICAMP



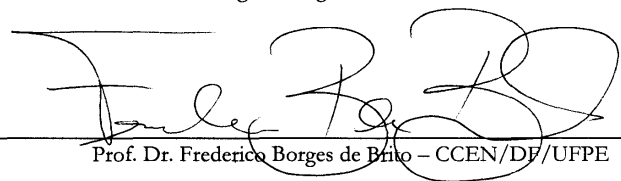
---

Prof. Dr. José Antonio Roversi - DEQ/IFGW/UNICAMP



---

Prof. Dr. Thiago Rodrigues de Oliveira – CEG/IF/UFF



---

Prof. Dr. Frederico Borges de Brito – CCEN/DF/UFPE

# Agradecimentos

Agradeço ao professor Amir Ordacgi Caldeira pela valiosa orientação.

Ao professor Marcos Cesar de Oliveira, quem através dos seminários de grupo e conversas particulares motivou uma parte importante deste trabalho.

Aos funcionários da CPG do Instituto de Física Gleb Wataghin (IFGW), que merecem uma menção especial pela disposição e eficiência com que realizam seu trabalho.

Agradeço a todos os colegas que direta ou indiretamente prestaram-me ajuda.

Agradeço também à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Fapesp) pelo apoio financeiro.

Muchas gracias a mi compañera Carolina por el afecto, el intercambio de experiencias y por su carácter fuerte y decidido que hacen nuestra convivencia siempre enriquecedora.

# Resumo

Usamos o modelo "sistema-mais-reservatório" para estudar a dinâmica quântica de um sistema de duas partículas imersas em um reservatório em equilíbrio térmico. Analisamos as consequências, para o caso de duas partículas, de usarmos uma extensão direta do modelo usado para uma partícula. Em particular, enfatizamos que uma modelagem adequada do contratermo é fundamental para obtermos a dinâmica apropriada no limite clássico. Usamos uma extensão do banho de osciladores capaz de induzir um acoplamento efetivo entre as partículas brownianas dependendo da escolha feita para a função espectral dos osciladores que compõem o banho. O acoplamento é não - linear nas variáveis de interesse e impomos uma dependência exponencial nestas variáveis para garantir a invariância translacional do modelo. A dinâmica quântica é estudada através do operador densidade reduzido das duas partículas. Obtivemos a evolução do operador densidade para dois sistemas de interesse: o primeiro deles é formado por duas partículas livres preparadas em um estado inicial gaussiano e o segundo é formado por dois osciladores harmônicos preparados inicialmente em um estado não gaussiano formado pela superposição de pacotes de onda gaussianos. A influência do ambiente foi observada através da evolução do emaranhamento. Nosso modelo fornece um critério de distância para identificar em que casos um ambiente comum pode induzir emaranhamento. Três regimes foram encontrados: o regime de distâncias curtas, equivalente ao encontrado no modelo sistema-mais-reservatório com acoplamento bilinear, o regime de distâncias longas em que as partículas atuam como se estivessem acopladas com reservatórios independentes, e o regime de distâncias intermediárias em que existe uma competição entre os efeitos de decoerência e indução de emaranhamento.

# Abstract

We use the system-plus-reservoir model to study the dynamics of a system of two particles that interact with a heat bath in thermal equilibrium. We analyze the effects, for the two particle case, of a direct generalization of the usual model for one brownian particle. We particularly call for attention to the fundamental role of the counterterm in order to obtain the proper dynamics in the classical limit. We use an extension of the bath of oscillators capable of inducing an effective coupling between the brownian particles depending on the choice made to the spectral function of the oscillators components of the bath. The coupling is non-linear in the variables of interest and an exponential dependence is imposed in order to guarantee the translational invariance of the model. The quantum dynamics is studied through the reduce density operator of the two particles. We obtain the evolution of the reduce density operator for two systems of interest: the first one is composed by two free particles initially prepared in a gaussian state and the second one is composed by two harmonic oscillators prepared initially in a non-gaussian state formed by superposition of gaussian packets. The environment influence is observed through the evolution of entanglement. Our model provides a criterion of distance for identifying in which cases a common environment can induce entanglement. Three regimes are found: the short distance regime, equivalent to a bilinear system-reservoir coupling, the long distance regime in which the particles act like coupled to independent reservoirs and the intermediate regime suitable for the coexistence between decoherence and induced-entanglement.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Movimento browniano quântico</b>	<b>5</b>
2.1	Equações de movimento para uma partícula browniana . . . . .	5
2.2	Equações de movimento para duas partículas brownianas . . . . .	10
2.2.0.1	Acoplamento linear . . . . .	10
2.2.0.2	Acoplamento não linear . . . . .	15
2.3	Operador densidade reduzido . . . . .	19
2.3.1	Comparação com o modelo original . . . . .	24
2.3.2	Tratamento das não linearidades para o caso de uma partícula . . . . .	25
2.3.3	Tratamento das não linearidades para o caso de duas partículas . . . . .	28
<b>3</b>	<b>Evolução do emaranhamento em um sistema bipartite</b>	<b>32</b>
3.1	Introdução ao conceito de emaranhamento . . . . .	32
3.2	Medidas de emaranhamento para sistemas contínuos . . . . .	34
3.2.1	Critério de transposição parcial . . . . .	34
3.2.2	Negatividade . . . . .	36
3.2.3	Determinação do emaranhamento em estados não-gaussianos . . . . .	37
3.2.3.1	Critério entrópico . . . . .	37
3.2.3.2	Critério de Shchukin e Vogel . . . . .	38
3.3	Aplicações . . . . .	39
3.3.1	Estado gaussiano comprimido . . . . .	39
3.3.2	Par EPR . . . . .	44
3.3.3	Estados não-gaussianos . . . . .	45
3.3.3.1	Considerações sobre o propagador para dois osciladores brownianos . . . . .	45
3.3.3.2	Evolução do emaranhamento . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Conclusões</b>	<b>53</b>
<b>A</b>	<b>Propriedades da força flutuante</b>	<b>56</b>
<b>B</b>	<b>Propagador para o estado gaussiano comprimido</b>	<b>58</b>

<i>SUMÁRIO</i>	1
<b>C Propagador para dois osciladores</b>	<b>64</b>



# Capítulo 1

## Introdução

Desde suas origens em 1827 com o trabalho do biólogo Robert Brown sobre o movimento de grãos de pólen imersos em água e a posterior descrição da teoria quantitativa deste fenômeno desenvolvida por Einstein em 1905, o movimento browniano tem apresentado grande interesse tanto na pesquisa teórica e fundamental, por exemplo em questões relacionadas a como estender a mecânica quântica a sistemas abertos [2, 3, 4, 5, 6, 7], quanto nas aplicações mais diversas na física da matéria condensada, a físico-química e mais recentemente na teoria de informação e computação quântica.

No regime quântico o movimento browniano tem sido modelado considerando que nenhum sistema na natureza se encontra completamente isolado e, portanto, o sistema de interesse é acoplado a um reservatório térmico responsável pelas perdas de energia, mantendo o esquema de quantização usual [8, 9, 10, 13, 14]. Em geral, os detalhes microscópicos do reservatório e a forma como este se acopla ao sistema de interesse são muito complexos ou simplesmente não são relevantes para a dinâmica particular que se deseja estudar. Por esta razão, o Hamiltoniano que representa o reservatório e a forma explícita do acoplamento são escolhidos atendendo critérios fenomenológicos que nos permitam, no limite clássico, recuperar a dinâmica browniana. Quando o sistema de interesse tem um único grau de liberdade por exemplo, a dinâmica clássica deve estar representada por uma equação tipo Langevin, com um termo dissipativo que pode incluir ou não efeitos de memória e uma força flutuante cujo comportamento estatístico está determinado pela preparação inicial do sistema [13]. O modelo mais amplamente usado para descrever o movimento browniano de um grau de liberdade é formado por um conjunto de osciladores harmônicos independentes acoplados bilinearmente (coordenada-coordenada por exemplo) ao sistema de interesse e com uma função espectral  $J(\omega)$  cuja forma explícita está relacionada com a distribuição dos modos do banho e como estes interagem com a partícula browniana. Em particular, para obter uma equação de Langevin markoviana e ôhmica (força dissipativa proporcional a velocidade) é usada uma função espectral que depende linearmente da frequência dos modos do banho e que exclui da dinâmica todas as frequências maiores do que um valor de corte definido pelo tempo de relaxação do reservatório.

Para duas partículas podemos seguir critérios similares. Em geral, o centro de massa do sistema de interesse deve continuar se comportando como uma partícula browniana e estar sujeita a ação de uma força estocástica no limite clássico. Já o movimento relativo pode ter características adicionais,

podemos esperar por exemplo a existência de algum tipo de interação mediada pelo reservatório além do termo dissipativo usual. Em um trabalho prévio [12] mostramos que o modelo dos osciladores não interagente acoplados bilinearmente ao sistema de interesse não é apropriado para tratar um sistema dissipativo em que temos dois graus de liberdade. A generalização do modelo usual é desenvolvida permitindo que o acoplamento seja não linear nas variáveis de interesse e modificando a função espectral de tal forma que lembre o limite de baixas frequências da função resposta de um banho de osciladores interagentes. O novo modelo consegue comportar adequadamente a interação efetiva entre as partes do sistema de interesse assim como reproduzir a dinâmica dissipativa adequada para um e dois graus de liberdade.

A primeira parte deste trabalho se concentra em descrever os detalhes do modelo generalizado para duas partículas brownianas, comparando sempre que possível com o modelo de osciladores não interagentes e acoplamento bilinear. Especial atenção é dada ao papel desempenhado pelo contratermo, analisamos as implicações que tem para o sistema de duas partículas fazer uma extensão direta do contratermo usado para uma partícula e mostramos como as inconsistências podem ser resolvidas usando um acoplamento não linear nas variáveis de interesse.

A dinâmica quântica é apresentada através do operador densidade reduzido. A eliminação das variáveis do reservatório é feita dentro da formulação integral da mecânica quântica, o resultado deste processo nos fornece um propagador responsável pela evolução do estado inicial e que contém toda a influência do reservatório. Devido ao acoplamento não linear, a ação do sistema também é não linear e a integração funcional não pode ser resolvida em forma exata. Isto nos obriga a introduzir aproximações e considerações fenomenológicas adicionais para podermos obter expressões matematicamente mais tratáveis.

Grandes esforços são atualmente realizados para encontrar esquemas de processamento e armazenamento de informação que permitam manter os efeitos negativos da interação com o ambiente em níveis baixos. Igualmente a transmissão de informação ao longo de distâncias macroscópicas também apresenta um grande desafio na área de informação e computação quântica. Isto faz com que um melhor entendimento da interação com o ambiente de sistemas que possuem ao menos duas partes distinguíveis seja de grande interesse fundamental e prático. Na segunda parte deste trabalho nosso objetivo será usar o propagador obtido do modelo não linear para estudar a evolução das correlações quânticas em um sistema bipartite cujo estado inicial corresponde a um estado comprimido de dois modos. Por ser um estado com função de Wigner gaussiana seu tratamento matemático é bastante simples e o seu grau de emaranhamento pode ser completamente determinado usando critérios e medidas facilmente aplicáveis, como o critério de transposição parcial positiva e a negatividade, respectivamente, que serão brevemente introduzidos no corpo deste trabalho. O efeito da interação com o reservatório é observada na evolução de sistemas preparados inicialmente tanto em estados emaranhados como separáveis, podendo identificar desta forma a competição existente entre os processos de decoerência e indução de emaranhamento.

Finalmente, pretendemos estender o estudo da evolução do emaranhamento para estados não gaussianos. O sistema de interesse é formado por dois osciladores harmônicos e o estado inicial será

preparado como a superposição de dois pacotes de onda gaussianos. Devido à presença dos potenciais harmônicos o propagador não linear pode ser simplificado de modo que a dinâmica efetiva seja de novo linear e facilmente tratável. Para este caso são apontadas algumas particularidades encontradas na interação com o reservatório.

A intenção principal deste trabalho é mostrar que a interação com o ambiente, considerada geralmente como inimiga dos processos quânticos, pode ser vista também, sob determinadas condições, como fonte de correlações e coerência quântica. Esta visão dual faz com que o estudo dos sistemas dissipativos adquira uma importância dupla. Por uma parte devemos entender e aprender a controlar os efeitos de decoerência e por outra podemos aprender a aproveitar os efeitos de correlação induzida.

## Capítulo 2

# Movimento browniano quântico

Neste capítulo será feita uma revisão rápida do modelo básico que será usado para descrever o problema da dissipação quântica usando o paradigma do movimento browniano. O problema será abordado deduzindo as equações de movimento e o operador densidade para o sistema dissipativo partindo de uma Hamiltoniana que acopla em forma não linear o sistema de interesse a um reservatório modelado fenomenologicamente. O modelo será desenvolvido para uma e duas partículas brownianas distinguíveis. Posteriormente, faremos uma comparação com o tratamento original desenvolvido por Caldeira e Leggett chamando a atenção para as características essenciais que surgem quando o sistema de interesse tem mais do que um grau de liberdade acoplado com o ambiente dissipativo.

### 2.1 Equações de movimento para uma partícula browniana

Usualmente o movimento dissipativo de uma variável dinâmica é descrito através do acoplamento da dita variável (sistema de interesse) com um sistema maior responsável por sua perda de energia. Este último é chamado genericamente de *ambiente*, quando o seu número de graus de liberdade tende a infinito podemos chamá-lo de *reservatório* e finalmente se, prévio ao acoplamento, o ambiente se encontra no estado de equilíbrio termodinâmico à temperatura  $T$  é chamado de *banho térmico* ou simplesmente *banho*. Neste trabalho sempre consideraremos um meio dissipativo com infinitos graus de liberdade e inicialmente em equilíbrio termodinâmico. Portanto usaremos de forma indiscriminada os termos descritos acima sem nos preocuparmos pela sua rigorosa definição.

O Hamiltoniano do sistema completo pode ser definido na forma

$$H = H_S + H_R + H_I, \quad (2.1)$$

onde  $H_S$  é o Hamiltoniano do sistema de interesse,  $H_R$  é o Hamiltoniano do reservatório e  $H_I$  é o acoplamento. Em geral os detalhes microscópicos do reservatório e do acoplamento não são importantes ou são muito complexos para serem escritos explicitamente em (2.1), isto faz com que o procedimento mais adequado seja modelar o Hamiltoniano do reservatório e o termo de acoplamento

de forma que a dinâmica reduzida do sistema de interesse reproduza os efeitos dissipativos esperados. Em particular, no que diz respeito ao movimento browniano nosso modelo deve nos conduzir a uma equação tipo Langevin no limite clássico [1].

Consideraremos o sistema de interesse governado pelo Hamiltoniano

$$H_S = \frac{P^2}{2M} + V(x). \quad (2.2)$$

Por outra parte, se o reservatório é fracamente perturbado pela ação do sistema de interesse, o seu Hamiltoniano pode ser aproximado por um conjunto de osciladores harmônicos. A forma explícita de escrever esse Hamiltoniano apresenta um certo grau de flexibilidade sempre que o postulado de infinitos graus de liberdade e perturbação fraca seja respeitado, usualmente na literatura encontramos a expressão

$$H_R = \sum_{k=1}^N \left( \frac{P_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2 R_k^2}{2} \right), \quad (2.3)$$

mas também pode ser escrito na forma simetrizada [11]

$$H_R = \frac{1}{2} \sum_k \left( \frac{p_k p_{-k}}{m_k} + m_k \omega_k^2 R_k R_{-k} \right), \quad (2.4)$$

que permite um tratamento mais geral e deixa em evidência a analogia com alguns Hamiltonianos encontrados no estudo de sistemas de muitos corpos, como por exemplo o reservatório de fônons presente nas excitações de um sólido cristalino<sup>1</sup>.

A parte do Hamiltoniano que requer mais atenção é o termo correspondente ao acoplamento. Se consideramos que cada grau de liberdade do reservatório é fracamente perturbado, de tal forma que é possível desprezar os efeitos não lineares nas variáveis do reservatório, podemos escrever com total generalidade o acoplamento na forma

$$\sum_k \bar{C}_k(x) R_k,$$

ou, na forma simetrizada

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_k (C_{-k}(x) R_k + C_k(x) R_{-k}), \quad (2.5)$$

onde  $C_k(x)$  é uma função não linear da variável de interesse que será definida mais adiante. A interação pode conter também um termo extra, chamado usualmente de contratermo, usado para cancelar possíveis efeitos de renormalização do potencial  $V(x)$  induzidos pelo acoplamento com o reservatório e que na maior parte dos casos de interesse carecem de sentido físico [13]. O contratermo serve também para garantir a invariância translacional do Hamiltoniano quando  $V(x) = 0$ . Observemos inicialmente a situação de acoplamento bilinear amplamente usado na

<sup>1</sup> Quando o Hamiltoniano é escrito na forma (2.4), o índice  $k$  adquire um caráter mais geral, representando nesse caso a variável de momento associada a cada modo de oscilação.

literatura [27], neste caso o contratermo tem a forma  $\Delta V(x) = \sum_k \frac{C_k^2 x^2}{2m_k \omega_k^2}$  e o termo de interação fica

$$H_I = \sum_{k=1}^N C_k x R_k + \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2 x^2}{2m_k \omega_k^2}, \quad (2.6)$$

e completando quadrados o Hamiltoniano total pode ser escrito como

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(x) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{P_k^2}{m_k} + m_k \omega_k^2 \left( R_k + \frac{C_k}{m_k \omega_k^2} x \right)^2 \right\}, \quad (2.7)$$

onde usamos o Hamiltoniano do reservatório escrito na forma (2.3). A invariância translacional deste sistema, quando  $V(x) = 0$ , fica evidente se redefinimos as variáveis do reservatório [15],

$$R_k = -\frac{C_k}{m_k \omega_k^2} Y_k, \quad \text{e} \quad \mu_k = \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^4}. \quad (2.8)$$

Com essas definições e considerando  $P_k^{(y)}$  sendo o momento conjugado à variável  $Y_k$  temos

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(x) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{P_k^{(y)2}}{\mu_k} + \mu_k \omega_k^2 (Y_k - x)^2 \right\}. \quad (2.9)$$

Aqui, a dissipação é obtida através de osciladores de massas  $\mu_k$  centrados na variável  $x$ . Como veremos mais adiante no caso de termos mais de um grau de liberdade, acoplados com o reservatório, o contratermo adquire uma relevância maior ao estar também relacionado à possível interação, mediada pelo reservatório, entre as variáveis de interesse.

No caso mais geral, com um acoplamento dado por (2.5), o contratermo deve ser escrito na forma

$$\sum \frac{C_k(x) C_{-k}(x)}{2m_k \omega_k^2}. \quad (2.10)$$

Um contratermo desse tipo pode ser derivado diretamente, através de transformações canônicas, de um acoplamento tipo eletromagnético  $\frac{1}{2m_k} [P_k + \tilde{C}_k(x)]^2$ . Assim, nosso sistema dissipativo será descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (C_{-k}(x) R_k + C_k(x) R_{-k}) + \sum_{k=1}^N \left[ \frac{P_k P_{-k}}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 R_k R_{-k} \right] + \sum_{k=1}^N \frac{C_k(x) C_{-k}(x)}{2m_k \omega_k^2}, \quad (2.11)$$

ou equivalentemente pela Lagrangiana:

$$L = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 + \frac{1}{2}\sum_k m_k(\dot{R}_k\dot{R}_{-k} - \omega_k^2 R_k R_{-k}) - \frac{1}{2}\sum_k (C_{-k}(x)R_k + C_k(x)R_{-k}) - \sum_k \frac{C_k(x)C_{-k}(x)}{2m_k\omega_k^2}. \quad (2.12)$$

Para garantir a invariância translacional do sistema tomamos  $C_k(x) = \kappa_k e^{ikx}$ , onde  $\kappa_k$  pode ser interpretado como a transformada de Fourier do potencial de interação entre o sistema de interesse e o reservatório. Assim, se a partícula for deslocada de uma distância  $d$ , por exemplo, o acoplamento transforma-se em

$$C_{-k}(x+d)R_k = C_{-k}(x)e^{-ikd}R_k,$$

o que nos permite definir as novas variáveis do reservatório como

$$\tilde{R}_k = e^{-ikd}R_k,$$

mantendo assim a Lagrangiana (2.12) invariante. Observe que com esse tipo de acoplamento a questão da renormalização do potencial, devida ao acoplamento com o reservatório, fica igualmente resolvida, já que o contratermo contribui para a Lagrangiana (ou Hamiltoniano) com um termo constante que obviamente não produz nenhum efeito na dinâmica do sistema.

Depois de eliminar as variáveis do reservatório, a equação de movimento do sistema de interesse pode ser escrita como (o procedimento detalhado pode ser consultado na referência [11])

$$M\ddot{x} + \sum_k \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos k[x(t) - x(t')] \cos \omega_k(t - t') \dot{x}(t') dt' = f(t). \quad (2.13)$$

O termo do lado direito pode ser interpretado como uma força flutuante ( que depende das condições iniciais impostas ao sistema) e escrito como

$$f(t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \sum_k \left\{ \left( C_{-k}(x) \tilde{R}_k(0) + C_k(x) \tilde{R}_{-k}(0) \right) \cos \omega_k t + \left( C_{-k}(x) \dot{\tilde{R}}_k(0) + C_k(x) \dot{\tilde{R}}_{-k}(0) \right) \frac{\sin \omega_k t}{\omega_k} \right\}. \quad (2.14)$$

A expressão (2.13) claramente é uma equação do tipo Langevin, com um termo dissipativo totalmente geral e com memória completa, ou seja, o coeficiente de atrito contém informação de por onde e em que instante a partícula esteve. Aproveitando o comportamento linear do reservatório podemos escrever o segundo termo de (2.13) na forma:

$$TD \rightarrow \sum_k \int_0^\infty d\omega 2k^2 \kappa_k \kappa_{-k} \frac{\text{Im} \chi_k^{(0)}(\omega)}{\pi \omega} \cos k[x(t) - x(t')] \cos \omega(t - t'), \quad (2.15)$$

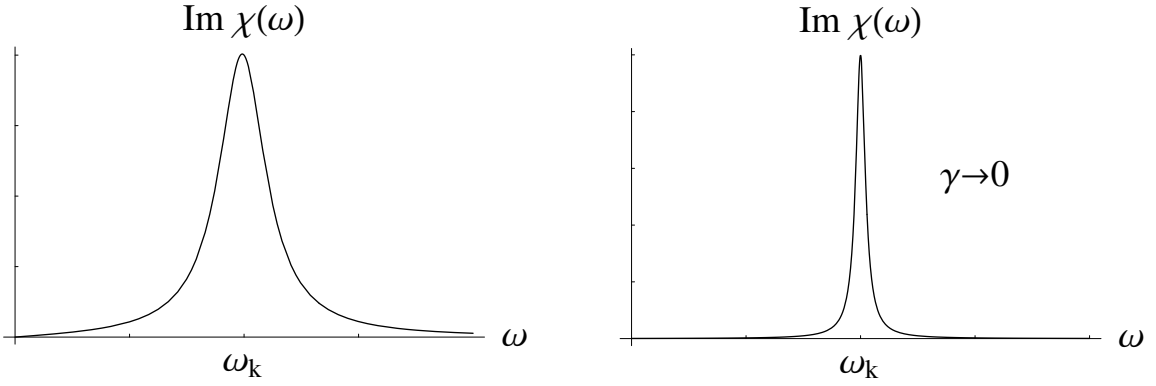


Figura 2.1: Susceptibilidade Dinâmica do Oscilador Amortecido

onde  $\chi_k^{(0)}(\omega)$  é a susceptibilidade dinâmica do  $k$ -ésimo oscilador não interagente e a sua parte imaginária corresponde a

$$\text{Im}\chi_k^{(0)}(\omega) = \frac{\pi}{2m_k\omega_k} \delta(\omega - \omega_k). \quad (2.16)$$

Como foi mostrado em [11, 12], a susceptibilidade dinâmica (2.16) pode ser generalizada para uma função da forma

$$\text{Im}\chi_k(\omega) \approx f(k)\omega\theta(\Omega - \omega), \quad (2.17)$$

onde incluímos a frequência de corte  $\Omega$  que define o tempo característico de relaxação do banho. A dinâmica markoviana é atingida quando tomamos o limite  $\Omega \rightarrow \infty$ , o que significa que os tempos de interesse sempre serão muito maiores do que o tempo de relaxação do banho. Por outro lado, a função  $f(k)$  é responsável pela influência não local do reservatório e nos permite introduzir, em analogia a  $\Omega$ , um comprimento  $k_0^{-1}$  característico do reservatório. A expressão (2.17) pode ser obtida substituindo a susceptibilidade dinâmica do oscilador livre pelo limite de frequências baixas (tempos longos) da susceptibilidade dinâmica de um oscilador amortecido, com coeficiente de amortecimento  $\gamma_k$ . Obviamente o banho de osciladores não-interagentes seria recuperado tomando o limite  $\gamma_k \rightarrow 0$  (ver fig: 2.1). A forma funcional (2.17) para a resposta dinâmica tem sido usada, por exemplo, para modelar reservatórios fermiônicos [24, 23].

Esta modificação permite-nos escrever a somatória em  $k$  do termo dissipativo como

$$\begin{aligned} & \sum_k \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \cos k[x(t) - x(t')] \cos \omega_k(t - t') \\ &= \int_0^\infty d\omega \sum_k \frac{2k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{\pi \omega} f(k) \omega \cos k[x(t) - x(t')] \cos \omega(t - t') \\ &= \sum_k 2k^2 \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \cos k[x(t) - x(t')] \delta(t - t'), \end{aligned}$$

que substituída em (2.13) e integrada em  $t'$  nos dá

$$M\ddot{x}(t) + \eta\dot{x}(t) = f(t), \quad (2.18)$$



onde definimos o coeficiente de dissipação

$$\eta = \sum_k k^2 \kappa_k \kappa_{-k} f(k). \quad (2.19)$$

Para completar a descrição da equação de Langevin (2.18) é necessário estudar as propriedades da força flutuante  $f(t)$ . Para isto, observemos primeiro que, considerando o banho inicialmente em equilíbrio termodinâmico e usando a invariância translacional do mesmo, podemos escrever, no limite clássico,

$$\langle \tilde{R}_k(0) \rangle = \langle \dot{R}_k(0) \rangle = \langle \dot{R}_k(0) \tilde{R}_{k'}(0) \rangle = 0, \quad (2.20)$$

$$\langle \dot{R}_k(0) \dot{R}_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k} \delta_{k(-k')} \quad \text{e} \quad \langle \tilde{R}_k(0) \tilde{R}_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k \omega_k^2} \delta_{k(-k')}, \quad (2.21)$$

onde  $\tilde{R}_k = R_k + \frac{C_k(x_0)}{m_k \omega_k^2}$ . Desta forma, assim como no caso linear, pode-se mostrar que as propriedades estocásticas de  $f(t)$  satisfazem  $\langle f(t) \rangle = 0$  e  $\langle f(t) f(t') \rangle = 2\eta k_B T \delta(t - t')$  (veja equação A.5 do apêndice A), que são expressões características de um reservatório sem memória. Em geral, dependendo da modelagem que fizermos da resposta linear do reservatório poderíamos ter casos mais gerais com coeficiente de atrito  $\eta(x, t)$  e forças flutuantes temporalmente correlacionadas.

O resultado apresentado em (2.18) coincide com aquele obtido acoplando o sistema e o reservatório na forma bilinear (coordenada-coordenada) e usando uma densidade espectral linear em  $\omega$ [13]

$$J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k) \equiv \eta \omega \theta(\Omega - \omega), \quad (2.22)$$

No caso de termos um único grau de liberdade no sistema de interesse, o modelo com acoplamento bilinear é completamente satisfatório mas, como veremos mais adiante, mostra-se inadequado para tratarmos com dois ou mais graus de liberdade e esse é o motivo de termos introduzido a generalização apresentada neste capítulo.

## 2.2 Equações de movimento para duas partículas brownianas

Neste capítulo apresentaremos o modelo generalizado que nos permite lidar adequadamente com dois ou mais partículas imersas em um meio dissipativo. Começaremos a nossa análise estudando alguns modelos lineares que tem sido usados na literatura [16, 48], em particular a nossa intenção é chamar a atenção para a pouca análise que tem sido dada à inclusão ou não de contratermos na parte do Hamiltoniano que acopla o sistema de interesse com o reservatório. A análise seguinte é apresentada para duas partículas sendo totalmente direta a generalização para  $N$  partículas distinguíveis.

### 2.2.0.1 Acoplamento linear

Foi mostrado anteriormente [13, 11] que, no caso de um partícula, um Hamiltoniano de acoplamento na forma  $\frac{1}{2m_k} [P_k + \tilde{C}_k x]^2$  produz automaticamente o contratermo adequado. Se usarmos um

procedimento similar no caso de duas partículas chegaremos, via transformações canônicas, à seguinte Lagrangiana de interação

$$L_I = - \sum_k \left( C_k^{(1)} x_1 + C_k^{(2)} x_2 \right) R_k - \sum_k \frac{1}{2m_k \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} x_1 + C_k^{(2)} x_2 \right)^2. \quad (2.23)$$

Inicialmente consideraremos que os coeficientes de acoplamento são diferentes. Observe-se que, embora nossa intenção seja estudar sistemas de interesse com graus de liberdade desacoplados para nos concentrar nas possíveis interações mediadas pelo reservatório, o contratérmo presente na expressão (2.23) produz uma Lagrangiana que, pelo menos formalmente, é equivalente a considerarmos os graus de liberdade  $x_1$  e  $x_2$  acoplados desde o começo e um contratérmo independente para cada grau de liberdade. Desta forma, o contratérmo em (2.23) leva em conta adequadamente o efeito de renormalização do potencial externo mas não permite afirmar com clareza se a interação entre as variáveis de interesse é um efeito induzido pelo reservatório ou foi introduzido ad hoc.

Para tornarmos a discussão um pouco mais geral escreveremos a Lagrangiana de interação com um contratérmo genérico  $L_C(x_1, x_2)$ , assim,

$$L_I = - \sum_k \left( C_k^{(1)} x_1 + C_k^{(2)} x_2 \right) R_k - L_C. \quad (2.24)$$

Vejamos a dinâmica representada por essa Lagrangiana. As equações de Euler-Lagrange neste caso são

$$\begin{aligned} m \ddot{x}_i(t) + \sum_k C_k^{(i)} R_k + \frac{\partial L_C}{\partial x_i} + \frac{dV(x_i)}{dx_i} &= 0 \\ m_k \ddot{R}_k + m_k \omega_k^2 R_k + C_k^{(1)} x_1 + C_k^{(2)} x_2 &= 0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

O procedimento para eliminar as variáveis do reservatório é totalmente padrão. Por exemplo, podemos resolver a equação de movimento para  $R_k$  usando o método da transformada de Laplace. Fazendo isso obtemos,

$$R_k(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \left\{ \frac{s R_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{\dot{R}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} \right\} e^{st} ds - \frac{1}{2\pi i m_k} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \frac{C_k^{(1)} \tilde{x}_1(s) + C_k^{(2)} \tilde{x}_2(s)}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds,$$

e usando a identidade  $\frac{1}{s^2 + \omega_k^2} = \frac{1}{\omega_k^2} \left\{ 1 - \frac{s^2}{s^2 + \omega_k^2} \right\}$ , temos então

$$\begin{aligned} R_k(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \left\{ \frac{s R_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{\dot{R}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} \right\} e^{st} ds - \frac{1}{2\pi i m_k \omega_k^2} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \left( C_k^{(1)} \tilde{x}_1(s) + C_k^{(2)} \tilde{x}_2(s) \right) e^{st} ds \\ &+ \frac{1}{2\pi i m_k \omega_k^2} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \frac{s^2}{s^2 + \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} \tilde{x}_1(s) + C_k^{(2)} \tilde{x}_2(s) \right) e^{st} ds. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Observe que o segundo termo da direita é simplesmente  $\frac{1}{m_k \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} x_1(t) + C_k^{(2)} x_2(t) \right)$ . Quando substituimos esta expressão na equação de movimento para  $x_i$  temos,

$$\begin{aligned} M\ddot{x}_i + \frac{dV(x_i)}{dx_i} - \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{m_k \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} x_1(t) + C_k^{(2)} x_2(t) \right) \\ + \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{2\pi i m_k \omega_k^2} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \frac{s^2}{s^2 + \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} \tilde{x}_1(s) + C_k^{(2)} \tilde{x}_2(s) \right) e^{st} ds \\ + \frac{\partial L_C}{\partial x_i} = - \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{2\pi i} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \left\{ \frac{s R_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} + \frac{\dot{R}_k(0)}{s^2 + \omega_k^2} \right\} e^{st} ds. \end{aligned} \quad (2.27)$$

O lado direito pode ser considerado como uma força flutuante que depende da distribuição inicial das variáveis do reservatório e o quarto termo da esquerda é o responsável pelo comportamento dissipativo do sistema. Este termo pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\{ \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{2\pi i m_k \omega_k^2} \int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} \frac{s}{s^2 + \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} \tilde{x}_1(s) + C_k^{(2)} \tilde{x}_2(s) \right) e^{st} ds \right\} \\ = \frac{d}{dt} \left\{ \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos \omega_k(t-t') \left( C_k^{(1)} x_1(t') + C_k^{(2)} x_2(t') \right) dt' \right\}, \end{aligned}$$

onde usamos o teorema da convolução e a transformada de Laplace da função  $\cos \omega_k(t-t')$ . A derivada em relação ao tempo nos dá

$$= \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{m_k \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} x_1(t) + C_k^{(2)} x_2(t) \right) - \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{m_k \omega_k} \int_0^t \sin \omega_k(t-t') \left( C_k^{(1)} x_1(t') + C_k^{(2)} x_2(t') \right) dt'$$

e integrando por partes

$$= \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{m_k \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} x_1(0) + C_k^{(2)} x_2(0) \right) + \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos \omega_k(t-t') \left( C_k^{(1)} \dot{x}_1(t') + C_k^{(2)} \dot{x}_2(t') \right) dt'. \quad (2.28)$$

O primeiro termo pode ser adicionado à força flutuante já que depende unicamente das condições iniciais e dos parâmetros do reservatório. As somas em  $k$  do segundo termo serão reescritas usando a função espectral definida em (2.22):

$$\sum_k \frac{C_k^{(i)2}}{m_k \omega_k^2} \cos \omega_k(t-t') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega(t-t'),$$

onde está implícito que a ação do reservatório é idêntica para as duas partículas. Da mesma forma, definindo uma função espectral de correlação

$$J_{ij}(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_k \frac{C_k^{(i)} C_k^{(j)}}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k), \quad (2.29)$$

poderíamos escrever

$$\sum_k \frac{C_k^{(i)} C_k^{(j)}}{m_k \omega_k^2} \cos \omega_k(t - t') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J_{ij}(\omega)}{\omega} \cos \omega(t - t').$$

Em geral, as funções espectrais estão relacionadas com a distribuição dos modos do banho e como estes interagem com as partículas brownianas.

Para obtermos uma dinâmica markoviana e ôhmica, assumimos uma função espectral da forma (2.22) que introduz a frequência de corte  $\Omega$  e o coeficiente de dissipação  $\eta$  e analogamente, através de (2.29), podemos introduzir o coeficiente  $\eta_{ij} = \eta_{ji}$ . Com estas definições a equação de movimento fica

$$M\ddot{x}_i + \frac{dV(x_i)}{dx_i} - \frac{2\eta_i\Omega}{\pi}x_i - \frac{2\eta_{ij}\Omega}{\pi}x_j + \eta_i\dot{x}_i + \eta_{ij}\dot{x}_j + \frac{\partial L_C}{\partial x_i} = f_i(t) \quad (2.30)$$

com

$$f_i(t) = -\sum_{k=1}^N \frac{C_k^{(i)}}{\omega_k} \sin \omega_k t \dot{R}_k(0) - \sum_{k=1}^N C_k^{(i)} \cos \omega_k t \left[ R_k(0) + \frac{1}{m_k \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} x_1(0) + C_k^{(2)} x_2(0) \right) \right]. \quad (2.31)$$

Como característica geral da equação (2.30) podemos observar que ela comporta um termo correspondente à dissipação esperada no caso de uma partícula ( $\eta_i \dot{x}_i$ ) e um termo de dissipação que depende da velocidade da segunda partícula, que também é um termo em princípio esperado. Para observar melhor o papel que desempenham os outros termos presentes introduziremos as variáveis de centro de massa e coordenada relativa do sistema

$$q = (x_1 + x_2)/2; \quad u = x_1 - x_2, \quad (2.32)$$

com essas variáveis podemos escrever as equações

$$M\ddot{q} + \frac{1}{2} \left( \frac{dV(x_1)}{dx_1} + \frac{dV(x_2)}{dx_2} \right) - \frac{2\Omega}{\pi} (\eta + \eta_{12}) q + (\eta + \eta_{12}) \dot{q} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial L_C}{\partial x_1} + \frac{\partial L_C}{\partial x_2} \right) = f_q(t) \quad (2.33)$$

e

$$M\ddot{u} + \left( \frac{dV(x_1)}{dx_1} - \frac{dV(x_2)}{dx_2} \right) - \frac{2\Omega}{\pi} (\eta - \eta_{12}) u + (\eta - \eta_{12}) \dot{u} + \left( \frac{\partial L_C}{\partial x_1} - \frac{\partial L_C}{\partial x_2} \right) = f_u(t), \quad (2.34)$$

com as forças flutuantes  $f_q(t) = \frac{1}{2} (f_1(t) + f_2(t))$  e  $f_u(t) = f_1(t) - f_2(t)$ . As equações (2.33) e (2.34) contém termos proporcionais às velocidades ( $\dot{q}$  e  $\dot{u}$ ) como esperado, mas também aparecem termos proporcionais às próprias variáveis de interesse ( $q$  e  $u$ ). Analisemos esses termos considerando por simplicidade os potenciais  $V(x_i) = 0$ . Na coordenada relativa o termo  $-\frac{2\Omega}{\pi} (\eta - \eta_{12}) u$  representa, pelo menos em princípio, uma interação entre as partículas mediada pelo reservatório. Já na coordenada do centro de massa o termo  $-\frac{2\Omega}{\pi} (\eta + \eta_{12}) q$ , quando  $V(x_i) = 0$ , funciona como se existisse um potencial externo atuando sobre o centro de massa do sistema, efeito que, em se tratando de modelar um sistema dissipativo de partículas livres, não tem explicação plausível. A solução para

este impasse provém do contratermo. Para cancelar o efeito indesejado sobre o centro de massa, o contratermo deve assumir a forma

$$L_C = \sum_k \frac{1}{2m_k \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} x_1(t) + C_k^{(2)} x_2(t) \right)^2, \quad (2.35)$$

assim,

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_C}{\partial x_i} &= \sum_k \frac{C_k^{(i)}}{m_k \omega_k^2} \left( C_k^{(1)} x_1(t) + C_k^{(2)} x_2(t) \right) \\ &= \frac{2\eta_i \Omega}{\pi} x_i(t) + \frac{2\eta_{ij} \Omega}{\pi} x_j(t), \end{aligned} \quad (2.36)$$

onde usamos de novo as densidades espectrais (2.22) e (2.29). A contribuição ao centro de massa pode ser escrita como

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial L_C}{\partial x_1} + \frac{\partial L_C}{\partial x_2} \right) = \frac{2\Omega}{\pi} (\eta + \eta_{12}) q(t),$$

que cancela a força indesejada e desta forma a equação de movimento do centro de massa adquire o seu caráter dissipativo esperado para partículas livres.

Vejamos agora o efeito do contratermo na equação da coordenada relativa, nesse caso temos

$$\left( \frac{\partial L_C}{\partial x_1} - \frac{\partial L_C}{\partial x_2} \right) = \frac{2\Omega}{\pi} (\eta - \eta_{12}) u(t),$$

que automaticamente cancela também o termo de interação induzido. Então, resumindo, o contratermo que nos garante a dinâmica esperada no centro de massa do sistema também impede a presença de um potencial de interação entre as partículas. Porém, continua existindo correlação entre elas através do termo dissipativo, as equações finais para este caso são

$$M\ddot{q} + (\eta + \eta_{12}) \dot{q} = f_q(t) \quad (2.37)$$

e

$$M\ddot{u} + (\eta - \eta_{12}) \dot{u} = f_u(t). \quad (2.38)$$

Observe aqui a importância de manter os coeficientes de acoplamento  $C_k^{(i)} \neq C_k^{(j)}$ , pois se eles fossem iguais também o seriam os coeficientes de atrito  $\eta$  e  $\eta_{12}$  deixando a dinâmica da coordenada relativa sem sentido já que, em média, representaria um sistema de duas partículas sendo afetadas por algum tipo de ação à distância que, dependendo das condições iniciais, poderia produzir um afastamento das partículas com velocidade constante. Por exemplo, se uma delas é levemente perturbada em uma determinada direção, a outra reagiria instantaneamente de tal forma que a condição  $\dot{u} = cte$  fosse satisfeita.

Embora a dinâmica representada por (2.37) e (2.38) pareça satisfatória, ainda permanecem alguns detalhes que podem incomodar quando vistos mais de perto. Por exemplo, não é muito claro como justificar a definição de  $\eta_{12}$ : o que este representa e porque é diferente de  $\eta$ ? Será que a definição do

coeficiente  $\eta_{12}$  é governada pela mesma escala de tempo que define o  $\eta$ ? Poderia ser incluída uma escala de distâncias de forma que fosse possível caracterizar a separação entre as partículas? Estas questões encontrarão resposta na seguinte seção quando aplicarmos o modelo com acoplamento não linear ao caso de duas partículas.

### 2.2.0.2 Acoplamento não linear

Na seção (2.1) anterior foi mostrado que, com um acoplamento do tipo  $C_k(x) = \kappa_k e^{ikx}$ , a invariância translacional do sistema faz com que não seja necessário introduzir um contratermo na Lagrangiana. Usaremos esse fato para estudar a dinâmica de duas partículas acopladas a um reservatório térmico. A generalização do modelo para o caso de duas partículas é direta, sendo representado pela Lagrangiana

$$L = \frac{1}{2}M\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}M\dot{x}_2^2 + \frac{1}{2}\sum_k m_k(\dot{R}_k\dot{R}_{-k} - \omega_k^2 R_k R_{-k}) - \frac{1}{2}\sum_k [(C_{-k}(x_1) + C_{-k}(x_2))R_k + (C_k(x_1) + C_k(x_2))R_{-k}]. \quad (2.39)$$

As equações de movimento obtidas desta Lagrangiana são

$$M\ddot{x}_i + \frac{1}{2}\sum_k \left( \frac{\partial C_{-k}(x_i)}{\partial x_i} R_k + \frac{\partial C_k(x_i)}{\partial x_i} R_{-k} \right) = 0 \quad (2.40)$$

e

$$m_k\ddot{R}_{-k} + C_{-k}(x) + \omega_k^2 R_{-k} = 0. \quad (2.41)$$

O processo de obtenção das equações dissipativas é o mesmo que apresentado anteriormente (ver detalhes em [11]). Usando a transformada de Laplace para resolver a equação para  $R_k$  e substituindo em (2.40) podemos escrever, usando  $C_k(x) = \kappa_k e^{ikx}$ , a equação para  $x_i$  como

$$\begin{aligned} M\ddot{x}_i + \sum_k \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos k[x_i(t) - x_i(t')] \cos \omega_k(t - t') \dot{x}_i(t') dt' \\ + \sum_k \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \int_0^t \cos k[x_i(t) - x_j(t')] \cos \omega_k(t - t') \dot{x}_j(t') dt' \\ + \sum_k \frac{k \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \sin k[x_i(t) - x_j(t)] = f_i(t), \quad \text{com } i \neq j \end{aligned} \quad (2.42)$$

onde

$$f_i(t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k \left\{ \left( C_{-k}(x_i) \tilde{R}_k(0) + C_k(x_i) \tilde{R}_{-k}(0) \right) \cos \omega_k t \right. \\ \left. + \left( C_{-k}(x_i) \dot{\tilde{R}}_k(0) + C_k(x_i) \dot{\tilde{R}}_{-k}(0) \right) \frac{\sin \omega_k t}{\omega_k} \right\}. \quad (2.43)$$

com  $\tilde{R}_k = R_k + \frac{C_k[x_1(0)] + C_k[x_2(0)]}{m_k \omega_k^2}$ . Usando novamente a susceptibilidade dinâmica do banho definida em (2.17) podemos escrever as somas em  $k$  como

$$\sum_k \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \cos k[x_i(t) - x_j(t')] \cos \omega_k(t - t') = 2 \sum_k k^2 \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \cos k[x_i(t) - x_j(t')] \delta(t - t') \quad (2.44)$$

e

$$\sum_k \frac{k \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \sin k[x_1(t) - x_2(t)] = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \sum_k k \kappa_k \kappa_{-k} \frac{\text{Im} \chi_k(\omega)}{\omega} \sin k[x_1(t) - x_2(t)] \\ = \frac{2\Omega}{\pi} \sum_k k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \sin k[x_1(t) - x_2(t)]. \quad (2.45)$$

Da primeira parte da seção (2.1) vimos que é possível definir o coeficiente de dissipação  $\eta$  como função das propriedades microscópicas do banho através da soma

$$\eta = \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k^2, \quad (2.46)$$

e, como de hábito, a soma pode ser transformada em uma integral através da substituição  $\sum_k \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int dk$ , onde  $L$  é a dimensão característica do sistema. Podemos, então, definir a função

$$\eta g(k) = \frac{L}{2\pi} \kappa_k \kappa_{-k} f(k). \quad (2.47)$$

A forma exata de  $g(k)$  só pode ser estabelecida se partirmos de um modelo microscópico para o reservatório, sendo necessário conhecer a resposta linear do banho e o tipo de interação que existe entre a partícula externa e o reservatório para podermos determinar os parâmetros de acoplamento  $\kappa_k$ . Entretanto, há inúmeras situações que podemos analisar nestes sistemas através de modelagens fenomenológicas de  $g(k)$ .

A principal característica de  $g(k)$  é deduzida de (2.46), isto é,

$$\int_0^\infty g(k) k^2 dk = 1. \quad (2.48)$$

Existem muitas funções que satisfazem essa propriedade. Por exemplo, podemos escolher

$$g(k) = A e^{-k/k_0}, \quad (2.49)$$

onde  $k_0^{-1}$  determina a escala de comprimentos do sistema<sup>2</sup> e  $A = 1/(2k_0^3)$  é uma constante de normalização definida por (2.48). Usando esta função, as somas em (2.44) e (2.45), podem ser transformadas em integrais e resultam em

$$\begin{aligned} \sum_k \frac{k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \cos kr \cos \omega_k(t-t') &= 2\eta \delta(t-t') \left( \frac{1-3r^2 k_0^2}{(1+k_0^2 r^2)^3} \right) \\ \sum_k \frac{k \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \sin kr &= \frac{2\Omega\eta}{\pi} \frac{r}{(k_0^2 r^2 + 1)^2}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

chegando finalmente à equação

$$\begin{aligned} M\ddot{x}_i(t) + \eta\dot{x}_i(t) + \eta \left( \frac{1-3[x_i(t)-x_j(t)]^2 k_0^2}{(1+k_0^2[x_i(t)-x_j(t)]^2)^3} \right) \dot{x}_j \\ + \frac{2\Omega\eta}{\pi} \frac{[x_i(t)-x_j(t)]}{(k_0^2[x_i(t)-x_j(t)]^2 + 1)^2} = f_i(t) \quad \text{com } i \neq j \end{aligned} \quad (2.51)$$

Para melhor analisar o efeito do reservatório sobre o sistema de duas partículas vamos reescrever estas equações usando as variáveis do centro de massa e coordenada relativa definidas em (2.32). Com essa substituição obtemos as equações

$$M\ddot{u}(t) + (\eta - \eta[u(t)]) \dot{u}(t) + \frac{4\Omega\eta}{\pi} \frac{u(t)}{(k_0^2 u^2(t) + 1)^2} = f_1(t) - f_2(t) \quad (2.52)$$

e

$$M\ddot{q}(t) + (\eta + \eta[u(t)]) \dot{q}(t) = \frac{f_1(t) + f_2(t)}{2}, \quad (2.53)$$

com

$$\eta[u(t)] = \eta \left( \frac{1-3u^2(t)k_0^2}{(1+k_0^2 u^2(t))^3} \right). \quad (2.54)$$

Como é conhecido no movimento browniano [1], a influência do reservatório pode ser representada por uma força efetiva  $F(t)$  que flutua rapidamente no tempo e possui um perfil totalmente irregular e outra cujo comportamento sistemático depende da velocidade média. Este termo é o responsável pela perda de energia e leva a partícula ao seu estado de equilíbrio com o banho. Entretanto, em nosso caso, este termo contém a influência pura do banho ( $\eta$ ) e a influência da segunda partícula mediada pelo banho ( $\eta[u(t)]$ ).

O centro de massa apresenta um movimento dissipativo no qual o coeficiente de dissipação não é mais constante, mas depende da posição relativa das partículas. Observe que, a diferença do caso com acoplamento linear, não aparecem termos espúrios que possam ser confundidos com contribuições de potenciais externos. Nota-se que para distâncias relativas tais que  $k_0 u \rightarrow \infty$  as partículas não se enxergam e tanto o centro de massa quanto a coordenada relativa executam movimentos brownianos puros.

<sup>2</sup>Por exemplo, em reservatórios fermiônicos  $k_0$  é proporcional ao número de onda de Fermi  $k_F$ .



Na equação para a coordenada relativa, além da dissipação, observa-se uma interação efetiva entre as partículas, induzida pelo banho, que é derivada de um potencial do tipo

$$V(k_0u) = -\frac{2\Omega\eta}{\pi k_0^2 (k_0^2 u^2(t) + 1)}. \quad (2.55)$$

No limite de curtas distâncias, ou  $k_0u \ll 1$ , temos um potencial harmônico

$$V(k_0u \ll 1) = -\frac{M\omega^2}{2k_0^2} + \frac{M\omega^2 u^2(t)}{2}, \quad (2.56)$$

onde

$$\omega = \sqrt{\frac{4\eta\Omega}{M\pi}} \quad (2.57)$$

é a frequência de oscilação que depende do coeficiente de dissipação  $\eta$  e da frequência de corte  $\Omega$ .

No limite oposto,  $k_0u \gg 1$ , o potencial efetivo (2.55) reproduz um potencial de curto alcance

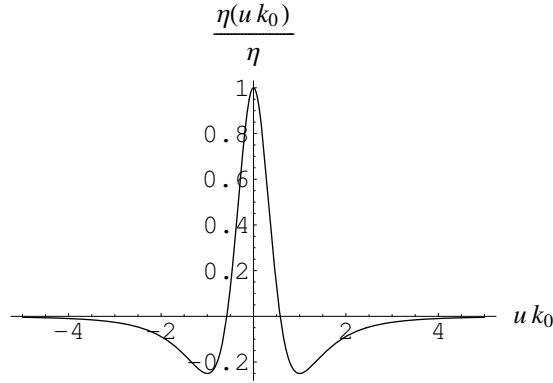
$$V(k_0u \gg 1) = -\frac{2\Omega\eta}{\pi k_0^4 u^2(t)}. \quad (2.58)$$

Por outro lado, as forças flutuantes  $f_1(t)$  e  $f_2(t)$ , dentro do modelo exposto neste capítulo, satisfazem as propriedades estocásticas típicas do chamado ruído branco, isto é,  $\langle f_i(t) \rangle = 0$  e  $\langle f_i(t)f_i(t') \rangle = 2\eta k_B T \delta(t-t')$ . Além disto existe uma propriedade adicional que diz respeito à distribuição espacial do sistema. As forças  $f_1(t)$  e  $f_2(t)$  são correlacionadas espacialmente (ver figura 2.2), isto é,

$$\langle f_1(t)f_2(t') \rangle = 2\eta[u(t)]k_B T \delta(t-t'). \quad (2.59)$$

É interessante notar que a equação (2.52) para a coordenada relativa está sujeita à força estocástica efetiva  $f_u(t) \equiv f_1(t) - f_2(t)$  tal que  $\langle f_u(t) \rangle = 0$  e  $\langle f_u(t)f_u(t') \rangle = 4kT(\eta - \eta[u])\delta(t-t')$ . Consequentemente, vemos que à medida que o termo dissipativo de (2.52) possa ser desprezado, quando  $k_0u \ll 1$ , o mesmo ocorre para a flutuação de  $f_u(t)$  e a dinâmica resultante é a de um oscilador harmônico com a frequência de oscilação dada por (2.57). No limite oposto,  $k_0u \gg 1$ , esta mesma equação representa o movimento browniano de uma partícula livre de massa reduzida  $M/2$ . Para valores intermediários de  $uk_0$  a coordenada relativa estará sujeita tanto à dissipação quanto a flutuações dependentes de posição.

A coordenada do centro de massa está sujeita à força estocástica  $f_q(t) \equiv (f_1(t) + f_2(t))/2$  que satisfaz  $\langle f_q(t) \rangle = 0$  e  $\langle f_q(t)f_q(t') \rangle = kT(\eta + \eta[u])\delta(t-t')$ . É fácil ver que no limite  $k_0u \gg 1$  a equação (2.98) representa o movimento de uma partícula browniana de massa  $2M$  como era de se esperar.

Figura 2.2: Correlação Espacial de  $f_1(t)$  e  $f_2(t)$ 

### 2.3 Operador densidade reduzido

Agora que as bases fenomenológicas do nosso modelo ficaram claras, apresentaremos a dinâmica quântica do sistema de interesse em termos do operador densidade reduzido. Trataremos diretamente o problema de dois graus de liberdade dissipativos. As expressões para um único grau de liberdade serão obtidas da expressão mais geral como um limite particular.

A Lagrangiana de nosso sistema composto foi definida em (2.39)

$$L = L_S + L_R + L_I, \quad (2.60)$$

sendo  $L_S$  a Lagrangiana do sistema de duas partículas quando isoladas,  $L_R$  a Lagrangiana do reservatório e  $L_I$  o termo de interação, que como já foi discutido não precisa de contratermo.

A evolução temporal do operador densidade reduzido do sistema de duas partículas é obtido traçando as variáveis do reservatório

$$\tilde{\rho}(t) = Tr_R \{ \exp(-iHt/\hbar) \rho(0) \exp(iHt/\hbar) \}, \quad (2.61)$$

onde  $H$  e  $\rho(0)$  são, respectivamente, o Hamiltoniano e o operador densidade inicial do sistema composto. O estado inicial pode ser considerado separável, isto é, assumimos que a interação entre o sistema de interesse e o reservatório é ligada em  $t = 0^+$ . Assim,

$$\rho(0) = \tilde{\rho}(0) \rho_R(0), \quad (2.62)$$

onde  $\tilde{\rho}(0)$  é o operador densidade inicial do sistema de interesse e  $\rho_R(0) = Z_R^{-1} \exp(-\beta H_R)$  é o operador densidade canônico do banho térmico não perturbado.

Na representação de coordenadas, introduzindo a notação vetorial  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$  e  $\mathbf{y} = (y_1, y_2)$ , o operador densidade reduzido pode ser escrito como

$$\tilde{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \iint d^2x' d^2y' J(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t; \mathbf{x}', \mathbf{y}', 0) \tilde{\rho}(\mathbf{x}', \mathbf{y}', 0) \quad (2.63)$$

e o superpropagador  $J$  para o sistema de duas partículas é dado por

$$J(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t; \mathbf{x}', \mathbf{y}', 0) = \int_{\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}} \mathcal{D}\mathbf{x}(t') \int_{\mathbf{y}'}^{\mathbf{y}} \mathcal{D}\mathbf{y}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \{S_0[\mathbf{x}(t')] - S_0[\mathbf{y}(t')]\} F[\mathbf{x}(t'), \mathbf{y}(t')], \quad (2.64)$$

onde  $S_0$  é a ação do sistema de duas partículas quando isolado e  $F$  é o funcional de influência de Feynman-Vernon [21] que em termos de operadores adquire a forma

$$F[\mathbf{x}(t'), \mathbf{y}(t')] = \text{Tr}_R \left( \rho_R U_{RI}^\dagger[\mathbf{y}(t')] U_{RI}[\mathbf{x}(t')] \right), \quad (2.65)$$

aqui  $U_{RI}[\mathbf{x}(t')]$  é o operador de evolução temporal unitário para o Hamiltoniano dependente do tempo  $H_{RI} = H_R + H_I[\mathbf{x}(t')]$ , com um dado  $x_1(t')$  e  $x_2(t')$ , sendo  $0 \leq t' \leq t$ . Isto significa que um dado par de trajetórias  $x_1(t')$  e  $x_2(t')$  atua como um termo de força sobre o ambiente. O operador de evolução temporal é descrito pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_{RI}(t) = H_{RI}(t) U_{RI}(t), \quad (2.66)$$

com a condição inicial  $U_{RI}(0) = \mathbf{1}$  (onde  $\mathbf{1}$  é o operador identidade) e tem como solução formal

$$U_{RI}(t) = T e^{-i \int_0^t dt' H_{RI}(t')/\hbar}, \quad (2.67)$$

onde  $T$  é o operador de ordenamento cronológico. Na versão de interação este resultado pode ser escrito como [22]

$$U_{RI}(t) = e^{-iH_R t/\hbar} T e^{-i \int_0^t dt' \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')]/\hbar}, \quad (2.68)$$

onde  $\tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')] = e^{iH_R t'/\hbar} H_I[\mathbf{x}(t')] e^{-iH_R t'/\hbar}$ . Inserindo (2.68) em (2.65) temos

$$F[\mathbf{x}(t'), \mathbf{y}(t')] = \text{Tr}_R \left( \rho_R T e^{i \int_0^t dt' \tilde{H}_I[\mathbf{y}(t')]/\hbar} T e^{-i \int_0^t dt' \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')]/\hbar} \right). \quad (2.69)$$

O grande número de graus de liberdade do reservatório nos permite assumir que o sistema de interesse induz apenas uma perturbação fraca no ambiente e podemos expandir o produto cronológico até segunda ordem em  $\tilde{H}_I$  [23],

$$T e^{-i \int_0^t dt' \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')]/\hbar} \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')] \tilde{H}_I[\mathbf{x}(s)]. \quad (2.70)$$

Substituindo em (2.69) e traçando as variáveis do reservatório encontramos

$$\begin{aligned} F[\mathbf{x}(t'), \mathbf{y}(t')] \approx & 1 - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \left( \langle \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')] \tilde{H}_I[\mathbf{x}(s)] \rangle + \langle \tilde{H}_I[\mathbf{y}(s)] \tilde{H}_I[\mathbf{y}(t')] \rangle \right. \\ & \left. - \langle \tilde{H}_I[\mathbf{y}(t')] \tilde{H}_I[\mathbf{x}(s)] \rangle - \langle \tilde{H}_I[\mathbf{y}(s)] \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')] \rangle \right). \end{aligned}$$

como estamos interessados somente nos termos até segunda ordem em  $\tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')]$  o funcional de

influência acima é equivalente a

$$\begin{aligned}
 F[\mathbf{x}(t'), \mathbf{y}(t')] &= \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \left( \langle \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')] \tilde{H}_I[\mathbf{x}(s)] \rangle + \langle \tilde{H}_I[\mathbf{y}(s)] \tilde{H}_I[\mathbf{y}(t')] \rangle \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \langle \tilde{H}_I[\mathbf{y}(t')] \tilde{H}_I[\mathbf{x}(s)] \rangle - \langle \tilde{H}_I[\mathbf{y}(s)] \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')] \rangle \right) \right\}. \quad (2.71)
 \end{aligned}$$

Agora, escreveremos explicitamente as médias em (2.71) considerando o acoplamento  $C_k(x) = \kappa_k e^{ikx}$  e invocando a invariância translacional do sistema. Assim, temos que  $\langle R_k(t') R_{k'}(s) \rangle = 0$  a menos que  $k' = -k$ , o que nos permite escrever

$$\langle \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')] \tilde{H}_I[\mathbf{x}(s)] \rangle = \frac{1}{2} \sum_k \{ C_{-k}[\mathbf{x}(t')] C_k[\mathbf{x}(s)] + C_k[\mathbf{x}(t')] C_{-k}[\mathbf{x}(s)] \} \langle R_k(t') R_{-k}(s) \rangle. \quad (2.72)$$

A expressão  $\langle R_k(t') R_{-k}(s) \rangle$  pode ser escrita em termos da resposta linear do banho através do teorema de flutuação dissipação. Definimos por simplicidade a função  $\alpha_k(t' - s) = \langle R_k(t') R_{-k}(s) \rangle$  e

$$\alpha_k(t' - s) = \frac{\hbar}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Im} \tilde{\chi}_k(\omega) \frac{e^{-i\omega(t'-s)}}{1 - e^{-\omega\hbar\beta}}, \quad (2.73)$$

onde  $\tilde{\chi}_k(\omega)$  é a susceptibilidade dinâmica do reservatório. Assim, as médias em (2.71) adquirem a forma final

$$\langle \tilde{H}_I[\mathbf{x}(t')] \tilde{H}_I[\mathbf{x}(s)] \rangle = \frac{1}{2} \sum_k \{ C_{-k}[\mathbf{x}(t')] C_k[\mathbf{x}(s)] + C_k[\mathbf{x}(t')] C_{-k}[\mathbf{x}(s)] \} \alpha_k(t' - s), \quad (2.74)$$

e temos expressões similares para os outros termos. Com estes resultados encontramos o funcional de influência não linear

$$\begin{aligned}
 F[\mathbf{x}(t'), \mathbf{y}(t')] &= \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \alpha_k^{(R)}(t' - s) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{i}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \alpha_k^{(I)}(t' - s) \right\}, \quad (2.75)
 \end{aligned}$$

onde foi definido o kernel não linear

$$\begin{aligned}
 \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] &= \sum_{i,j=1}^2 [\cos k[x_i(t') - x_j(s)] - \cos k[y_i(t') - y_j(s)] \\
 &\quad - \cos k[y_i(t') - x_j(s)] + \cos k[x_i(t') - y_j(s)], \quad (2.76)
 \end{aligned}$$

e as funções  $\alpha_k^{(R)}(t' - s)$  e  $\alpha_k^{(I)}(t' - s)$  são, respectivamente, as partes real e imaginária da função  $\alpha_k(t' - s)$ ,

$$\alpha_k^{(R)}(t' - s) = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \operatorname{Im} \tilde{\chi}_k(\omega) \cos \omega(t' - s) \coth(\hbar\beta\omega/2) \quad (2.77)$$

$$\alpha_k^{(I)}(t' - s) = -\frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \tilde{\chi}_k(\omega) \sin \omega(t' - s). \quad (2.78)$$

Usando a relação (2.17) para a susceptibilidade dinâmica, podemos escrever a parte imaginária de  $\alpha_k(t' - s)$  como

$$\alpha_k^{(I)}(t' - s) = -\frac{\hbar}{\pi} f(k) \int_0^\Omega d\omega \frac{d}{ds} \cos \omega(t' - s).$$

Esta expressão, quando substituída na integral da parte imaginária do expoente em (2.75) e integrada por partes com respeito a  $s$ , nos leva a

$$\begin{aligned} & \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \alpha_k^{(I)}(t' - s) \\ &= -\frac{\hbar}{\pi} f(k) \left\{ \int_0^t dt' \Omega \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s = t'] - \int_0^t dt' \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s = 0] \frac{\sin \Omega t'}{t'} \right. \\ & \quad \left. - \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \frac{\sin \Omega(t' - s)}{(t' - s)} \frac{d}{ds} \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \right\}, \end{aligned}$$

No limite de tempos longos,  $t \gg \Omega^{-1}$ , podemos aproximar

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin \Omega(t' - s)}{(t' - s)} \approx \delta(t' - s);$$

o que nos permite simplificar o nosso resultado

$$\begin{aligned} & \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \alpha_k^{(I)}(t' - s) \\ &= -\hbar f(k) \left\{ \frac{\Omega}{\pi} \int_0^t dt' \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s = t'] - \int_0^t dt' \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s = 0] \delta(t') \right. \\ & \quad \left. - \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \delta(t' - s) \frac{d}{ds} \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \right\} \\ &= -\hbar f(k) \left\{ \frac{\Omega}{\pi} \int_0^t dt' \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s = t'] - \frac{1}{2} \int_0^t dt' \frac{d}{ds} \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \Big|_{s=t'} \right\}. \end{aligned}$$

A segunda integral em  $t'$  anula-se porque estamos considerando que o acoplamento é ligado em  $t = 0^+$  [25].

Da definição de  $\tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s]$  encontramos

$$\tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s = t'] = 2 (\cos k[x_1(t') - x_2(t')] - \cos k[y_1(t') - y_2(t')]).$$

Observe que no caso de uma única partícula browniana este termo seria identicamente nulo. Temos

também,

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{ds} \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \right|_{s=t'} &= kf(k) \int_0^t dt' \left( \sum_{i,j=1}^2 \sin k[x_i(t') - y_j(t')] [\dot{x}_i(t') + \dot{y}_j(t')] \right. \\ &\quad \left. + \sin k[x_1(t') - x_2(t')] [\dot{x}_2(t') - \dot{x}_1(t')] - \sin k[y_1(t') - y_2(t')] [\dot{y}_2(t') - \dot{y}_1(t')] \right). \end{aligned}$$

Assim, o termo associado à renormalização do potencial, que surgiria naturalmente do kernel  $\tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s = t']$ , cancela-se automaticamente e não é necessário incluir um contratérmo no Hamiltoniano inicial. A razão física deste fato já foi analisada anteriormente e reflete a invariância translacional do nosso modelo.

Usando as expressões anteriores podemos escrever a parte imaginária do expoente em (2.75), na forma compacta

$$-\frac{1}{2\hbar} \int_0^t dt' \tilde{L}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] + \frac{2\Omega}{\hbar\pi} \int_0^t dt' V[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'], \quad (2.79)$$

onde definimos o kernel instantâneo

$$\begin{aligned} \tilde{L}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] &= \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} kf(k) \left( \sum_{i,j=1}^2 \sin k[x_i(t') - y_j(t')] [\dot{x}_i(t') + \dot{y}_j(t')] \right. \\ &\quad \left. + \sin k[x_1(t') - x_2(t')] [\dot{x}_2(t') - \dot{x}_1(t')] - \sin k[y_1(t') - y_2(t')] [\dot{y}_2(t') - \dot{y}_1(t')] \right) \end{aligned} \quad (2.80)$$

e

$$V[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] = \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) (\cos k[x_1(t') - x_2(t')] - \cos k[y_1(t') - y_2(t')]). \quad (2.81)$$

Os bem entendidos efeitos de dissipação e difusão estão incluídos em  $\tilde{L}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t']$ . Note que este termo contém uma contribuição que provém diretamente do ambiente e outra induzida através da segunda partícula. Por outra parte, a função  $V[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t']$  introduz um efeito novo que pode ser interpretado como uma interação efetiva mediada pelo ambiente e cuja forma explícita depende da modelagem feita da função  $f(k)$ .

Neste ponto o funcional de influência tem a forma

$$\begin{aligned} F[\mathbf{x}(t'), \mathbf{y}(t')] &= \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} \tilde{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \alpha_k^{(R)}(t' - s) \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{2\hbar} \int_0^t dt' \tilde{L}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] + \frac{i2\Omega}{\hbar\pi} \int_0^t dt' V[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] \right\}. \end{aligned} \quad (2.82)$$

O funcional acima, escrito na aproximação markoviana, contém toda a influência não linear do reservatório sobre o sistema de interesse. Para observar mais claramente os efeitos de interação e correlação entre as partículas, a expressão acima pode ser reescrita separando os termos que correspondem a cada partícula individualmente dos que estão formados por variáveis que pertencem

a partículas diferentes. Isto nos dá o funcional de influência como produto de três fatores

$$\begin{aligned}
 F[\mathbf{x}(t'), \mathbf{y}(t')] &= \mathcal{F}[x_1(t'), y_1(t')] \mathcal{F}[x_2(t'), y_2(t')] \\
 &\times \exp \left( -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} \bar{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] \alpha_k^{(R)}(t' - s) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{i}{2\hbar} \int_0^t dt' \bar{L}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] + \frac{i2\Omega}{\hbar\pi} \int_0^t dt' V[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] \right)
 \end{aligned} \tag{2.83}$$

onde  $\bar{K}_k$  e  $\bar{L}$  estão definidos em forma análoga a (2.76) e (2.80), respectivamente, mas excluindo os termos com  $i = j$ . O fator  $\mathcal{F}[x_i(t'), y_i(t')]$  corresponde ao funcional que contém a influência do reservatório sobre a partícula  $i$  quando a partícula  $j$  não está presente e o terceiro termo de (2.83) responde exclusivamente por efeitos inter-partícula.

O propagador (2.64), com o funcional (2.83), determina completamente a evolução temporal (para tempos longos comparados com o tempo característico de relaxação do ambiente) do operador densidade inicial do sistema de interesse. A dinâmica aqui descrita é altamente não linear, essa característica faz com que obter o operador densidade reduzido final, partindo de uma distribuição inicial dada, seja uma tarefa bastante complexa. No que segue trataremos de estudar mais de perto cada fator da expressão (2.83), com o objetivo de extrairmos informações que nos permitam escrever o mencionado funcional em uma forma mais amigável.

### 2.3.1 Comparação com o modelo original

O funcional de influência (2.83) ainda é muito geral e podemos fazer algumas considerações adicionais. O fator  $\mathcal{F}[x_i(t'), y_i(t')]$  pode ser escrito explicitamente como

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}[x_i(t'), y_i(t')] &= \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k \int_0^t dt' \sin k [y_i(t') - x_i(t')] (\dot{x}_i(t') + \dot{y}_i(t')) \right. \\
 &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} [\cos k [x_i(t') - x_i(s)] - \cos k [y_i(t') - x_i(s)] \\
 &\quad \left. + \cos k [y_i(t') - y_i(s)] - \cos k [y_i(s) - x_i(t')] \right\} \alpha_k^{(R)}(t' - s).
 \end{aligned} \tag{2.84}$$

Já que a expressão corresponde a uma única partícula omitiremos o índice  $i$  na análise seguinte.

Este é o funcional que obteríamos se considerarmos uma única partícula interagindo com o banho térmico dentro do modelo definido em (2.11). Observe que, em contraposição à dinâmica clássica, existe uma influência não local sobre o sistema de interesse apesar de termos um único grau de liberdade.

A dinâmica browniana usual é obtida quando assumimos que o movimento da partícula está restrito a uma região pequena quando comparada com algum comprimento característico do banho,

$k_0^{-1}$ . Assim, podemos assumir  $k(y(t') - x(t')) \ll 1$  que nos permite aproximar

$$\sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k \sin k[y(t') - x(t')] = \eta(y(t') - x(t')),$$

com

$$\eta = \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k^2, \quad (2.85)$$

como foi definido anteriormente.

Dentro da mesma aproximação, o integrando da parte real do expoente em (2.84) pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \cos k[x(t') - x(s)] - \cos k[y(t') - x(s)] + \cos k[y(t') - y(s)] - \cos k[y(s) - x(t')] \\ = k^2[x(t') - y(t')][x(s) - y(s)], \end{aligned}$$

o que nos leva diretamente a

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[x(t'), y(t')] = \exp \left\{ \frac{i\eta}{2\hbar} \int_0^t dt' (y(t') - x(t')) (\dot{x}(t') + \dot{y}(t')) \right. \\ \left. - \frac{\eta}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \int_0^\infty d\omega \omega \coth\left(\frac{\hbar\beta\omega}{2}\right) (x(t') - y(t')) \cos \omega(t' - s)(x(s) - y(s)) \right\}. \quad (2.86) \end{aligned}$$

A expressão acima coincide com o funcional de influência obtido usando um banho de osciladores não interagentes, com densidade espectral  $J(\omega) = \eta\omega$ , acoplados linearmente à variável de interesse[13].

### 2.3.2 Tratamento das não linearidades para o caso de uma partícula

Em casos mais gerais, podemos realizar simplificações menos fortes. Por exemplo, se escrevemos o propagador markoviano para uma partícula, em termos das coordenadas

$$q(t) = (x(t) + y(t))/2; \quad \xi(t) = x(t) - y(t), \quad (2.87)$$

que representam, respectivamente, a coordenada do centro e da largura do pacote de onda, temos

$$\begin{aligned} J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = \int_{q'}^q \mathcal{D}q(t') \int_{\xi'}^\xi \mathcal{D}\xi(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} M \int_0^t dt' \dot{q}(t') \dot{\xi}(t') - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \dot{q}(t') f_1[\xi(t')] \right. \\ \left. - \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds f_2[q(t') - q(s), \xi(t'), \xi(s)] K(t' - s) \right\}. \quad (2.88) \end{aligned}$$

Nesta equação usamos as definições

$$f_1[\xi(t')] = \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k \sin k[\xi(t')], \quad (2.89)$$



$$f_2[q(t') - q(s), \xi(t'), \xi(s)] = \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) 4 \cos k[q(t') - q(s)] \sin k[\xi(t')/2] \sin k[\xi(s)/2], \quad (2.90)$$

e

$$K(t' - s) = \int_0^\infty d\omega \omega \cos \omega(t' - s) \coth(\hbar\beta\omega/2). \quad (2.91)$$

A suposição principal na atual abordagem é assumir que  $k\xi \ll 1$  para qualquer tempo. Observe que esta condição não diz nada em relação à coordenada do centro do pacote que até agora continua arbitrária. O suposto anterior restringe o nosso problema à evolução de pacotes de onda cuja largura é muito menor que o comprimento característico do reservatório. Assim,

$$f_1[\xi(t')] = \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k \sin k[\xi(t')] \approx \eta \xi(t') \quad (2.92)$$

e

$$f_2[q(t') - q(s), \xi(t'), \xi(s)] \approx \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k^2 \cos k[q(t') - q(s)] \xi(t') \xi(s), \quad (2.93)$$

na expressão (2.93) podemos resolver a soma em  $k$  fazendo  $\sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) = \eta \int dk g(k)$  com  $g(k) = \frac{1}{2k_0^3} e^{-k/k_0}$ , isto nos dá

$$f_2[q(t') - q(s), \xi(t'), \xi(s)] = \eta \frac{1 - 3k_0^2 [q(t') - q(s)]^2}{(1 + k_0^2 [q(t') - q(s)]^2)^3} \xi(t') \xi(s). \quad (2.94)$$

Substituímos essas expressões na equação (2.88) e chegamos em

$$\begin{aligned} J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = & \int_{q'}^q \mathcal{D}q(t') \int_{\xi'}^\xi \mathcal{D}\xi(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} M \int_0^t dt' \dot{q}(t') \dot{\xi}(t') - \frac{i}{\hbar} \eta \int_0^t dt' \dot{q}(t') \xi(t') \right. \\ & \left. - \frac{\eta}{2\pi\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \frac{1 - 3k_0^2 [q(t') - q(s)]^2}{(1 + k_0^2 [q(t') - q(s)]^2)^3} \xi(t') K(t' - s) \xi(s) \right\}. \end{aligned} \quad (2.95)$$

As integrais funcionais podem ser resolvidas usando a aproximação de fase estacionária, que é definida pelas seguintes equações de movimento

$$\begin{aligned} M \ddot{\bar{\xi}}(t') - \eta \dot{\bar{\xi}}(t') &= 0 \\ M \ddot{\bar{q}}(t') + \eta \dot{\bar{q}}(t') &= 0. \end{aligned} \quad (2.96)$$

Já que as equações são lineares e homogêneas, a solução é direta e pode ser escrita em termos de funções hiperbólicas. A solução para  $\bar{\xi}(t')$  é

$$\bar{\xi}(t') = \frac{1}{\sinh(\eta t/2M)} \left\{ \xi \sinh(\eta t'/2M) e^{-\eta t/2M} + \xi' \sinh(\eta(t-t')/2M) \right\} e^{\eta t'/2M} \quad (2.97)$$

e para  $\bar{q}(t')$  é

$$\bar{q}(t') = \frac{1}{\sinh(\eta t/2M)} \left\{ q \sinh(\eta t'/2M) e^{\eta t/2M} + q' \sinh(\eta(t-t')/2M) \right\} e^{-\eta t'/2M}. \quad (2.98)$$

Os valores  $q$ ,  $\xi$  e  $q'$ ,  $\xi'$  correspondem, respectivamente, aos pontos final e inicial das trajetórias. As trajetórias no superpropagador são reescritas em termos das trajetórias clássicas

$$q(t') = \bar{q}(t') + \delta q(t') \quad \text{e} \quad \xi(t') = \bar{\xi}(t') + \delta \xi(t')$$

e desta forma obtemos o propagador

$$J(q, \xi, t; q', \xi', 0) = N(q, q', t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\eta(q - q')}{2 \sinh(\eta t/2M)} \left( \xi e^{-\eta t/2M} - \xi' e^{\eta t/2M} \right) - \frac{1}{\hbar} \left( A(q, q', t) \xi^2 + B(q, q', t) \xi \xi' + C(q, q', t) \xi'^2 \right) \right\}, \quad (2.99)$$

onde

$$N(q, q', t) = \int_0^0 \mathcal{D}\delta q(t') \int_0^0 \mathcal{D}\delta \xi(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} M \int_0^t dt' \delta \dot{q}(t') \delta \dot{\xi}(t') - \frac{i}{\hbar} \eta \int_0^t dt' \delta \dot{q}(t') \delta \xi(t') - \frac{\eta}{2\pi\hbar} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \frac{1 - 3k_0^2 [\bar{q}(t') - \bar{q}(s)]^2}{(1 + k_0^2 [\bar{q}(t') - \bar{q}(s)]^2)^3} \delta \xi(t') K(t' - s) \delta \xi(s) \right\}, \quad (2.100)$$

aqui foi assumido que as flutuações em  $\delta q$  são aproximadamente iguais para qualquer tempo, isto é,  $\delta q(t') \approx \delta q(s)$ . Por outro lado, as funções  $A$ ,  $B$  e  $C$  comportam a dependência com a temperatura e tem, explicitamente, a forma

$$A(q, q', t) = \frac{\eta}{4\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \frac{(1 - 3k_0^2 [\bar{q}(t') - \bar{q}(s)]^2)}{(1 + k_0^2 [\bar{q}(t') - \bar{q}(s)]^2)^3} \frac{e^{\eta(t'+s)/2M} \sinh\left(\frac{\eta t'}{2M}\right) \sinh\left(\frac{\eta s}{2M}\right)}{\sinh^2(\eta t/2M)} K(t' - s) e^{-\eta t/M} \quad (2.101)$$

$$B(q, q', t) = \frac{\eta}{2\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \frac{(1 - 3k_0^2 [\bar{q}(t') - \bar{q}(s)]^2)}{(1 + k_0^2 [\bar{q}(t') - \bar{q}(s)]^2)^3} \frac{e^{\eta(t'+s)/2M} \sinh\left(\frac{\eta s}{2M}\right) \sinh\left(\frac{\eta(t-t')}{2M}\right)}{\sinh^2(\eta t/2M)} K(t' - s) e^{-\eta t/2M} \quad (2.102)$$

$$C(q, q', t) = \frac{\eta}{4\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \frac{(1 - 3k_0^2 [\bar{q}(t') - \bar{q}(s)]^2)}{(1 + k_0^2 [\bar{q}(t') - \bar{q}(s)]^2)^3} \frac{e^{\eta(t'+s)/2M} \sinh\left(\frac{\eta(t-t')}{2M}\right) \sinh\left(\frac{\eta(t-s)}{2M}\right)}{\sinh^2(\eta t/2M)} K(t' - s). \quad (2.103)$$

Com a aproximação aqui desenvolvida a dinâmica da largura do pacote é completamente gaussiana, enquanto a dinâmica do centro do pacote apresenta flutuações altamente não lineares.

O caso em que a dinâmica do centro do pacote também é gaussiana é obtido assumindo, de forma

análoga, que  $k(q(t') - q(s)) \ll 1$ . Isto é equivalente a dizer que todo movimento da partícula está restrito a regiões muito pequenas em relação ao comprimento característico do reservatório. Neste caso, o resultado coincide com o obtido na referência ([13]) e as expressões relevantes podem ser deduzidas de (2.99, 2.101, 2.102 e 2.103) tomando o limite  $k(q(t') - q(s)) \ll 1$  e mantendo termos até segunda ordem no expoente do propagador. O resultado de este processo será referido no que segue como aproximação local.

### 2.3.3 Tratamento das não linearidades para o caso de duas partículas

Quando tratamos o sistema de duas partículas, o nosso interesse principal será estudar os possíveis efeitos mediados pelo reservatório e não a dinâmica individual de cada partícula, é por isso que podemos assumir que as trajetórias de cada partícula estão confinadas em uma região pequena comparada como o comprimento característico do reservatório. Isto leva à aproximação  $k[x_i(t') - y_i(s)] \ll 1$  para  $i = 1, 2$  e mantendo termos até segunda ordem, o funcional de influência pode ser escrito como feito em (2.83) mas com  $\mathcal{F}[x_i(t'), y_i(t')]$  escrito na aproximação local (2.86).

Para chegar a um melhor entendimento do fator de interação em (2.83), é importante estudar os limites em que as partículas se encontram ou muito perto ou muito longe, obviamente esses limites são definidos em relação ao comprimento característicos do reservatório  $k_0^{-1}$ . Para começar, assumimos  $k[x_i(t') - x_j(s)] \ll 1$  para ambas partículas e em qualquer instante, isto quer dizer que as partículas estão muito perto e que a dinâmica é essencialmente local. Nesta aproximação, o funcional se reduz a,

$$\begin{aligned}
 J = \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} h(X, Y) \right\} & \int_{\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}} \int_{\mathbf{y}'}^{\mathbf{y}} \mathcal{D}\mathbf{x}(t') \mathcal{D}\mathbf{y}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ S_0[\mathbf{x}(t')] - S_0[\mathbf{y}(t')] - \frac{\eta}{2} \int_0^t (x_1 \dot{y}_1 - y_1 \dot{x}_1) dt' \right. \\
 & \left. \frac{\eta}{2} \int_0^t (x_2 \dot{y}_2 - y_2 \dot{x}_2) dt' - \frac{\eta}{2} \int_0^t dt' [x_1 \dot{y}_2 - y_2 \dot{x}_1 + x_2 \dot{y}_1 - y_1 \dot{x}_2] - \frac{\eta \Omega}{\pi} \int_0^t dt' [(x_1 - x_2)^2 - (y_1 - y_2)^2] \right\} \\
 & \times \exp \left\{ -\frac{\eta}{\hbar \pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \sum_{i,j=1}^2 [x_i(t') - y_i(t')] K(t' - s) [x_j(s) - y_j(s)] \right\},
 \end{aligned}$$

onde a função dependente da temperatura  $K(t' - s)$  foi definida em (2.91) e introduzimos a função

$$h(X, Y) = \frac{\eta}{4} [(x_1 + x_2)^2 - (x'_1 + x'_2)^2 - (y_1 + y_2)^2 + (y'_1 + y'_2)^2]. \quad (2.104)$$

Agora, para tornar a discussão mais simples, vamos a efetuar duas mudanças de variáveis sucessivas. A primeira é definida como  $q_i(t) = (x_i(t) + y_i(t))/2$ ,  $\xi_i(t) = x_i(t) - y_i(t)$  e pode ser interpretada como as variáveis do centro e da largura de cada pacote, respectivamente. A segunda introduz as variáveis de centro de massa e coordenada relativa definidas, respectivamente, como

$$r(t) = (q_1(t) + q_2(t))/2, \quad e \quad u(t) = q_1(t) - q_2(t) \quad (2.105)$$

e as variáveis auxiliares

$$\chi(t) = (\xi_1(t) + \xi_2(t))/2 \quad \text{e} \quad v(t) = \xi_1(t) - \xi_2(t). \quad (2.106)$$

Com estas substituições a versão local do superpropagador é

$$J = \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} \tilde{h}(r, \chi) \right\} \int_{r'}^r \int_{\chi'}^{\chi} \int_{u'}^u \int_{v'}^v \mathcal{D}r(t') \mathcal{D}\chi(t') \mathcal{D}u(t') \mathcal{D}v(t') \exp \left\{ -\frac{4\eta}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds K(t' - s) \chi(t') \chi(s) \right\} \\ \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \Sigma[r, \chi, u, v] - 2\eta \int_0^t dt' [\chi(t') \dot{r}(t') - r(t') \dot{\chi}(t')] - \frac{2\eta\Omega}{\pi} \int_0^t dt' u(t') v(t') dt' \right\}, \quad (2.107)$$

com

$$\Sigma[r, \chi, u, v] = \int_0^t M(2\dot{r}\dot{\chi} + \dot{u}\dot{v}/2) dt' \quad (2.108)$$

e

$$\tilde{h}(r, \chi) = 2\eta(r\chi - r'\chi'). \quad (2.109)$$

Do funcional local (2.107) podemos observar as seguintes características. Primeiro, a trajetória estacionária de  $r(t)$  deduzida da ação no expoente do propagador, descreve a dinâmica dissipativa de uma partícula com massa  $2M$  que representa o centro de massa do sistema de duas partículas brownianas. O segundo, e mais importante resultado é que, a coordenada relativa  $u(t)$  nesta aproximação descreve a dinâmica livre de dissipação de uma variável sujeita ao efeito de uma força que induz a interação entre as partes individuais do sistema de interesse. Este efeito coincide com o apresentado anteriormente nas equações de movimento e aparece também em alguns trabalhos em que a evolução quântica foi estudada usando equações mestras e acoplamento bilinear entre o sistema e o banho[48, 16].

No limite de distâncias longas assumimos que as partículas estão restritas a se mover em regiões separadas. Neste caso, a distância  $L$  entre as regiões é considerada muito maior do que o comprimento característico do reservatório e é possível aproximar  $k[x_i(t') - y_i(s)] \gg 1$ . Quando essa condição é satisfeita os termos de interação são desprezíveis e o superpropagador se reduz a

$$J = \int_{r'}^r \int_{u'}^u \int_{\chi'}^{\chi} \int_{v'}^v \mathcal{D}r(t') \mathcal{D}u(t') \mathcal{D}\chi(t') \mathcal{D}v(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' M \left( \frac{\dot{u}(t')\dot{v}(t')}{2} + 2\dot{r}(t')\dot{\chi}(t') \right) \right\} \\ \exp \left\{ -\frac{i\eta}{\hbar} \int_0^t dt' \left( \frac{\dot{u}(t')v(t')}{2} + 2\dot{r}(t')\chi(t') \right) - \frac{\eta}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \left( \frac{v(s)v(t')}{2} + 2\chi(s)\chi(t') \right) K(t' - s) \right\}. \quad (2.110)$$

Obviamente, no limite de longas distâncias a dinâmica é completamente equivalente ao caso de duas partículas desacopladas interagindo com dois reservatórios independentes mas idênticos.

A seguinte etapa da nossa análise é encontrar uma abordagem adequada para distâncias interpartícula que se encontrem entre os dois limites acima mencionados. O desenvolvimento

subsequente não representa uma solução exata nem mesmo uma aproximação ao problema que estamos tratando. O que pretendemos na verdade é substituir o funcional exato (2.83) por uma versão linear que satisfaça o comportamento local no limite de distâncias curtas entre as partículas e que seja equivalente ao acoplamento com reservatórios independentes no limite de distâncias longas. Desta forma esperamos obter alguma informação do que aconteceria na região de distâncias intermediárias sem resolver o problema não linear exato.

Para atingir o nosso objetivo, consideraremos as variáveis insensíveis à distância interpartícula desprezíveis em relação ao comprimento característico  $k_0^{-1}$ , isto é, as variáveis  $v$  e  $\chi$ , que estão relacionadas à largura dos pacotes de onda, podem ser consideradas muito pequenas quando comparadas com  $k^{-1}$  e a aproximação  $\cos [k\chi(t')] \approx 1$ ,  $\sin [k\chi(t')] \approx k\chi(t')$ ,  $\sin [kv(t')/2] \approx kv(t')/2$  seria adequada nesta situação. Por outro lado, os termos não lineares envolvendo as variáveis  $r$  e  $u$  serão substituídas por uma função fenomenológica parametrizada pela relação entre o comprimento característico do banho e a distância média entre as regiões fisicamente permitidas para as trajetórias das partículas. Desta forma o superpropagador pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
J = & \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{h}(r, \chi, u, v) \right\} \int_{r'}^r \int_{u'}^u \int_{\chi'}^\chi \int_{v'}^v \mathcal{D}r(t') \mathcal{D}u(t') \mathcal{D}\chi(t') \mathcal{D}v(t') \\
& \times \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ M \int_0^t dt' (2\dot{r}\dot{\chi} + \dot{u}\dot{v}/2) + \frac{\eta}{4} \int_0^t dt' (4\dot{\chi}(t')r(t') + \dot{v}(t')u(t') - \dot{u}(t')v(t') - 4\dot{r}(t')\chi(t')) \right. \\
& \quad \left. - \frac{\eta}{2} \int_0^t dt' (D(k_0L)\dot{v}(t')u(t') + 4D(k_0L)\dot{r}(t')\chi(t')) - \frac{2\eta\Omega}{\pi} \int_0^t dt' D(k_0L)u(t')v(t') \right\} \\
& \times \exp \left\{ -\frac{\eta}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds K(t' - s) \left\{ 2(1 + D(k_0L)) \chi(t')\chi(s) + \frac{1}{2}(1 - D(k_0L)) v(t')v(s) \right\} \right\},
\end{aligned} \tag{2.111}$$

onde redefinimos

$$\tilde{h}(r, \chi, u, v) = \frac{\eta}{4} (4r'\chi' - 4r\chi + u'v' - uv) - \frac{\eta}{2} D(k_0L) (u'v' - uv), \tag{2.112}$$

e introduzimos a função

$$D(k_0L) = \exp(-k_0L), \tag{2.113}$$

com o parâmetro  $L$  sendo definido como a distância média entre as regiões onde as partículas se movem. O parâmetro  $L$  poderia ser considerado também como a distância inicial entre os centros dos pacotes de onda uma vez que, ao considerarmos a dinâmica de cada partícula restrita a regiões diferentes, podemos esperar que não exista sobreposição ao longo do movimento.

As integrais funcionais em (2.111) podem ser calculadas diretamente já que todas as variáveis

aparecem no máximo até segunda ordem. O resultado da integração é

$$\begin{aligned}
 J = & \mathcal{N}(t) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \tilde{h}(r, \chi, u, v) - \frac{M}{\sinh [t\gamma_+/2]} \left\{ \gamma_+ (r' - r) \left( \chi e^{-\gamma_+ t/2} - \chi' e^{\gamma_+ t/2} \right) \right. \right. \\
 & - \gamma (r\chi - r'\chi') \sinh [t\gamma_+/2] \left. \left. \right\} - \frac{M}{4 \sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]} \left\{ \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \left( u'v e^{-\gamma_- t/2} + uv' e^{\gamma_- t/2} \right) \right. \\
 & \left. \left. - (\gamma_- - \gamma) (uv - u'v') \sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] - \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} (uv + u'v') \cosh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] \right\} \right\} \\
 & \times \exp -\frac{1}{\hbar} \left\{ D_+ (A_\chi(t)\chi^2 + B_\chi(t)\chi\chi' + C_\chi(t)\chi'^2) + D_- (A_v(t)v^2 + B_v(t)vv' + C_v(t)v'^2) \right\}. \quad (2.114)
 \end{aligned}$$

Nesta expressão usamos as definições  $\omega^2 = \frac{4\Omega\eta}{M\pi}$ ,  $\gamma_\pm = \gamma(1 \pm D[k_0L])$ ,  $\tilde{D}_+ = (1 + D(k_0L))$ ,  $\tilde{D}_- = (1 - D(k_0L))$ ,  $\omega_t^2 = \omega^2 D(k_0L)$  e as seguinte funções do tempo e da temperatura (Veja detalhes deste cálculo no apêndice B).

$$A_\chi(t) = \frac{\eta}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) e^{-\gamma_+ t} \frac{\sinh [s\gamma_+/2] \sinh [\tau\gamma_+/2]}{\sinh [t\gamma_+/2]^2} e^{\gamma_+(s+\tau)/2} \quad (2.115)$$

$$B_\chi(t) = \frac{2\eta}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) e^{-\gamma_+ t/2} \frac{\sinh [\tau\gamma_+/2] \sinh [(t-s)\gamma_+/2]}{\sinh [t\gamma_+/2]^2} e^{\gamma_+(s+\tau)/2} \quad (2.116)$$

$$C_\chi(t) = \frac{\eta}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) \frac{\sinh [(t-s)\gamma_+/2] \sinh [(t-\tau)\gamma_+/2]}{\sinh [t\gamma_+/2]^2} e^{\gamma_+(s+\tau)/2}, \quad (2.117)$$

$$A_v(t) = \frac{\eta}{4\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) e^{-\gamma_- t} \frac{\sinh \left[ \frac{s}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] \sinh \left[ \frac{\tau}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]^2} e^{\gamma_-(s+\tau)/2} \quad (2.118)$$

$$B_v(t) = \frac{\eta}{2\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) e^{-\gamma_- t/2} \frac{\sinh \left[ \frac{\tau}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] \sinh \left[ \frac{(t-s)}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]^2} e^{\gamma_-(s+\tau)/2} \quad (2.119)$$

$$C_v(t) = \frac{\eta}{4\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) \frac{\sinh \left[ \frac{(t-s)}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] \sinh \left[ \frac{(t-\tau)}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]^2} e^{\gamma_-(s+\tau)/2}. \quad (2.120)$$

$\mathcal{N}(t)$  é o coeficiente temporal resultante das flutuações em torno do caminho clássico e será determinado exigindo que o operador densidade reduzido final seja normalizado.

O propagador (2.114) nos fornece todas as ferramentas necessárias para estudar a evolução do operador densidade reduzido de duas partículas no regime de distâncias intermediárias. No seguinte capítulo usaremos este propagador para estudar a evolução das correlações quânticas em um sistema bipartite em contato com um reservatório térmico. Em particular, o estudo será focado na evolução do emaranhamento e no papel que desempenha o reservatório como mediador destas correlações sem esquecer o seu conhecido papel como fonte de decoerência.

## Capítulo 3

# Evolução do emaranhamento em um sistema bipartite

### 3.1 Introdução ao conceito de emaranhamento

O conceito de emaranhamento surge de aplicarmos o princípio de superposição a um sistema composto. Em termos gerais, o vetor de estado para um sistema quântico puro formado por  $N$  subsistemas pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{i}} c_{\mathbf{i}} |\mathbf{i}\rangle, \quad (3.1)$$

onde  $\mathbf{i} = i_1, i_2, \dots, i_N$  é um índice coletivo que comporta todos os números quânticos que definem o sistema e  $|\mathbf{i}\rangle$  é formado pelo produto tensorial de vetores base correspondentes a subsistemas individuais, isto é,

$$|\mathbf{i}\rangle = |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle. \quad (3.2)$$

Porém, nem sempre é possível escrever o estado do sistema completo como um produto tensorial dos estados dos subsistemas individuais

$$|\psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle, \quad (3.3)$$

quando isso acontece podemos afirmar que as partes do sistema se encontram emaranhadas. A mesma idéia, mas com uma adequada redefinição pode ser estendida a estados mistos, neste caso obviamente a grandeza relevante é o operador densidade. Se tivermos um sistema formado por  $N$  subsistemas e descrito pelo operador densidade  $\rho$ , podemos dizer que  $\rho$  representa um estado emaranhado quando não pode ser escrito como a soma de produtos diretos:

$$\rho \neq \sum p_i \rho_1^{(i)} \otimes \rho_2^{(i)} \otimes \dots \otimes \rho_N^{(i)}, \quad (3.4)$$

com  $p_i > 0$  e  $\sum_i p_i = 1$ . O lado direito de (3.4) corresponde ao estado mais geral que pode ser preparado usando apenas operações locais e comunicação clássica (LOCC).

As implicações da existência de estados emaranhados, longe de serem triviais, motivaram grandes debates em torno dos fundamentos da mecânica quântica e mais especificamente em relação à sua completude como teoria física da realidade.

Einstein, Podolsky e Rosen (EPR), em 1935 [28], usaram o princípio de superposição (junto com uma razoável definição de realidade e a hipótese de localidade) aplicado a um estado composto para demonstrar que a mecânica quântica era uma teoria incompleta, apesar do bom acordo existente entre as suas previsões e os resultados experimentais. Este brilhante artigo motivou uma resposta por parte de N. Bohr [29], em um artigo com o mesmo título que o publicado por EPR. Nele, Bohr mantém a hipótese de localidade e concentra as suas críticas na definição de realidade usada por EPR. No mesmo ano, E. Schrödinger[30] publicou um artigo em que é usado pela primeira vez o termo emaranhamento (*Verschränkung* em alemão). Schrödinger, se afastando da posição de EPR, enfatiza que o emaranhamento é a principal característica da mecânica quântica e explora no seu trabalho as implicações mais paradoxais quando imagina um sistema macroscópico sujeito as regras da mecânica quântica. Mas foram necessários muitos anos ainda para poder termos uma previsão quantitativa que pudesse ser testada experimentalmente. John S. Bell [31], usou um sistema de dois níveis (muito mais simples que o sistema usado por EPR) para analisar os argumentos de EPR e obter pela primeira vez uma previsão quantitativa, os seus resultados levam a concluir que (mantendo a hipótese de realidade ) existe algum tipo de mecanismo na mecânica quântica que permite que o efeito de um instrumento de medição influencie a leitura feita por outro instrumento que se encontra fisicamente afastado e independente do primeiro. Esta característica é chamada de não localidade e teve as primeiras evidências experimentais nos trabalhos de Aspect e colaboradores[33, 34]. Embora a influência a distância parece violar o princípio da relatividade especial permitindo mediante a utilização de estados emaranhados a transmissão de sinais superluminais, tal violação não acontece, pois se não existe comunicação entre os observadores que permita comparar as suas leituras, cada um deles só conseguirá ver uma sequência aleatória de resultados que não carregam informação [32].

Atualmente, o emaranhamento é estudado não simplesmente com o interesse de entender os fundamentos da mecânica quântica mas como um importante recurso, e sua aplicabilidade prática para resolver problemas complexos, em que os recursos clássicos não são suficientes, constitui uma área de pesquisa de rápido desenvolvimento[35].

Embora muitos dos grandes avanços na teoria de informação quântica foram apresentados usando variáveis discretas, por exemplo qubits, o conceito de emaranhamento teve a sua primeira aparição em termos de variáveis contínuas. Em particular, o estado usado por Einstein, Podolsky e Rosen é simplesmente uma função delta definida em forma integral

$$\psi(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{(2\pi i/h)(x_1 - x_2 + x_0)p} dp, \quad (3.5)$$

que descreve posições e momentos perfeitamente correlacionadas ( $x_1 - x_2 = x_0$  e  $p_1 + p_2 = 0$ ). A função de onda (3.5) não é uma função normalizável e o seu significado é apenas formal, sendo impossível de reproduzir experimentalmente. Porém, esta função pode ser considerada como o limite



de uma função de onda regular, adequadamente normalizada e com clara interpretação dentro da ótica quântica. Isto é, para o campo eletromagnético quantizado, o estado comprimido de dois modos é representado pela função de onda

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left\{ -e^{-2z} \frac{(x_1 + x_2)^2}{8\sigma^2} - e^{2z} \frac{(x_1 - x_2)^2}{8\sigma^2} \right\}, \quad (3.6)$$

que é proporcional a  $\delta(x_1 - x_2)$  quando o parâmetro de compressão  $z$  é muito grande ( $z \rightarrow \infty$ ), reproduzindo assim o estado EPR. Na função de onda (3.6) e na correspondente representação de momento, as variáveis  $x$  e  $p$  representam as quadraturas do campo eletromagnético[36]. Nesta tese, utilizaremos um estado como o definido em (3.6) para estudar a evolução do emaranhamento em um sistema bipartite de variáveis contínuas em contato com o ambiente.

## 3.2 Medidas de emaranhamento para sistemas contínuos

Na seção anterior foi dada uma definição bastante geral do que significa que um sistema composto se encontre em um estado emaranhado. Porém, as expressões (3.3) e (3.4), embora importantes do ponto de vista formal, não são operacionais. Por isso, é necessário introduzir formas de determinar quando um estado se encontra emaranhado e de quantificar, quando possível, esse emaranhamento. Nesta seção apresentaremos critérios (para determinar se temos um estado emaranhado) e medidas de emaranhamento (para quantificar o emaranhamento).

### 3.2.1 Critério de transposição parcial

Da equação (3.4) temos que, o estado quântico de um sistema bipartite é separável, se e somente se o operador densidade pode ser escrito como

$$\rho = \sum_i p_i \rho_1^{(i)} \otimes \rho_2^{(i)}, \quad (3.7)$$

onde  $\rho_1^{(i)}$  e  $\rho_2^{(i)}$  são operadores densidade de cada subsistema individual. Necessariamente, a transposição parcial (PT) do operador  $\rho$  em relação ao subespaço de Hilbert 2 (ou 1 analogamente), transforma o operador  $\rho$  em um operador positivo semidefinido, ou seja os seus autovalores são não-negativos. Asher Peres [37] mostrou que este critério é uma condição necessária de separabilidade mas sua suficiência ficou reduzida a sistemas discretos de dimensões  $2 \times 2$  e  $2 \times 3$  como foi mostrado por Pawel Horodecki[38]. Posteriormente, R. Simon[39] observou que, no limite de sistemas de dimensão infinita, quando o critério de transposição parcial é aplicado a um sistema bipartite, a condição de separabilidade impõe nos momentos de segunda ordem uma restrição mais forte que o próprio princípio de incerteza.

A operação de transposição do operador densidade representa uma transformação de inversão temporal e pode ser interpretada geometricamente como uma reflexão que leva  $p \rightarrow -p$  no espaço de fase. Usando a função de Wigner de um estado de dois modos a operação de transposição parcial

pode ser representada como

$$\rho \rightarrow \rho^{PT} \Rightarrow W(q_1, p_1, q_2, p_2) \rightarrow W(q_1, p_1, q_2, -p_2), \quad (3.8)$$

onde  $PT$  indica transposição parcial em relação ao modo 2 (transpondo o modo 1 o resultado é totalmente equivalente). Assim, se  $\rho$  é separável, a sua função de Wigner necessariamente continua sendo uma função de Wigner depois de uma inversão temporal local. Em particular, os momentos de segunda ordem devem satisfazer o princípio de incerteza. Este último pode ser escrito em forma matricial se definimos o quadrivetor  $\mathbf{X}$  cujas componentes satisfazem as relações de comutação adequadas

$$\mathbf{X} = (x_1, p_1, x_2, p_2); \quad [X_\alpha, X_\beta] = i\hbar\Theta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4. \quad (3.9)$$

com

$$\Theta = \begin{pmatrix} \mathbf{Q} & 0 \\ 0 & \mathbf{Q} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Assim, o princípio de incerteza pode ser escrito como

$$\mathbf{\Lambda} + \frac{i\hbar}{2}\Theta \geq 0, \quad (3.11)$$

onde  $\mathbf{\Lambda}$  é chamada matriz de covariância e suas componente são

$$\Lambda_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \langle \Delta X_\alpha \Delta X_\beta + \Delta X_\beta \Delta X_\alpha \rangle, \quad (3.12)$$

onde  $\Delta X_\alpha = X_\alpha - \langle X_\alpha \rangle$  e o simbolo  $\langle \dots \rangle$  indica  $Tr \{ \rho \dots \}$ . A igualdade (3.11), deve ser entendida em termos dos autovalores da matriz  $\mathbf{\Lambda} + \frac{i\hbar}{2}\Theta$ . Isto é, uma matriz é positiva semidefinida quando todos seus autovalores são maiores ou iguais que zero.

Em geral, a matriz de covariância tem a seguinte estrutura

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^T & \mathbf{B} \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

onde  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{C}$  e  $\mathbf{B}$  são matrizes  $2 \times 2$ . Simon[39] mostrou que a condição de incerteza (3.11) pode ser escrita aproveitando a estrutura (3.13) como

$$\det \mathbf{A} \det \mathbf{B} + \left( \frac{1}{4} - \det \mathbf{C} \right)^2 - Tr(\mathbf{A} \mathbf{Q} \mathbf{C} \mathbf{Q} \mathbf{B} \mathbf{Q} \mathbf{C}^T \mathbf{Q}) \geq \frac{1}{4} (\det \mathbf{A} + \det \mathbf{B}), \quad (3.14)$$

onde todos os termos envolvidos são invariantes sob transformações simpléticas. Chamando  $\mathbf{T}_2 = \text{diag}(1, 1, 1, -1)$  a matriz que representa a transposição do modo 2, a transformação da matriz de covariância sob transposição parcial corresponde à transformação  $\mathbf{T}_2 \mathbf{\Lambda} \mathbf{T}_2$ . A nova matriz de covariância deve satisfazer a condição de incerteza para que a correspondente função de Wigner represente adequadamente um estado físico. Para que a matriz de covariância transformada satisfaça

o princípio de incerteza além de (3.14) os invariantes simpléticos devem satisfazer também a relação

$$\det \mathbf{A} \det \mathbf{B} + \left( \frac{1}{4} - |\det \mathbf{C}| \right)^2 - \text{Tr}(\mathbf{A} \mathbf{Q} \mathbf{C} \mathbf{Q} \mathbf{B} \mathbf{Q} \mathbf{C}^T \mathbf{Q}) \geq \frac{1}{4} (\det \mathbf{A} + \det \mathbf{B}). \quad (3.15)$$

Esta condição, invariante sob transformações simpléticas, constitui uma descrição do critério de separabilidade de Peres-Horodecki escrito em termo dos momentos de segunda ordem. A relação (3.15) é uma condição necessária de separabilidade para qualquer sistema bipartite e se torna uma condição necessária e suficiente para estados bipartite gaussianos.

### 3.2.2 Negatividade

O critério de transposição parcial positiva (PPT por sua sigla em inglês) anteriormente descrito é útil para sabermos se um estado quântico bipartite se encontra emaranhado. Porém, para podermos comparar (entre estados diferentes) ou para seguir com precisão a evolução do emaranhamento, precisaremos de um quantificador de emaranhamento.

Para estados gaussianos de dois modos, a matriz de covariância (3.13) pode ser reescrita através de uma transformação simplética local  $\mathbf{S}_l = \mathbf{S}_1 \oplus \mathbf{S}_2$  como

$$\mathbf{S}_l^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{S}_l = \begin{pmatrix} a & 0 & c_+ & 0 \\ 0 & a & 0 & c_- \\ c_+ & 0 & b & 0 \\ 0 & c_- & 0 & b \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

os elementos  $a$ ,  $b$ ,  $c_+$  e  $c_-$  são determinados pelos quatro invariantes simpléticos locais  $\det \mathbf{\Lambda} = (ab - c_+^2)(ab - c_-^2)$ ,  $\det \mathbf{A} = a^2$ ,  $\det \mathbf{B} = b^2$  e  $\det \mathbf{C} = c_+ c_-$ . Com esses invariantes, é possível construir uma grandeza, chamada de autovalor simplético que permite escrever a condição de separabilidade em uma forma simples. Isto é, o autovalor simplético do operador densidade parcialmente transposto é definido como

$$\tilde{\sigma}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \tilde{\mathbf{D}}_{\Lambda} \pm \sqrt{\tilde{\mathbf{D}}_{\Lambda}^2 - 4 \det \mathbf{\Lambda}} \right]^{1/2}, \quad (3.17)$$

onde  $\tilde{\mathbf{D}}_{\Lambda} = \det \mathbf{A} + \det \mathbf{B} - 2 \det \mathbf{C}$ , e o critério PPT se reduz a uma simples desigualdade que deve ser satisfeita pelo menor autovalor

$$\tilde{\sigma}_- \geq 1. \quad (3.18)$$

O autovalor  $\tilde{\sigma}_-$  contém todas as características qualitativas do emaranhamento para estados gaussianos arbitrários de dois modos, além de ser o componente fundamental do quantificador de emaranhamento conhecido como negatividade  $\mathcal{N}$  [42, 41] e definido como

$$\mathcal{N}(\rho) \equiv \frac{\|\rho^{PT}\|_1 - 1}{2}, \quad (3.19)$$

onde  $\rho^{PT}$  é a matriz densidade parcialmente transposta e  $\|\mathbf{A}\|_1 = \text{Tr}(\sqrt{\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A}}) = \sum_{i=1}^{\min\{m,n\}} \sigma_i$  ( $\sigma_i$

são os valores singulares da matriz  $\mathbf{A}$ ) representa um tipo especial de norma da matriz  $\mathbf{A}$  de tamanho  $m \times n$ .

Também é útil definir a negatividade logarítmica

$$E_{\mathcal{N}} \equiv \ln \|\rho^{PT}\|_1. \quad (3.20)$$

Estas duas grandezas podem ser escritas em termos do menor autovalor simplético da matriz densidade parcialmente transposta

$$\mathcal{N}(\rho) = \max \left[ 0, \frac{1 - \tilde{\sigma}_-}{2\tilde{\sigma}_-} \right] \quad \text{e} \quad E_{\mathcal{N}}(\rho) = \max [0, -\ln 2\tilde{\sigma}_-]. \quad (3.21)$$

Para estados gaussianos de dois modos a negatividade e a negatividade logarítmica quantificam apropriadamente o emaranhamento determinando o quão forte é a violação da desigualdade (3.18). Para estados mais gerais, a negatividade ainda pode ser usada para determinar emaranhamento mas não pode ser considerada uma medida conclusiva.

### 3.2.3 Determinação do emaranhamento em estados não-gaussianos

As pesquisas desenvolvidas na área de informação e computação quântica, envolvendo estados de variáveis contínuas, parecem ter dado ao longo dos anos um caráter fundamental aos estados gaussianos. Essa tendência é devida tanto à simplicidade do formalismo matemático necessário para o seu tratamento, quanto à alta precisão atingida na sua realização e controle experimental. Porém, em muitas aplicações práticas é necessário abrir o leque de estados de variáveis contínuas disponíveis. Por exemplo, no problema da estimação ótima de perdas em canais bosônicos quando se quer implementar uma rede de comunicações, o uso de estados não-gaussianos (como estados de prova), além de superar em eficiência aos estados gaussianos, representa uma simplificação tecnológica, já que a determinação ótima do parâmetro de perdas requer unicamente de contagem de fótons[43]. É por isso que é importante nesta seção apresentarmos brevemente critérios adequados para determinar o emaranhamento em estados não-gaussianos.

#### 3.2.3.1 Critério entrópico

S. P. Walborn e colaboradores [45], desenvolveram um critério para determinar o emaranhamento em sistemas de variáveis contínuas baseado na entropia de Shanon. Este critério mostrou-se capaz de determinar emaranhamento em estados não-gaussianos, além de não representar maiores desafios experimentais. Na continuação resumimos suas principais características.

Primeiro é necessário considerar os operadores globais

$$r_{\pm} = r_1 \pm r_2 \quad \text{e} \quad s_{\pm} = s_1 \pm s_2, \quad (3.22)$$

onde  $r_i$  e  $s_i$  são definidos através dos operadores canônicos usuais,

$$r_i = x_i \cos \theta_i + p_i \sin \theta_i, \quad s_i = p_i \cos \theta_i - x_i \sin \theta_i, \quad (3.23)$$

onde  $x_i$  e  $p_i$  satisfazem as relações de comutação  $[x_i, p_i] = i\delta_{ij}$  ( $\hbar = 1$ ) e  $\theta_i$  representa rotações locais de ditos operadores<sup>1</sup>. O critério entrópico de Walborn e colaboradores estabelece que todo estado separável (incluindo estados mistos) deve satisfazer a desigualdade

$$H[R_{\pm}] + H[S_{\mp}] \geq \ln(2\pi e), \quad (3.24)$$

onde

$$H[R] = - \int dr R(r) \ln R(r), \quad (3.25)$$

é a entropia associada a uma medição da variável  $r$  e  $R_{\pm}$  e  $S_{\mp}$  são as distribuições de probabilidade associadas à medição de  $r_{\pm}$  e  $s_{\mp}$ , respectivamente.

### 3.2.3.2 Critério de Shchukin e Vogel

Outro interessante formalismo que permite determinar apropriadamente o emaranhamento em estados não-gaussianos foi desenvolvido por Shchukin e Vogel e posteriormente refinado por Miranowicz e Piani [46]. O formalismo baseia-se no critério de transposição parcial positiva. Os autores mostram que para qualquer estado separável  $\rho$ , a desigualdade

$$\langle f^\dagger f \rangle^{PT} = \text{Tr}(\rho^{TP} f^\dagger f) \geq 0, \quad (3.26)$$

deve ser satisfeita para qualquer operador  $f$  que possa ser escrito em forma normal. Assim, o operador  $f$  pode ser expandido como

$$f = \sum_{n,m,k,l=0}^{\infty} c_{nmkl} a^{\dagger n} a^m b^{\dagger k} b^l, \quad (3.27)$$

e com esta expressão a desigualdade (3.26) pode ser escrita em termos dos momentos da transposição parcial

$$\langle f^\dagger f \rangle^{PT} = \sum_{n,m,k,l,p,q,r,s=0}^{\infty} c_{pqrs}^* c_{nmkl} M_{pqrs,nmkl}(\rho^{PT}) \geq 0, \quad (3.28)$$

com

$$M_{pqrs,nmkl}(\rho^{PT}) = \langle a^{\dagger q} a^p a^{\dagger n} a^m b^{\dagger s} b^r b^{\dagger k} b^l \rangle^{PT}. \quad (3.29)$$

Assim, o estado  $\rho$  é PPT se e somente se a matriz  $\mathbf{M}(\rho^{PT})$  é positiva semidefinida. Este critério pode ser escrito na forma

$$\rho \text{ é PPT} \Leftrightarrow \forall \mathbf{r} : \det \mathbf{M}^{\mathbf{r}}(\rho^{PT}) \geq 0,$$

<sup>1</sup>Para utilizar satisfatoriamente o critério entrópico é necessário encontrar uma rotação adequada das quadraturas, parametrizada pelos ângulos  $\theta_1$  e  $\theta_2$ .

onde  $\mathbf{M}^r$ , com  $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_N)$ , denota a matriz obtida eliminando todas as linhas e colunas com exceção daquelas etiquetadas com  $r_1, \dots, r_N$ <sup>2</sup>. Por exemplo, o critério de Simon[39] que só envolve momentos de segunda ordem é obtido do determinante

$$D_5 = \begin{vmatrix} 1 & \langle a \rangle & \langle a^\dagger \rangle & \langle b^\dagger \rangle & \langle b \rangle \\ \langle a^\dagger \rangle & \langle a^\dagger a \rangle & \langle a^{\dagger 2} \rangle & \langle a^\dagger b^\dagger \rangle & \langle a^\dagger b \rangle \\ \langle a \rangle & \langle a^2 \rangle & \langle a a^\dagger \rangle & \langle a b^\dagger \rangle & \langle a b \rangle \\ \langle b \rangle & \langle a b \rangle & \langle a^\dagger b \rangle & \langle b^\dagger b \rangle & \langle b^2 \rangle \\ \langle b^\dagger \rangle & \langle a b^\dagger \rangle & \langle a^\dagger b^\dagger \rangle & \langle b^{\dagger 2} \rangle & \langle b b^\dagger \rangle \end{vmatrix}, \quad (3.30)$$

onde o determinante  $D_5$  é obtido tomando as cinco primeiras filas e colunas da matriz  $\mathbf{M}(\rho^{PT})$ .

### 3.3 Aplicações

Na teoria da informação quântica, o emaranhamento tem se caracterizado como um fenômeno de grande interesse. Grandes esforços continuam sendo feitos com a intenção de resolver questões fundamentais relacionadas, por exemplo, à detecção teórica e experimental do emaranhamento e como caracterizá-lo e quantificá-lo. Embora mais relacionado com as possíveis aplicações práticas é também de interesse fundamental aprender a diminuir, reverter ou, no melhor dos casos, aproveitar a influência do ambiente sobre os sistemas emaranhados. Na presente seção pretendemos contribuir modestamente a solução da última destas questões mediante à análise da dinâmica do emaranhamento de um sistema bipartite que interage com um reservatório térmico. Mostraremos como além do sempre esperado efeito de decoerência, a interação com o ambiente pode também induzir novas correlações quânticas entre os subsistemas.

#### 3.3.1 Estado gaussiano comprimido

Começaremos estudando um sistema bipartite descrito por um estado gaussiano comprimido de dois modos, a função de onda correspondente pode ser escrita como

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left\{ -e^{-2z} \frac{(x_1 + x_2)^2}{8\sigma^2} - e^{2z} \frac{(x_1 - x_2)^2}{8\sigma^2} \right\}, \quad (3.31)$$

manipulando o parâmetro de compressão  $z$  é possível controlar o grau de emaranhamento inicial. O estado puro representado por (3.31) é separável quando  $z \rightarrow 0$  (neste caso o valor de  $\sigma$  representa a largura do pacote de onda correspondente a cada modo) e emaranhado para qualquer outro valor de  $z$ . Como foi comentado anteriormente, este estado constitui uma formulação regularizada do estado EPR (3.5), reproduzindo este último no limite  $z \rightarrow \infty$ .

<sup>2</sup>Isto é conhecido como o critério de Silvestre. Vide por exemplo: *Matrix Theory and Applications*, editado por R. C. Johnson (American Mathematical Society, Providence, 1990)

A matriz densidade para o estado comprimido pode ser escrita usando as variáveis (2.105,2.106)

$$\tilde{\rho}(r', \chi', u', v', 0) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{e^{-2z}}{4\sigma^2} (4r'^2 + \chi'^2) - \frac{e^{2z}}{4\sigma^2} (u'^2 + v'^2/4) \right\}, \quad (3.32)$$

onde  $r' = r(0)$ ,  $\chi' = \chi(0)$ ,  $u' = u(0)$ ,  $v' = v(0)$ . Nesta representação a matriz densidade pode ser separada em cada uma das variáveis e em particular pode ser escrita como o produto de um pacote de onda representando o centro de massa (variáveis  $r$  e  $\chi$ ) e outro representando o movimento relativo. Evidentemente as variáveis  $r$ ,  $\chi$ ,  $u$ ,  $v$  “escondem” o emaranhamento do estado (3.31) mas serão usadas devido a grande simplificação obtida ao desenvolvermos a evolução temporal.

Outra forma de representar o estado do sistema é através da função característica, que pode ser vista como a transformada de Fourier quântica do operador densidade

$$\tilde{W}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) = Tr \{ \hat{\rho} \exp(-i\boldsymbol{\lambda}\hat{q}/\hbar - i\boldsymbol{\nu}\hat{p}/\hbar) \}, \quad (3.33)$$

ou também como a transformada de Fourier clássica da função de Wigner

$$\begin{aligned} \tilde{W}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) \exp(-i\boldsymbol{\lambda}q/\hbar - i\boldsymbol{\nu}p/\hbar) dqdp, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\boldsymbol{\lambda}x/\hbar) \left\langle \mathbf{x} - \frac{\boldsymbol{\nu}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{x} + \frac{\boldsymbol{\nu}}{2} \right\rangle d^2x \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde  $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2)$  e  $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2)$  são variáveis análogas as de momento e posição, respectivamente. A função característica faz parte de uma família de quase-distribuições de probabilidade introduzidas na mecânica quântica com o intuito de calcular probabilidades, associadas a observáveis, de uma forma clássica. A analogia com a forma clássica de tratar as probabilidades tem, obviamente, seus limites, já que ditas distribuições podem se tornar negativas ou mal comportadas em algumas regiões do espaço de fase [47]. Por outra parte, a função característica apresenta-se em uma forma muito simples quando se trata de estados gaussiano. Para estes estados, a matriz de covariância surge em forma direta da própria estrutura da função característica. Isto é, para estados gaussianos podemos escrever

$$\tilde{W}(\mathbf{X}) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{X} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{X}^T \right\}, \quad (3.35)$$

onde  $\mathbf{X} = (\nu_1, \lambda_1, \nu_2, \lambda_2)$  e  $\boldsymbol{\Lambda}$  é a matriz de covariância com elementos definidos pela expressão (3.12). Por exemplo, a função característica inicial do nosso estado comprimido (3.32) é

$$\tilde{W}(\lambda, \lambda_r, \nu, \nu_r) = \exp \left\{ -\frac{e^{-2z} [\hbar^2 (4\nu^2 + e^{4z}\nu_r^2) + 4\sigma^4 (4e^{4z}\lambda^2 + \lambda_r^2)]}{16\hbar^2\sigma^2} \right\}, \quad (3.36)$$

aqui, em analogia com (2.105) e (2.106) a função acima está escrita nas variáveis

$$\begin{aligned} \nu &= (\nu_1 + \nu_2)/2 & \nu_r &= \nu_1 - \nu_2 \\ \lambda &= (\lambda_1 + \lambda_2)/2 & \lambda_r &= \lambda_1 - \lambda_2 \end{aligned}, \quad (3.37)$$

e a matriz de covariância na base  $(\nu, \lambda, \nu_r, \lambda_r)$  é  $\mathbf{A} = \text{diag}\left(\frac{e^{-2z}}{2\sigma^2}, \frac{2e^{2z}\sigma^2}{\hbar^2}, \frac{e^{2z}}{8\sigma^2}, \frac{e^{-2z}\sigma^2}{2\hbar^2}\right)$ , que quando reescrita na base  $\mathbf{X} = (x_1, p_1, x_2, p_2)$ , apresenta a estrutura (3.13) com

$$\mathbf{A} = \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \frac{\cosh(2z)}{4\sigma^2} & 0 \\ 0 & \frac{\sigma^2 \cosh(2z)}{\hbar^2} \end{pmatrix} \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} -\frac{\sinh(2z)}{4\sigma^2} & 0 \\ 0 & \frac{\sigma^2 \sinh(2z)}{\hbar^2} \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

As expressões correspondentes depois da evolução temporal são bem mais complexas mas podem ser obtidas diretamente já que a evolução é resultado da integral (2.63) com o propagador definido em (2.114) e todas as integrais envolvidas são gaussianas. Como já foi observado anteriormente, este propagador representa uma tentativa de incluir os efeitos esperados da influência do ambiente no sistema de duas partículas quando a separação entre elas é comparável ao comprimento característico do reservatório.

Na continuação apresentaremos os resultados obtidos para a negatividade logarítmica utilizando diferentes combinações dos parâmetros do sistema começando com a situação em que as duas partes do sistema de interesse se encontram na região de distâncias pequenas comparadas com o comprimento característicos do reservatório.

Na figura 3.1 temos a negatividade logarítmica como função do tempo para baixas temperatura e três valores diferentes para o parâmetro de compressão  $z$ . A dependência em relação ao emaranhamento inicial é evidente nesta figura. Para um estado inicial separável ( $z = 0$ ) o ambiente rapidamente induz correlações quânticas e em média o emaranhamento induzido se mantém em um valor mais alto do que para sistemas inicialmente emaranhados, nos quais o processo de decoerência reduz drasticamente a negatividade logarítmica. O comportamento oscilatório é devido ao potencial de interação efetivo induzido pelo ambiente [12], que neste limite é uma função quadrática da distância entre as partículas. É importante observar que em todos os casos graficados na figura 3.1 existe um emaranhamento finito remanescente.

A figura (3.2) mostra que o fato de existir um emaranhamento remanescente é um efeito associado à baixa temperatura do reservatório e quando aumentamos a temperatura o emaranhamento sempre cai a zero com o tempo. Porém, de novo neste caso, o estado inicial separável se mostra mais robusto e mantém o emaranhamento induzido por mais tempo [49].

Quando as partículas estão muito próximas, a influência mais importante do reservatório é a interação efetiva induzida entre elas e o efeito de decoerência só se torna importante quando a temperatura aumenta. Na figura 3.3 a negatividade logarítmica é graficada para três valores do coeficiente de dissipação  $\gamma$ . A análise é feita considerando unicamente o valor médio do emaranhamento devido a que o eixo temporal foi parametrizado usando diferentes valores da



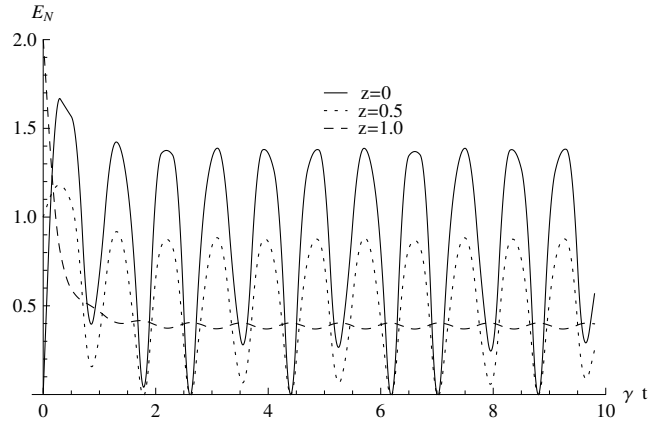


Figura 3.1: Negatividade logarítmica para partículas próximas como função do tempo. Os parâmetros usados foram:  $\gamma = 1.0$ ;  $kT = 10^{-4}$ ;  $k_0L = 0$ ;  $\Omega = 10$

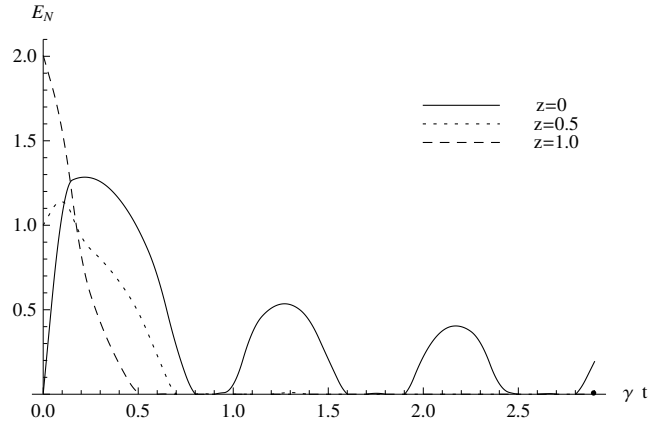


Figura 3.2: Negatividade logarítmica para partículas próximas como função do tempo. Os parâmetros usados foram:  $\gamma = 1.0$ ;  $kT = 10.$ ;  $k_0L = 0$ ;  $\Omega = 10$ .

frequência de oscilação  $\omega$ . A quantidade média de emaranhamento cresce com o aumento de  $\gamma$ , ou seja, a medida que a interação com o reservatório aumenta as correlações induzidas entre as partículas se tornam mais fortes. Resultados similares a este, mas seguindo um formalismo baseado em equações mestras e considerando sempre o acoplamento bilinear entre o sistema de interesse e o reservatório foram apresentados por outros autores na referência [48].

Até aqui, mostramos os resultados correspondente à evolução da negatividade logarítmica para um estado bipartite gaussiano em que é possível definir uma distância média  $L$  entre as partes e dita distância é considerada muito pequena quando comparada com o comprimento característico do reservatório,  $k_0^{-1}$ . Nesta aproximação, a evolução do estado é determinada pelo propagador (2.107), o qual equivale a considerar que a coordenada relativa  $u$  está completamente livre de qualquer influência dissipativa.

Em uma situação mais realista, esperamos que exista uma dinâmica dissipativa tanto para o centro de massa quanto para a coordenada relativa do nosso sistema e é esperado também

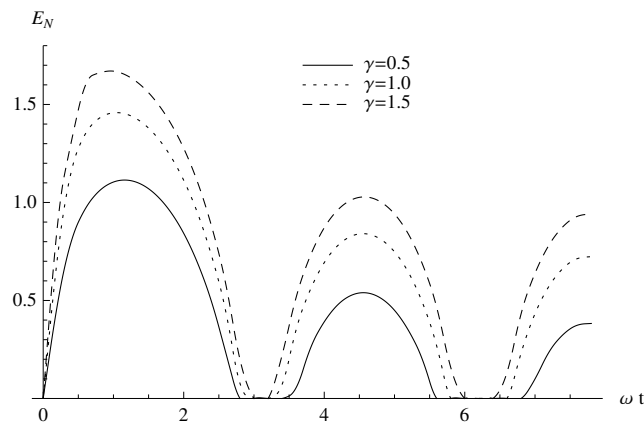


Figura 3.3: Negatividade logarítmica para partículas próximas e temperatura finita como função do tempo. Os parâmetros usados foram:  $z = 0.$ ;  $kT = 5.$ ;  $k_0L = 0.$ ;  $\Omega = 10.$ ;  $\omega = \sqrt{4\gamma\Omega/\pi}$ .

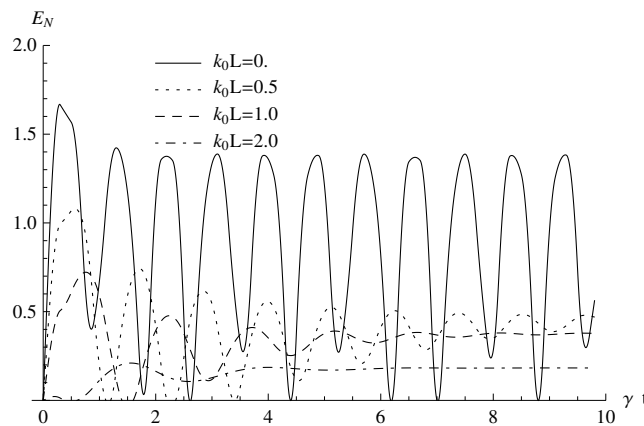


Figura 3.4: Influência da distância entre as partículas na evolução da negatividade logarítmica para temperatura baixa. Os parâmetros usados foram:  $\gamma = 1.0$ ;  $z = 0.$ ;  $kT = 10^{-4}$ ;  $\Omega = 10.$ .

uma redução monótona do emaranhamento remanescente quando a distância entre as partículas aumenta. Na figura 3.4 podemos observar a influência que a distância entre as partículas tem no emaranhamento. Como esperado, o emaranhamento remanescente se reduz com o aumento da distância mas parece existir uma competição entre os processos de indução de emaranhamento e decoerência. Em particular, quando a distância aumenta o emaranhamento médio se reduz e as oscilações ficam amortecidas. Na curva para  $k_0L = 2.0$  observa-se que o sistema tarda mais em ficar emaranhado. Este tempo de atraso no estabelecimento das correlações quânticas tende ao infinito no limite  $k_0L \rightarrow \infty$  e para distâncias finitas sempre temos um estado assintoticamente emaranhado quando a temperatura é suficientemente baixa.

Se o estado inicial se encontra emaranhado, o que antes percebíamos como um atraso na aparição do emaranhamento pode ser interpretado agora como um tempo de ressurreição do mesmo. O emaranhamento inicial é perdido pela decoerência devido a ação do ambiente e posteriormente o sistema ganha emaranhamento devido à interação induzida. É importante esclarecer que este

efeito só é apreciável quando as temperaturas são suficientemente baixas. Em altas temperaturas a decoerência domina completamente a dinâmica do sistema. O efeito mostrado na figura 3.5 sugere a possibilidade de controlarmos o processo de indução de emaranhamento modificando os parâmetros e, em particular, controlando a distância entre os subsistemas.

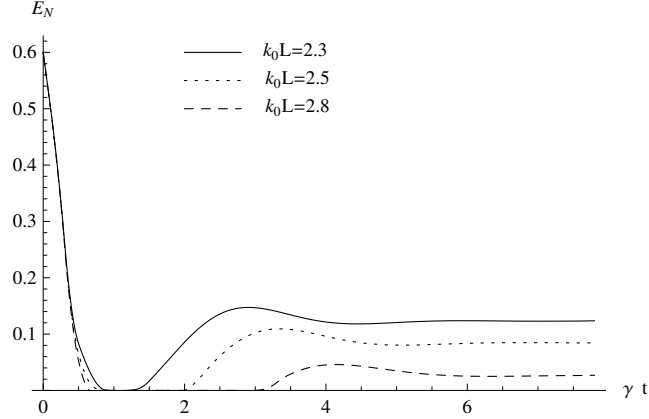


Figura 3.5: Influência da distância no ressurgimento das correlações quânticas. Os parâmetros usados foram:  $\gamma = 1.0$ ;  $kT = 10^{-4}$ ;  $z = 0.3$ ;  $\Omega = 10$ .

### 3.3.2 Par EPR

Na seção anterior, o único limite não considerado foi aquele em que as partículas se encontram muito afastadas. Este limite porém, tem uma interpretação interessante quando consideramos a evolução de um estado gaussiano na forma (3.31). Como já foi indicado, o estado (3.31) reproduz o estado utilizado por EPR, que possui correlações perfeitas, no limite  $z \rightarrow \infty$ . Portanto, se introduzimos adequadamente momentos de primeira ordem em (3.31), podemos ter uma versão regularizada de um par EPR onde suas componentes viajam em sentidos contrários, neste caso, a função de onda pode ser escrita como

$$\psi_{EPR}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left\{ -e^{-2z} \frac{(x_1 + x_2)^2}{8\sigma^2} - e^{2z} \frac{(x_1 - x_2 - d)^2}{8\sigma^2} + i \frac{p_0}{\hbar} (x_1 - x_2) \right\}, \quad (3.39)$$

e em termos das variáveis,  $(r, \chi, u, v)$ , o operador densidade inicial é

$$\rho_{EPR}(r', \chi', u', v') = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp \left\{ -\frac{e^{-2z}}{4\sigma^2} (4r'^2 + \chi'^2) - \frac{e^{2z}}{4\sigma^2} \left( (u' - d)^2 + v'^2/4 \right) + i \frac{p_0}{\hbar} v' \right\}. \quad (3.40)$$

Devido às partículas se afastarem rapidamente, a evolução do estado  $\rho_{EPR}$  é determinada pelo propagador (2.110), que descreve o efeito de dois reservatórios independentes atuando em cada partícula separadamente. Vejamos como se comporta a negatividade logarítmica neste caso.

Na figura 3.6 observamos a evolução da negatividade logarítmica quando o estado inicial é definido por (3.40), nesta situação, independente de qual seja o valor do emaranhamento inicial, o efeito do ambiente é destruir as correlações quânticas do sistema de interesse, produzindo o efeito

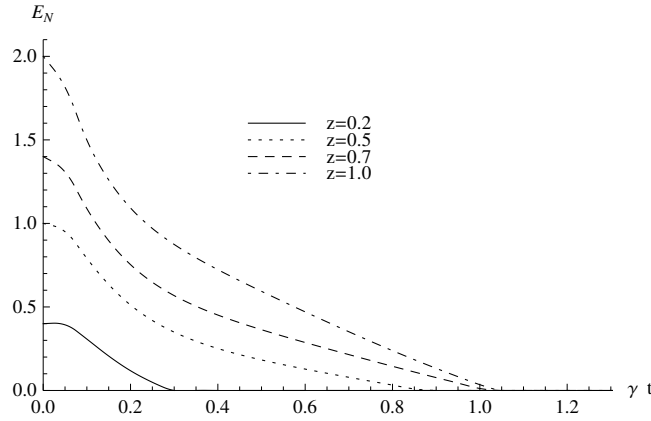


Figura 3.6: Negatividade logarítmica para o estado EPR como função do tempo. Os parâmetros usados foram:  $\gamma = 1.0$ ;  $kT = 10^{-4}$ ;  $\Omega = 5.$ .

conhecido como morte súbita do emaranhamento [44].

### 3.3.3 Estados não-gaussianos

O estudo da evolução do emaranhamento feito anteriormente, pode ser estendido a estados não-gaussianos. Essa categoria de estados apresenta vários desafios no momento de se determinar o emaranhamento de um estado particular. Nas primeiras seções deste capítulo apresentamos várias medidas que, pelo menos em princípio, parecem ser adequadas para o estudo de estados mistos não gaussianos. Porém, em nosso estudo estas medidas se mostraram eficientes unicamente na determinação do emaranhamento do estado inicial, depois da evolução o critério de Simon e a negatividade logarítmica foram as únicas ferramentas que apresentaram resultados confiáveis, mas vale lembrar que para estados não-gaussianos o critério de separabilidade de Simon é necessário mas não suficiente.

Em geral, a negatividade logarítmica servirá para medir unicamente a quantidade de emaranhamento gaussiano que possui o nosso estado, por essa razão, os resultados aqui apresentados correspondem a estados que ainda mantém fortes características gaussianas.

#### 3.3.3.1 Considerações sobre o propagador para dois osciladores brownianos

O sistema de interesse que consideraremos aqui é composto por dois osciladores harmônicos representados pela Lagrangiana

$$L_S = \frac{1}{2}M\dot{x}_1^2 - \frac{1}{2}M\omega_0^2 \left(x_1 + \frac{L}{2}\right)^2 + \frac{1}{2}M\dot{x}_2^2 - \frac{1}{2}M\omega_0^2 \left(x_2 - \frac{L}{2}\right)^2, \quad (3.41)$$

o termo de acoplamento e a Lagrangiana do reservatório são os mesmos que tem sido usado desde o começo (confira a equação 2.39).

A figura 3.7 é um esquema dos pacotes de onda usados para construir o estado inicial do sistema. Cada partícula individualmente será representada por um estado deslocalizado formado

pela superposição de dois pacotes gaussianos, um deles centrado na posição de equilíbrio do potencial harmônico e o outro ligeiramente deslocado de uma distância  $a$ .

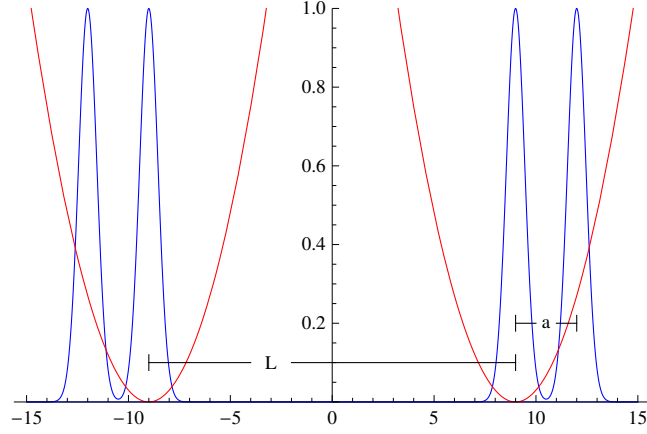


Figura 3.7: Estado inicial

Na representação de posição o estado escolhido pode ser escrito como

$$\psi_S(x_1, x_2) = \mathcal{N}_0 \left\{ \psi_0 \left( x_1 + \frac{L}{2} \right) \psi_0 \left( x_2 - \frac{L}{2} \right) + \psi_0 \left( x_1 + \frac{L}{2} + a \right) \psi_0 \left( x_2 - \frac{L}{2} - a \right) \right\}, \quad (3.42)$$

com

$$\psi_0(x) = \exp \left( \frac{-x^2}{4\sigma^2} \right), \quad \text{e} \quad \mathcal{N}_0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi\sigma^2 \left( 1 + e^{-a^2/4\sigma^2} \right)}}. \quad (3.43)$$

A evolução temporal do operador densidade reduzido continua sendo definida pelo propagador (2.64) com o funcional de influência (2.83). Este último precisa ser reescrito para tratarmos adequadamente a dinâmica do estado inicial (3.42). Nas variáveis  $q_i = (x_i + y_i)/2$  e  $\xi_i = x_i - y_i$ , anteriormente introduzidas, as funções não lineares (2.76, 2.80 e 2.81) podem ser escritas como

$$\bar{K}_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t', s] = \sum_{i,j \neq 1}^2 4 \cos k[q_i(t') - q_j(s)] \sin k[\xi_i(t')/2] \sin k[\xi_j(s)/2], \quad (3.44)$$

$$V[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] = - \sum_k 2\kappa_k \kappa_{-k} f(k) \left( 2 \sin k[q_1(t') - q_2(t')] \sin k \left[ \frac{\xi_1(t') - \xi_2(t')}{2} \right] \right), \quad (3.45)$$

e

$$\bar{L}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] = \bar{l}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] + \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k f(k) D_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] \quad (3.46)$$

com

$$\begin{aligned} \bar{l}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] = \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k f(k) \left\{ (\dot{\xi}_1(t') - \dot{\xi}_2(t')) \sin k [q_1(t') - q_2(t')] \cos k \left[ \frac{\xi_1(t') + \xi_2(t')}{2} \right] \right. \\ \left. + 2(\dot{q}_1(t') + \dot{q}_2(t')) \cos k [q_1(t') - q_2(t')] \sin k \left[ \frac{\xi_1(t') + \xi_2(t')}{2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.47)$$

e

$$\begin{aligned} D_k[\mathbf{x}, \mathbf{y}, t'] = \frac{1}{k} \left( 2 \sin k [q_1(0) - q_2(0)] \sin k \left[ \frac{\xi_1(0) - \xi_2(0)}{2} \right] \right. \\ \left. - 2 \sin k [q_1(t) - q_2(t)] \sin k \left[ \frac{\xi_1(t) - \xi_2(t)}{2} \right] \right). \end{aligned} \quad (3.48)$$

As variáveis  $\xi$  relacionadas com a largura do pacote de onda podem ser desprezadas quando comparadas com  $k^{-1}$  e os termos envolvendo a distância entre os centros dos pacotes podem ser expandidos ao redor de  $L$  ( $L$  corresponde a distância entre os pontos de equilíbrio dos potenciais harmônicos). Isto é,

$$\cos k [q_i(t') - q_j(s)] \approx \cos(kL) - k \sin(kL) (q_i(t') - q_j(s) - L)$$

$$\sin k [q_1(t') - q_2(s)] \approx \sin(kL) - k \cos(kL) (q_1(t') - q_2(s) - L),$$

essa aproximação é justificada pelo fato das trajetórias de cada partícula estarem confinadas pelo potencial harmônico fazendo possível definir uma distância media  $L$  entre elas. Com estas aproximações e usando agora as variáveis (2.105 e 2.106) para facilitar a integração, temos até segunda ordem

$$\bar{K}_k[r, u, \xi, t', s] = k^2 \cos(kL) \left( 2\chi(s)\chi(t') - \frac{v(s)v(t')}{2} \right),$$

o termo instantâneo

$$\begin{aligned} \bar{l}[r, u, \chi, v] = \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k f(k) \left\{ \dot{v}(t') (\sin(kL) + k \cos(kL) (u(t') - L)) \right. \\ \left. + 4\dot{r}(t') k \chi(t') (\cos(kL) - k \sin(kL) (u(t') - L)) \right\} \end{aligned}$$

e o termo de contorno

$$\begin{aligned} D_k(u, v) &= \frac{1}{k} (2 \sin(ku') \sin(kv'/2) - 2 \sin(ku) \sin(kv/2)) \\ &= (v' - v) (\sin(kL) - kL \cos(kL)) + k \cos(kL) (u'v' - uv) \end{aligned}$$

onde usamos  $u' = u(0)$ ,  $v' = v(0)$  e  $u = u(t)$ ,  $v = v(t)$ .

Calculando as somas em  $k$  e reagrupando termos chegamos no propagador (ver apêndice C para

obter os detalhes)

$$\begin{aligned}
J &= \int_{r'}^r \int_{u'}^u \int_{\chi'}^\chi \int_{v'}^v \mathcal{D}r(t') \mathcal{D}u(t') \mathcal{D}\chi(t') \mathcal{D}v(t') \\
&\exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \int_0^t dt' (4\dot{r}(t')\dot{\chi}(t') + \dot{u}(t')\dot{v}(t')) - \frac{m}{2} \int_0^t dt' (4\omega_0^2 r(t')\chi(t') + \omega(L)^2 u(t')v(t') + F(L)v(t')) \right\} \\
&\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[ \eta_-(L) \frac{\dot{u}(t')v(t')}{2} + 2\eta_+(L)\dot{r}(t')\chi(t') \right] \right\} \\
&\exp \left\{ -\frac{1}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \left[ \eta_-(L) \frac{v(s)v(t')}{2} + 2\eta_+(L)\chi(s)\chi(t') \right] K(t' - s) \right\}, \tag{3.49}
\end{aligned}$$

onde foram introduzidas as funções

$$\eta_+(L) = \eta \left( 1 + \frac{(1 - 3k_0^2 L^2)}{(1 + k_0^2 L^2)^3} \right) \quad \eta_-(L) = \eta \left( 1 - \frac{(1 - 3k_0^2 L^2)}{(1 + k_0^2 L^2)^3} \right), \tag{3.50}$$

e

$$\omega(L)^2 = \omega_0^2 + \frac{4\Omega\gamma}{\pi} \frac{(1 - 3k_0^2 L^2)}{(1 + k_0^2 L^2)^3} \quad F(L) = \omega_0^2 L + \frac{4\Omega\gamma}{\pi} \frac{4k_0^2 L^3}{(1 + k_0^2 L^2)^3}. \tag{3.51}$$

As variáveis envolvidas no propagador (3.49) aparecem no máximo até segunda ordem e portanto todas as integrais funcionais são gaussianas, o resultado é direto e os detalhes são apresentados no apêndice (C). O resultado final da integração é

$$\begin{aligned}
J &= \mathcal{N}(t) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ Q_r(t, L) (r'\chi' + r\chi) - O_r(t, L)r'\chi - N_r(t, L)r\chi' + m\gamma_+(L) (r'\chi' - r\chi) \right. \\
&+ \frac{mF(L)\gamma_-(L)}{2\omega(L)^2} (v' - v) + \frac{2F(L)}{\omega(L)^2} Q_v(t, L)(v' + v) - \frac{2F(L)}{\omega(L)^2} (N_v(t, L)v' + O_v(t, L)v) \\
&+ Q_v(t, L) (u'v' + uv) - O_v(t, L)u'v - N_v(t, L)v'u + \frac{m\gamma_-(L)}{4} (u'v' - uv) \left. \right\} \\
&\exp -\frac{1}{\hbar} \left\{ A_\chi(t, L)\chi^2 + B_\chi(t, L)\chi\chi' + C_\chi(t, L)\chi'^2 + A_v(t, L)v^2 + B_v(t, L)vv' + C_v(t, L)v'^2 \right\}, \tag{3.52}
\end{aligned}$$

onde a forma explícita das funções  $Q_{r,v}$ ,  $O_{r,v}$ ,  $N_{r,v}$  dependentes do tempo e as funções  $A_{\chi,v}$ ,  $B_{\chi,v}$ ,  $C_{\chi,v}$  dependentes do tempo e a temperatura não é colocada aqui por questões de espaço mas é dada no apêndice C paginas 68 e 69.

### 3.3.3.2 Evolução do emaranhamento

O estado inicial (3.42) é claramente não separável. Para caracterizar o emaranhamento deste estado utilizaremos as ferramentas descritas na seção (3.2.3).

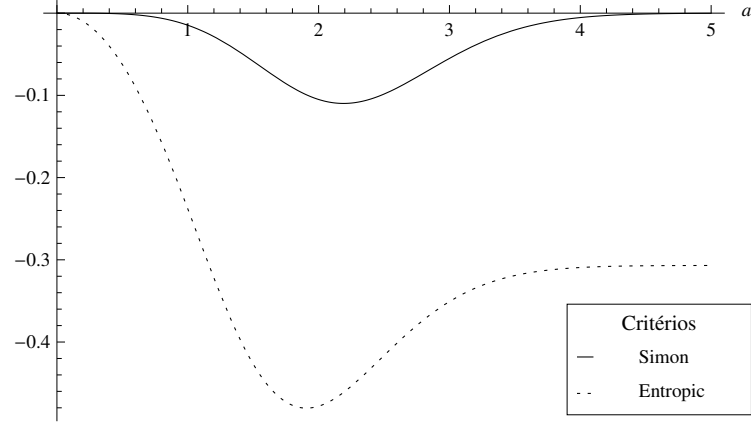


Figura 3.8: Comparação de critérios para caracterizar o emaranhamento do estado inicial (3.42).

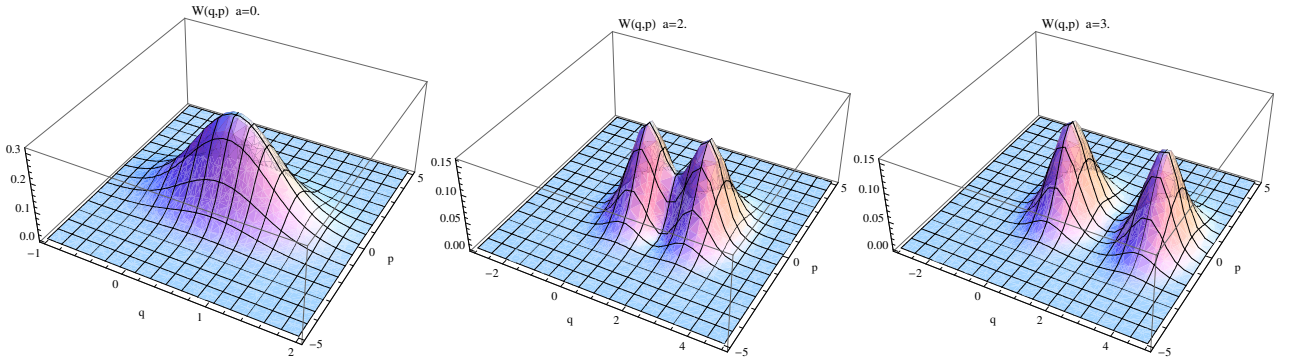


Figura 3.9: Função de Wigner para uma partícula. Os gráficos correspondem aos valores do parâmetro  $a = 0, 2, 3$  respectivamente.

Na figura 3.8 graficamos as expressões

$$CS = \det \mathbf{A} - \frac{1}{4} (\det \mathbf{A} + \det \mathbf{B} + 2 |\det \mathbf{C}|) + \frac{1}{16}, \quad (3.53)$$

e

$$CE = H [R_+] + H [S_-] - \ln(2\pi e), \quad (3.54)$$

que podem ser obtidas dos critérios de separabilidade de Simon [39] e de Walborn e colaboradores [45], como função do parâmetro  $a$  que determina a separação entre os centros dos pacotes de onda que definem cada partícula separadamente. Ambas expressões  $CS$  e  $CE$  devem ser maiores ou iguais que zero para estados separáveis. Como pode ser visto, o critério de Simon só consegue ver o emaranhamento para valores de  $a < 4$ , ou seja é confiável só quando o estado é quase-gaussiano. Para ver isso, observe o gráfico comparativo (3.9). Quando o valor de  $a$  aumenta o estado inicial perde a suas características gaussianas e se faz necessário usar o critério entrópico para mostrar que existe emaranhamento para qualquer valor deste parâmetro.

Depois da evolução desenvolvida com o propagador (3.52), apresentamos o comportamento



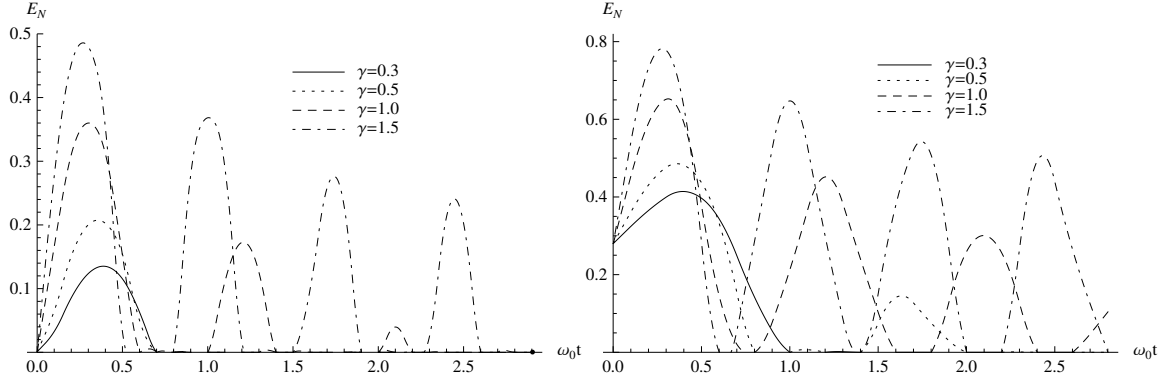


Figura 3.10: Negatividade logarítmica como função do tempo. Os parâmetros usados foram,  $\omega_0 = 1$ ,  $k_0 L = 10^{-4}$ ,  $kT = 5$ ,  $\Omega = 10$  e  $k_0 a = 0.3$  à esquerda e  $k_0 a = 0.15$  à direita.

temporal da negatividade logarítmica. Na figura 3.10 observamos a variação da negatividade logarítmica para dois estados iniciais com parâmetros  $a$  diferentes e para temperaturas finitas, nesta figura os centros dos potenciais harmônicos coincidem. No gráfico da esquerda da figura 3.10 o estado inicial se encontra emaranhado mas é altamente não-gaussiano, por isso o valor inicial da negatividade é zero. O potencial induzido pelo ambiente tende a aproximar os pacotes de onda e como resultado deste efeito o estado se torna mais gaussiano e a negatividade logarítmica aumenta, o processo é mais forte quando a interação com o ambiente é maior, ou seja para valores grandes da constante de dissipação  $\gamma$ . Com o passar do tempo e com o efeito da temperatura, a decoerência domina a situação e o emaranhamento desaparece, ou pelo menos a sua parte gaussiana já que a medida usada só nos fornece resultados conclusivos para valores maiores do que zero. No lado direito da figura 3.10 graficamos a negatividade logarítmica para um estado inicial que é aproximadamente gaussiano ( $k_0 a = 0.15$ ) e por essa razão o seu estado inicial de emaranhamento é adequadamente determinado através da negatividade logarítmica. Porém, não existem diferenças qualitativas apreciáveis no comportamento desta medida em relação ao previamente relatado. Para outros valores de  $a$  o comportamento é o mesmo. Pela proximidade das partes, o ambiente induz emaranhamento gaussiano e este só é perdido por causa da temperatura.

Vejam agora a evolução das correlações quânticas no estado (3.42) com  $k_0 a = 0.4$  (veja figura 3.11) a temperatura zero para acoplamentos com o reservatório de diferente intensidade e diferentes valores de  $k_0 L$ . O emaranhamento do estado inicial não é detetado por critérios baseados em segundos momentos, mas de novo a interação mediada pelo reservatório induz emaranhamento gaussiano. À medida que os centros dos potenciais harmônicos se afastam, a influência do ambiente é menos forte, até o ponto em que para distâncias comparáveis com o comprimento característico do reservatório surge um atraso na formação das correlações gaussianas completamente análogo ao apresentado na seção (3.3.1). Porém, no lado direito da figura 3.11 (onde  $\gamma = 1$ ) observamos uma inversão no comportamento da negatividade para as distâncias inter-poço de  $k_0 L = 0.5$  e  $k_0 L = 0.8$  em relação ao gráfico da esquerda (com  $\gamma = 0.3$ ). Parece existir uma distância na qual a influência do reservatório apresenta um mínimo local, o emaranhamento induzido diminui com o aumento de

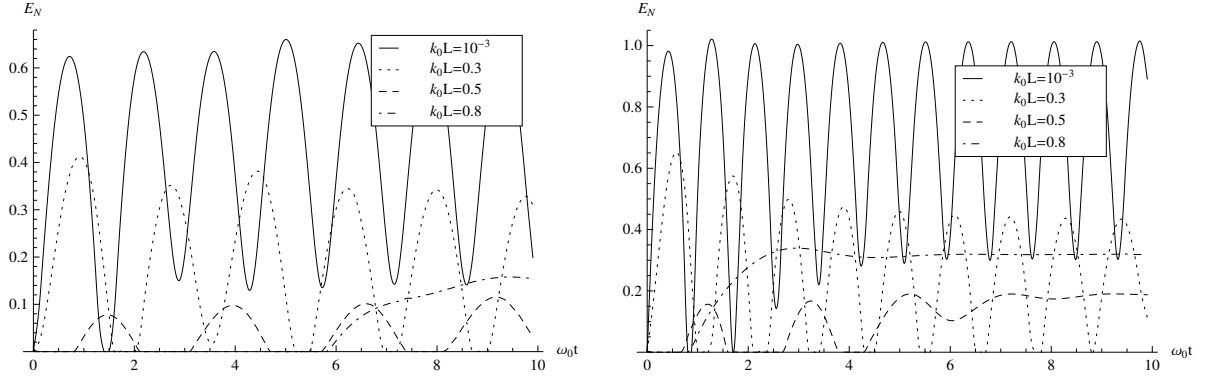


Figura 3.11: Negatividade logarítmica como função do tempo. Os parâmetros usados foram,  $k_0 a = 0.4$ ,  $\omega_0 = 1$ ,  $kT = 0$ ,  $\Omega = 10$  e  $\gamma = 0.3$  à esquerda e  $\gamma = 1$  à direita.

$k_0 L$  atinge o mínimo e depois cresce de novo. Na figura 3.12 esse fenômeno é analisado com maior detalhe.

Com o objetivo de observar mais claramente o efeito de inversão no comportamento da negatividade apontado na análise da figura 3.11, graficamos na figura 3.12 a evolução da negatividade logarítmica para um estado inicialmente separável ( $k_0 a = 0$ ) e diferentes valores da distância entre os centros dos potenciais harmônicos. Nesta figura, observa-se claramente três intervalos de distâncias relevantes. O primeiro corresponde a distâncias para as quais  $k_0 L < \frac{1}{\sqrt{3}}$ , neste intervalo quando a distância inter-poço aumenta o emaranhamento remanescente induzido diminui, o que se explica pelo aumento da função dissipativa  $\gamma_-(L)$  (veja a figura 3.13) que está ligada à coordenada relativa. Este efeito se reflete na figura 2.2 e representa a perda de correlação entre as forças flutuantes  $f_1(t)$  e  $f_2(t)$ . O segundo intervalo corresponde à região  $\frac{1}{\sqrt{3}} < k_0 L < 1.0$ , nesta situação, o aumento de  $k_0 L$  produz um aumento no emaranhamento induzido. Dentro deste intervalo, as funções  $\gamma_+(L)$  e  $\gamma_-(L)$ , assim como a correlação entre as forças flutuantes (equação 2.59), sofrem uma importante transição (figura 3.13). A função  $\gamma_+(L)$ , responsável pela dissipação na coordenada do centro de massa, passa a ser menor do que  $\gamma_-(L)$ , efeito que se reflete na inversão de sinal na correlação entre as forças flutuantes. O emaranhamento induzido é mínimo quando a correlação  $\langle f_1(t)f_2(t) \rangle = 0$  e cresce com o aumento do valor absoluto de dita correlação. Todos esses fenômenos caracterizam a competição entre a indução de emaranhamento e a decoerência, que no intervalo  $\frac{1}{\sqrt{3}} < k_0 L < 1.0$  tem como vencedor o primeiro. No último intervalo considerado  $k_0 L > 1.0$ , observamos que o emaranhamento remanescente decresce de novo até desaparecer quando  $k_0 L \rightarrow \infty$ . Nestas condições, as funções dissipativas graficadas na figura 3.13 se igualam e as forças flutuantes perdem a sua correlação reproduzindo o comportamento encontrado no limite dos reservatórios independentes atuando sobre cada partícula separadamente.

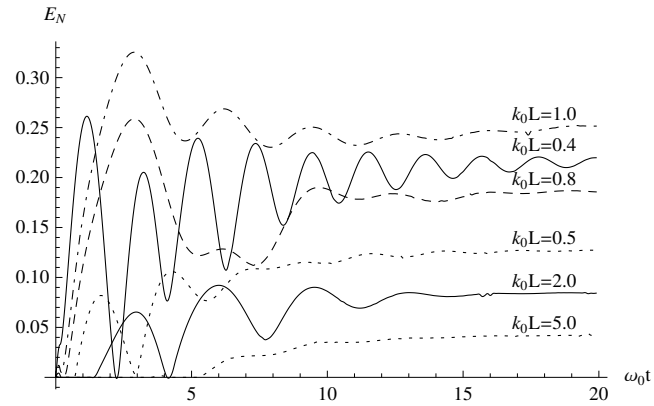


Figura 3.12: Negatividade logarítmica como função do tempo. Os parâmetros usados foram  $k_0 a = 0$ ,  $\omega_0 = 1$ ,  $kT = 0$ ,  $\Omega = 10$  e  $\gamma = 0.3$ .

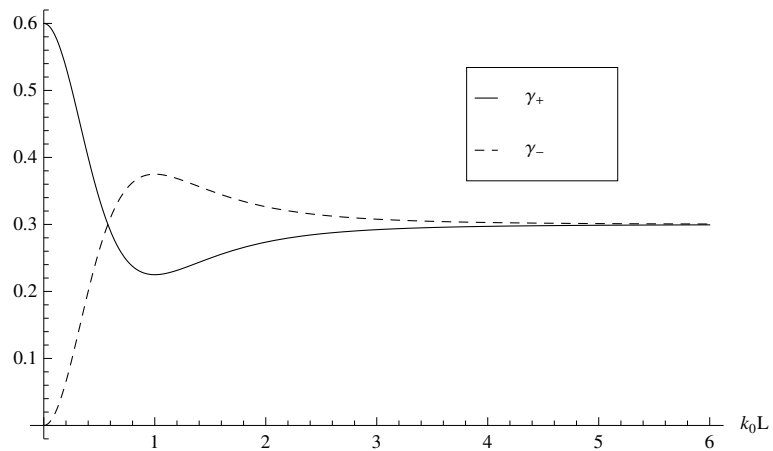


Figura 3.13: Funções  $\gamma_+(L) = \eta_+(L)/m$  e  $\gamma_-(L) = \eta_-(L)/m$  como função de  $k_0 L$ .

## Capítulo 4

# Conclusões

Neste trabalho estudamos a dinâmica quântica de duas partículas brownianas imersas em um meio dissipativo. O meio foi modelado, considerando o limite de infinitos graus de liberdade, como um conjunto de osciladores harmônicos cuja susceptibilidade dinâmica satisfaz a relação  $\text{Im}\chi_k(\omega) \approx f(k)\omega\theta(\Omega - \omega)$ , esta forma particular permite analisar em forma separada o comportamento espacial e temporal da resposta linear do reservatório. A dinâmica markoviana é obtida quando tomamos o limite da frequência de corte  $\Omega \rightarrow \infty$  eliminando assim a memória do reservatório. Por outro lado a função  $f(k)$  permite introduzir uma escala de comprimentos que é de grande interesse quando o subsistema é formado por mais de uma partícula browniana. No caso mais geral, a influência do banho é muito mais complexa do que aquela que gera o movimento browniano, inclusive no caso de uma partícula. Portanto, para uma partícula o comprimento característico estabelece as condições de preparação para que esta siga uma dinâmica browniana.

Estudamos a importância de incluir um contratermo no termo de acoplamento do Hamiltoniano e mostramos como uma análise completa desta parte do Hamiltoniano é necessária para obtermos a dinâmica adequada. No limite clássico e no caso de termos uma única partícula browniana, o acoplamento mais o contratermo deve nos garantir uma equação tipo Langevin para a variável de interesse e ao mesmo tempo um Hamiltoniano invariante sob translações quando consideramos partículas livres e ambientes homogêneos. Quando inserimos uma segunda partícula no ambiente o contratermo adquire ainda mais importância já que os possíveis efeitos de interação mediada pelo reservatório podem ser ocultados ou mal interpretados devido a uma modelagem errada. A dinâmica clássica obtida com o modelo de acoplamento sistema-reservatório aqui apresentado, nos permite encontrar uma equação tipo Langevin sem potencial externo para a coordenada do centro de massa com um termo dissipativo que, em geral, depende da distância entre as partículas. Para a coordenada relativa, além do termo dissipativo, temos uma interação que pode ser derivada de um potencial efetivo induzido pelo acoplamento com o reservatório.

A dinâmica quântica de partículas brownianas livres foi analisada considerando três situações relevantes. Primeiro assumindo que as partes do subsistema se encontravam em regiões espaciais muito pequenas em comparação com o comprimento característico do reservatório, neste caso a dinâmica é local e a coordenada relativa evolui livre de dissipação. A segunda situação considerada,

corresponde a assumir que a distância entre as partículas é muito grande quando comparada com o comprimento característico do sistema, neste caso, a dinâmica é equivalente à de duas partículas acopladas a dois reservatórios independentes, ou seja duas partículas brownianas que nunca interagem. Finalmente, foi considerada a situação intermediária em que as distâncias entre as regiões fisicamente permitidas para as partículas são da mesma ordem de grandeza do que o comprimento característico do ambiente.

Nas três situações anteriormente expostas estudamos a evolução do emaranhamento de um estado gaussiano comprimido variando os parâmetros do sistema (parâmetro de compressão, coeficiente dissipativo, temperatura e distância entre as partículas). Encontramos que existe uma competição entre a decoerência e o efeito de indução de emaranhamento. Para pequenas distâncias e baixas temperaturas este último é o mais importante e nos casos analisados em estas condições sempre achamos um emaranhamento remanescente. Porém, quando o estado inicial se encontra emaranhado, a evolução do sistema é menos sensível às correlações induzidas e mais sensível aos efeitos de decoerência. Para grandes distâncias ou altas temperaturas, a decoerência domina destruindo rapidamente as correlações quânticas. Para distâncias interpartícula comparáveis com o comprimento característico do reservatório, observamos a perda do emaranhamento inicial e posteriormente o aparecimento do emaranhamento induzido, este fenômeno se apresenta com um intervalo de tempo entre os dois eventos cuja duração é controlável manipulando os parâmetros do sistema, em particular a distância entre as partículas.

Finalmente, aplicamos o nosso modelo à evolução de um sistema formado por dois osciladores harmônicos preparados em um estado inicial não gaussiano formado pela superposição de dois pacotes de onda gaussianos. Para este estado foi estudada também a evolução do emaranhamento. Para esta situação os resultados não são conclusivos devido ao fato de termos usado uma medida de emaranhamento (negatividade logarítmica) que, para estados não gaussianos, só fornece resultados confiáveis quando o seu valor é positivo. Porém, foi possível determinar três regiões espaciais em que a influência do reservatório apresenta comportamentos qualitativos diferentes. Em particular, para um estado inicial separável e baixas temperaturas, com o aumento da distância  $L$  entre o centro dos potenciais harmônicos: o emaranhamento diminui para valores de  $0 < k_0 L < \frac{1}{\sqrt{3}}$ , aumenta para valores de  $\frac{1}{\sqrt{3}} < k_0 L < 1.0$  e diminui de novo para valores de  $k_0 L > 1$ . Este comportamento, uma vez mais sugere a possibilidade de obtermos o grau de emaranhamento desejado mediante a manipulação dos parâmetros do sistema. O efeito de perda e ganho de correlações é uma manifestação, no limite quântico, da dependência espacial das propriedades estatísticas das forças flutuantes presentes na dinâmica clássica.

Os resultados apresentados neste trabalho são relevantes para um melhor entendimento da evolução dos sistemas bipartite quando a influência do ambiente não pode ser desprezada, por exemplo no contexto da teoria de informação quântica. A extensão ao caso de mais de duas partículas brownianas distinguíveis é direta e pode contribuir para estudo das correlações quânticas de sistemas multipartite. Para partículas indistinguíveis e interagentes o formalismo apresentado aqui, embora aplicável, não é o mais adequado já que permutar as trajetórias nas integrais funcionais

para garantir a estatística adequada levaria a um resultado de difícil interpretação, sendo necessário usar ferramentas próprias da teoria de campos. Apesar da complexidade, essa tarefa se encontra atualmente em estudo devido à sua aplicabilidade em sistemas gerais de muitas partículas.

## Apêndice A

# Propriedades da força flutuante

Neste apêndice estamos interessados em estabelecer o comportamento estatístico das forças flutuantes  $f_i(t)$

$$f_i(t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k \left[ \left( C_{-k}(x_i) \tilde{R}_k(0) + C_k(x_i) \tilde{R}_{-k}(0) \right) \cos \omega_k t + \left( C_{-k}(x_i) \dot{R}_k(0) + C_k(x_i) \dot{R}_{-k}(0) \right) \frac{\sin \omega_k t}{\omega_k} \right].$$

Supondo que o banho esteja inicialmente em equilíbrio termodinâmico e usando a invariância translacional do mesmo, temos, no limite clássico,

$$\langle \tilde{R}_k(0) \rangle = \langle \dot{R}_k(0) \rangle = \langle \dot{R}_k(0) \tilde{R}_{k'}(0) \rangle = 0 \quad (\text{A.1})$$

e

$$\langle \dot{R}_k(0) \dot{R}_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k} \delta_{k(-k')} \quad \text{e} \quad \langle \tilde{R}_k(0) \tilde{R}_{k'}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m_k \omega_k^2} \delta_{k(-k')} \quad (\text{A.2})$$

onde  $\tilde{R}_k = R_k + \frac{C_k(x_0)}{m_k \omega_k^2}$ . Da mesma forma que no caso linear pode-se mostrar que as propriedades estocásticas de  $f_i(t)$  satisfazem,  $\langle f_i(t) \rangle = 0$  e  $\langle f_i(t) f_i(t') \rangle = 2\eta k_B T \delta(t - t')$ .

Da equação (A.1) é direto que  $\langle f_i(t) \rangle = 0$  e para a correlação temos

$$\begin{aligned} \langle f_i(t) f_i(t') \rangle &= \frac{1}{2} \sum_k \left[ \left( \frac{\partial C_{-k}(x_i)}{\partial x_i} \frac{\partial C_k(x'_i)}{\partial x'_i} + \frac{\partial C_k(x_i)}{\partial x_i} \frac{\partial C_{-k}(x'_i)}{\partial x'_i} \right) \langle \tilde{R}_k(0) \tilde{R}_{-k}(0) \rangle \cos \omega_k t \cos \omega_k t' \right. \\ &\quad \left. + \left( \frac{\partial C_{-k}(x_i)}{\partial x_i} \frac{\partial C_k(x'_i)}{\partial x'_i} + \frac{\partial C_k(x_i)}{\partial x_i} \frac{\partial C_{-k}(x'_i)}{\partial x'_i} \right) \langle \dot{R}_k(0) \dot{R}_{-k}(0) \rangle \frac{\sin \omega_k t \sin \omega_k t'}{\omega_k^2} \right] \\ &= \sum_k \frac{k_B T k^2 \kappa_k \kappa_{-k}}{m_k \omega_k^2} \cos k[x_i(t) - x_i(t')] \cos \omega_k(t - t'), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde foi usado (A.2) e  $C_k(x) = \kappa_k e^{ikx}$ . Identificando a susceptibilidade dinâmica do banho de

osciladores não interagentes temos

$$\langle f_i(t)f_i(t') \rangle = \int_0^\infty \frac{2}{\pi} \sum_k k_\beta T k^2 \boldsymbol{\kappa}_k \boldsymbol{\kappa}_{-k} \frac{\text{Im}\chi_k^{(0)}(\omega)}{\omega} \cos k[x_i(t) - x_i(t')] \cos \omega_k(t - t'). \quad (\text{A.4})$$

Sendo coerentes com nosso modelo fenomenológico substituímos  $\text{Im}\chi_k^{(0)}(\omega) \rightarrow \text{Im}\chi_k(\omega)$  onde  $\chi_k(\omega) = f(k)\omega\delta(\Omega - \omega)$ , o qual é válido para frequências muito pequenas comparadas com a frequência de corte  $\Omega$ . Integrando em  $\omega$  chegamos em

$$\begin{aligned} \langle f_i(t)f_i(t') \rangle &= 2 \sum_k k_B T k^2 f(k) \boldsymbol{\kappa}_k \boldsymbol{\kappa}_{-k} \cos k[x_i(t) - x_i(t')] \delta(t - t') \\ &= 2\eta k_B T \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

com

$$\eta = \sum_k k^2 \boldsymbol{\kappa}_k \boldsymbol{\kappa}_{-k} f(k). \quad (\text{A.6})$$

O termo de correlação cruzado pode ser calculado em forma similar,

$$\begin{aligned} \langle f_1(t)f_2(t') \rangle &= \frac{1}{2} \sum_k \left[ \left( \frac{\partial C_{-k}(x_1)}{\partial x_1} \frac{\partial C_k(x'_2)}{\partial x'_2} + \frac{\partial C_k(x_1)}{\partial x_1} \frac{\partial C_{-k}(x'_2)}{\partial x'_2} \right) \langle \tilde{R}_k(0)\tilde{R}_{-k}(0) \rangle \cos \omega_k t \cos \omega_k t' \right. \\ &\quad \left. \left( \frac{\partial C_{-k}(x_1)}{\partial x_1} \frac{\partial C_k(x'_2)}{\partial x'_2} + \frac{\partial C_k(x_1)}{\partial x_1} \frac{\partial C_{-k}(x'_2)}{\partial x'_2} \right) \langle \dot{R}_k(0)\dot{R}_{-k}(0) \rangle \frac{\sin \omega_k t \sin \omega_k t'}{\omega_k^2} \right] \\ &= \sum_k \frac{k_B T k^2 \boldsymbol{\kappa}_k \boldsymbol{\kappa}_{-k}}{m_k \omega_k^2} \cos k[x_1(t) - x_2(t')] \cos \omega_k(t - t') \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

e usando a susceptibilidade dinâmica temos

$$\begin{aligned} \langle f_1(t)f_2(t') \rangle &= 2 \sum_k k_B T k^2 f(k) \boldsymbol{\kappa}_k \boldsymbol{\kappa}_{-k} \cos k[x_1(t) - x_2(t)] \delta(t - t') \\ &= 2\eta[u(t)] k_B T \delta(t - t'), \end{aligned}$$

com

$$\eta[u(t)] = \eta \left( \frac{1}{(k_0^2 u^2(t) + 1)^2} - \frac{4u^2(t)k_0^2}{(k_0^2 u^2(t) + 1)^3} \right)$$

onde usamos (2.49).



## Apêndice B

# Propagador para o estado gaussiano comprimido

Neste apêndice apresentamos o desenvolvimento que nos leva da equação (2.83) à equação (2.111). Para isto, consideremos primeiro a parte imaginária do expoente do superpropagador (2.64) com o funcional (2.83) numa situação em que a distância média entre as partículas é comparável com o comprimento característico do ambiente. Na forma mais geral temos (a menos do fator  $1/\hbar$ )

$$\begin{aligned}
& S_0[x_1(t'), x_2(t')] - S_0[y_1(t'), y_2(t')] + \frac{\eta}{2} \int_0^t dt' (y_1(t') - x_1(t')) (\dot{x}_1(t') + \dot{y}_1(t')) \\
& + \frac{\eta}{2} \int_0^t dt' (y_2(t') - x_2(t')) (\dot{x}_2(t') + \dot{y}_2(t')) - \frac{1}{2} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k f(k) D_k[x(t), y(t)] \\
& - \frac{1}{2} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k f(k) \int_0^t dt' \sum_{i \neq j=1}^2 \sin k[x_i(t') - y_j(t')] [\dot{x}_i(t') + \dot{y}_j(t')] \\
& + \frac{2\Omega}{\pi} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \int_0^t dt' (\cos k[x_1(t') - x_2(t')] - \cos k[y_1(t') - y_2(t')]) \Big\},
\end{aligned}$$

onde,

$$\begin{aligned}
D_k[x(t), y(t)] = & \frac{1}{k} \cos k[x_1(t) - x_2(t)] - \frac{1}{k} \cos k[x_1(0) - x_2(0)] \\
& - \frac{1}{k} \cos k[y_1(t) - y_2(t)] - \frac{1}{k} \cos k[y_1(0) - y_2(0)] \quad (\text{B.1})
\end{aligned}$$

e  $S_0[x_1(t'), x_2(t')]$  e a ação do sistema de interesse quando isolado. Colocando na forma explícita estes dois primeiros termos e usando as variáveis  $r, \chi, u, v$  temos

$$\begin{aligned} & \frac{\eta}{4} (4r'\chi' - 4r\chi + u'v' - uv) - \frac{1}{2} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k f(k) D_k[u, v] + M \int_0^t dt' (2\dot{r}(t')\dot{\chi}(t') + \dot{u}(t')\dot{v}(t')/2) \\ & + \frac{\eta}{4} \int_0^t dt' (4\dot{\chi}(t')r(t') + \dot{v}(t')u(t') - \dot{u}(t')v(t') - 4\dot{r}(t')\chi(t')) \\ & - \frac{1}{2} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k f(k) \int_0^t dt' (\dot{v}(t') \sin[ku(t')] \cos[k\chi(t')] + 4\dot{r}(t') \cos[ku(t')] \sin[k\chi(t')]) \\ & - \frac{2\Omega}{\pi} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \int_0^t dt' (2 \sin[ku(t')] \sin[kv(t')/2]), \end{aligned}$$

onde

$$D_k[u, v] = \frac{2}{k} \sin[ku'] \sin[kv'/2] - \frac{2}{k} \sin[ku(t)] \sin[kv(t)/2]. \quad (\text{B.2})$$

Desta expressão é evidente que as equações de movimento correspondentes são não lineares o que dificulta o cálculo das integrais funcionais. Para resolver esse problema aproximaremos a expressão acima de tal forma que os dois limites ( $k_0 u \ll 1$  e  $k_0 u \gg 1$ ) com solução exata conhecida sejam respeitados, assim, a parte imaginária do expoente do superpropagador será substituída por

$$\begin{aligned} & \frac{\eta}{4} (4r'\chi' - 4r\chi + u'v' - uv) - \frac{\eta}{2} D(k_0 L) (u'v' - uv) + M \int_0^t dt' (2\dot{r}(t')\dot{\chi}(t') + \dot{u}(t')\dot{v}(t')/2) \\ & + \frac{\eta}{4} \int_0^t dt' (4\dot{\chi}(t')r(t') + \dot{v}(t')u(t') - \dot{u}(t')v(t') - 4\dot{r}(t')\chi(t')) \\ & - \frac{\eta}{2} \int_0^t dt' (D(k_0 L)\dot{v}(t')u(t') + 4D(k_0 L)\dot{r}(t')\chi(t')) - \frac{2\eta\Omega}{\pi} \int_0^t dt' D(k_0 L)u(t')v(t'), \end{aligned}$$

onde o fator  $D(k_0 L) = \exp(-k_0 L)$ , introduz o comprimento característico do reservatório  $k_0^{-1}$  e a distância  $L$  que é interpretada como a distância média entre as regiões fisicamente permitidas a cada partícula. Na expressão acima foi feita a aproximação

$$\begin{aligned} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k f(k) D_k[u, v] & \approx \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k f(k) (v' \sin[ku'] - v \sin[ku]) \\ & = \eta D(k_0 L) (v'u' - vu). \end{aligned}$$

A mesma aproximação deve ser aplicada à parte real do expoente do superpropagador. Obtemos Assim, em termos das variáveis auxiliares  $\chi(t) = (\xi_1(t) + \xi_2(t))/2$  e  $v(t) = \xi_1(t) - \xi_2(t)$ , a expressão

$$\begin{aligned} & -\frac{\eta}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \int_0^\infty d\omega \omega \coth(\hbar\beta\omega/2) \cos\omega(t' - s) \\ & \left\{ 2(1 + D(k_0 L)) \chi(t')\chi(s) + \frac{1}{2}(1 - D(k_0 L)) v(t')v(s) \right\}. \end{aligned}$$

Colocando todo junto, podemos escrever o superpropagador como

$$\begin{aligned}
 J = & \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{h}(r, \chi, u, v) \right\} \int_{r'}^r \int_{u'}^u \int_{\chi'}^{\chi} \int_{v'}^v \mathcal{D}r(t') \mathcal{D}u(t') \mathcal{D}\chi(t') \mathcal{D}v(t') \\
 & \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ M \int_0^t dt' (2\dot{r}\dot{\chi} + \dot{u}\dot{v}/2) + \frac{\eta}{4} \int_0^t dt' (4\dot{\chi}(t')r(t') + \dot{v}(t')u(t') - \dot{u}(t')v(t') - 4\dot{r}(t')\chi(t')) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\eta}{2} \int_0^t dt' (D(k_0L)\dot{v}(t')u(t') + 4D(k_0L)\dot{r}(t')\chi(t')) - \frac{2\eta\Omega}{\pi} \int_0^t dt' D(k_0L)u(t')v(t') \right\} \\
 & \exp \left\{ -\frac{\eta}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \int_0^\infty d\omega \omega \coth(\hbar\beta\omega/2) \cos \omega(t' - s) \right. \\
 & \quad \left. \left( 2(1 + D(k_0L)) \chi(t')\chi(s) + \frac{1}{2}(1 - D(k_0L)) v(t')v(s) \right) \right\}. \tag{B.3}
 \end{aligned}$$

onde,

$$\tilde{h}(r, \chi, u, v) = \frac{\eta}{4} (4r'\chi' - 4r\chi + u'v' - uv) - \frac{\eta}{2} D(k_0L) (u'v' - uv). \tag{B.4}$$

### Equações de movimento

Do propagador (B.3) podem ser deduzidas as equações de movimento

$$2M\ddot{r} + 2\eta(1 + D(k_0L))\dot{r} = 0 \tag{B.5}$$

$$2M\ddot{\chi} - 2\eta(1 + D(k_0L))\dot{\chi} = 0 \tag{B.6}$$

$$\frac{M\ddot{v}}{2} - \frac{\eta}{2}(1 - D(k_0L))\dot{v} + \frac{M}{2}\omega^2 D(k_0L)v = 0 \tag{B.7}$$

$$\frac{M\ddot{u}}{2} + \frac{\eta}{2}(1 - D(k_0L))\dot{u} + \frac{M}{2}\omega^2 D(k_0L)u = 0, \tag{B.8}$$

com  $\omega^2 = \frac{4\Omega\eta}{M\pi}$ . A solução das equações (B.5, B.6, B.7, B.8), com as definições  $\gamma_{\pm} = \gamma(1 \pm D[k_0L])$  e  $\omega_{\pm}^2 = \omega^2 D(k_0L)$ , é

$$\bar{r}(t') = \frac{e^{-\gamma_+ t'/2}}{\sinh \left[ \frac{\gamma_+ t'}{2} \right]} \left\{ r e^{\gamma_+ t'/2} \sinh \left[ \frac{\gamma_+}{2} t' \right] + r' \sinh \left[ \frac{\gamma_+}{2} (t - t') \right] \right\} \tag{B.9}$$

$$\bar{\chi}(t') = \frac{e^{\gamma_+ t'/2}}{\sinh \left[ \frac{\gamma_+ t'}{2} \right]} \left\{ \chi e^{-\gamma_+ t'/2} \sinh \left[ \frac{\gamma_+}{2} t' \right] + \chi' \sinh \left[ \frac{\gamma_+}{2} (t - t') \right] \right\} \tag{B.10}$$

$$\bar{v}(t') = \frac{e^{\gamma-t'/2}}{\sinh \left[ \frac{\gamma_-}{2} t \sqrt{1 - 4\omega_t^2/\gamma_-^2} \right]} \left\{ v e^{-\gamma-t'/2} \sinh \left[ \frac{\gamma_-}{2} t' \sqrt{1 - 4\omega_t^2/\gamma_-^2} \right] + v' \sinh \left[ \frac{\gamma_-}{2} (t-t') \sqrt{1 - 4\omega_t^2/\gamma_-^2} \right] \right\} \quad (\text{B.11})$$

$$\bar{u}(t') = \frac{e^{-\gamma-t'/2}}{\sinh \left[ \frac{\gamma_-}{2} t \sqrt{1 - 4\omega_t^2/\gamma_-^2} \right]} \left\{ u e^{\gamma-t'/2} \sinh \left[ \frac{\gamma_-}{2} t' \sqrt{1 - 4\omega_t^2/\gamma_-^2} \right] + u' \sinh \left[ \frac{\gamma_-}{2} (t-t') \sqrt{1 - 4\omega_t^2/\gamma_-^2} \right] \right\}. \quad (\text{B.12})$$

### Ação clássica

O fato das variáveis entrarem no funcional no máximo até segunda ordem, nos permite usar a aproximação da fase estacionária para calcular as integrais funcionais. Esta aproximação consiste em definir cada trajetória em termos da sua desviação do caminho clássico, isto é, cada coordenada será escrita da seguinte forma

$$x(t) = \bar{x}(t) + \delta x(t) \quad (\text{B.13})$$

onde  $\bar{x}(t)$  é a trajetória clássica obtida como solução da equação de Lagrange e  $\delta x(t)$  é a variação do caminho clássico. Assim, por exemplo, no caso de apenas uma variável podemos escrever o propagador que liga um ponto  $a$  com um ponto  $b$  como

$$K(b, a) = \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) \right\} \mathcal{D}x(t) = f(t_a, t_b) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{cl}[b, a] \right\}, \quad (\text{B.14})$$

onde  $S_{cl}$  é a ação clássica obtida de  $\int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, \bar{x}, t)$  e  $f(t_a, t_b)$  é uma função que depende só do intervalo de tempo e é originado pelas flutuações de segunda ordem em torno do caminho clássico[19].

Seguindo o raciocínio indicado devemos encontrar a ação clássica de nosso sistema. Observemos primeiro a parte imaginária do expoente em (B.3) correspondente às variáveis  $r$  e  $\chi$ , o integrando tem a forma

$$2M\dot{r}(\tau)\dot{\chi}(\tau) + \eta(\dot{\chi}(\tau)r(\tau) - \dot{r}(\tau)\chi(\tau)) - 2\eta D(k_0 L)\dot{r}(\tau)\chi(\tau),$$

substituindo  $r(\tau)$  e  $\chi(\tau)$  pelas respectivas trajetórias clássicas (B.9,B.10) e integrando de 0 até  $t$  obtemos finalmente

$$\frac{-M}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right]} \left\{ \gamma_+ \left( r' \chi e^{-\gamma+t/2} + r \chi' e^{\gamma+t/2} \right) + (\gamma_+ - \gamma) (r \chi - r' \chi') \sinh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right] - \gamma_+ (r \chi + r' \chi') \cosh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right] \right\}. \quad (\text{B.15})$$

Da mesma forma podemos integrar a parte imaginária do expoente em (B.3) correspondente às variáveis  $u$  e  $v$ . Assim, o resultado de substituir as trajetórias clássicas nos dá

$$\frac{-M}{4 \sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]} \left\{ \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \left( u'v e^{-\gamma_- t/2} + uv' e^{\gamma_- t/2} \right) - (\gamma_- - \gamma) (uv - u'v') \sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] - \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} (uv + u'v') \cosh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] \right\}. \quad (\text{B.16})$$

Na parte real precisamos da expressão

$$\begin{aligned} \bar{\chi}(\tau)\bar{\chi}(s) = & \frac{e^{\gamma_+(s+\tau)/2}}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right]^2} \left\{ \chi'^2 \sinh \left[ \frac{(t-s)}{2} \gamma_+ \right] \sinh \left[ \frac{(t-\tau)}{2} \gamma_+ \right] \right. \\ & + \chi^2 e^{-\gamma_+ t} \sinh \left[ \frac{s}{2} \gamma_+ \right] \sinh \left[ \frac{\tau}{2} \gamma_+ \right] + e^{-\gamma_+ t/2} \chi \chi' \sinh \left[ \frac{\tau}{2} \gamma_+ \right] \sinh \left[ \frac{(t-s)}{2} \gamma_+ \right] \\ & \left. + e^{-\gamma_+ t/2} \chi \chi' \sinh \left[ \frac{s}{2} \gamma_+ \right] \sinh \left[ \frac{(t-\tau)}{2} \gamma_+ \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Quando integrarmos em  $s$  e  $\tau$  podemos usar a simetria explícita na troca destas variáveis para escrever a integral dupla  $\int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau-s) 2(1+D(k_0L)) \bar{\chi}(\tau)\bar{\chi}(s)$  como

$$\frac{\eta}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau-s) 2(1+D(k_0L)) \bar{\chi}(\tau)\bar{\chi}(s) = (1+D(k_0L)) (A_\chi(t)\chi^2 + B_\chi(t)\chi\chi' + C_\chi(t)\chi'^2), \quad (\text{B.18})$$

com as definições

$$A_\chi(t) = \frac{\eta}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau-s) e^{-\gamma_+ t} \frac{\sinh \left[ \frac{s}{2} \gamma_+ \right] \sinh \left[ \frac{\tau}{2} \gamma_+ \right]}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right]^2} e^{\gamma_+(s+\tau)/2} \quad (\text{B.19})$$

$$B_\chi(t) = \frac{2\eta}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau-s) e^{-\gamma_+ t/2} \frac{\sinh \left[ \frac{\tau}{2} \gamma_+ \right] \sinh \left[ \frac{(t-s)}{2} \gamma_+ \right]}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right]^2} e^{\gamma_+(s+\tau)/2} \quad (\text{B.20})$$

$$C_\chi(t) = \frac{\eta}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau-s) \frac{\sinh \left[ \frac{(t-s)}{2} \gamma_+ \right] \sinh \left[ \frac{(t-\tau)}{2} \gamma_+ \right]}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right]^2} e^{\gamma_+(s+\tau)/2}. \quad (\text{B.21})$$

Da mesma forma temos

$$\frac{\eta}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau-s) \frac{1}{2} (1-D(k_0L)) v(t')v(s) = (1-D(k_0L)) (A_v(t)v^2 + B_v(t)vv' + C_v(t)v'^2), \quad (\text{B.22})$$

com as definições

$$A_v(t) = \frac{\eta}{4\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) e^{-\gamma-t} \frac{\sinh \left[ \frac{s}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] \sinh \left[ \frac{\tau}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]^2} e^{\gamma-(s+\tau)/2} \quad (\text{B.23})$$

$$B_v(t) = \frac{\eta}{2\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) e^{-\gamma-t/2} \frac{\sinh \left[ \frac{\tau}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] \sinh \left[ \frac{(t-s)}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]^2} e^{\gamma-(s+\tau)/2} \quad (\text{B.24})$$

$$C_v(t) = \frac{\eta}{4\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) \frac{\sinh \left[ \frac{(t-s)}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] \sinh \left[ \frac{(t-\tau)}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]^2} e^{\gamma-(s+\tau)/2}. \quad (\text{B.25})$$

Colocando as expressões (B.15, B.16, B.18 e B.22) no superpropagador temos

$$\begin{aligned} J = \mathcal{N}(t) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \tilde{h}(r, \chi, u, v) - \frac{M}{\sinh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right]} \left\{ \gamma_+ \left( r' \chi e^{-\gamma+t/2} + r \chi' e^{\gamma+t/2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + (\gamma_+ - \gamma) (r \chi - r' \chi') \sinh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right] - \gamma_+ (r \chi + r' \chi') \cosh \left[ \frac{t}{2} \gamma_+ \right] \right\} \right. \\ \left. - \frac{M}{4 \sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right]} \left\{ \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \left( u' v e^{-\gamma-t/2} + u v' e^{\gamma-t/2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. - (\gamma_- - \gamma) (u v - u' v') \sinh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] - \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} (u v + u' v') \cosh \left[ \frac{t}{2} \sqrt{\gamma_-^2 - 4\omega_t^2} \right] \right\} \right\} \\ \times \exp -\frac{1}{\hbar} \left\{ D_+ (A_\chi(t) \chi^2 + B_\chi(t) \chi \chi' + C_\chi(t) \chi'^2) + D_- (A_v(t) v^2 + B_v(t) v v' + C_v(t) v'^2) \right\}, \quad (\text{B.26}) \end{aligned}$$

onde  $\mathcal{N}(t)$  é um coeficiente dependente do tempo, produzido pelas flutuações em torno do caminho clássico e que é determinado exigindo a normalização da matriz densidade final.

## Apêndice C

# Propagador para dois osciladores

Quando o nosso sistema de interesse é formado por dois osciladores harmônicos com pontos de equilíbrio fixos, podemos aplicar algumas aproximações ao propagador (2.64) de tal forma que os aspectos mais importantes da dinâmica sejam mantidos e que as expressões matemáticas sejam tratáveis analiticamente. Estas aproximações são baseadas na ideia de que os potenciais harmônicos tendem a confinar as trajetórias em uma região próxima ao ponto de equilíbrio e portanto os termos não lineares em (2.83) podem ser expandidos em torno da distância média que separa os centros dos potenciais. Como resultado destas considerações, o funcional de influência até segunda ordem em todas as variáveis pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
 F[r(t'), u(t'), \chi(t'), v(t')] &= \mathcal{F}[r(t'), u(t'), \chi(t'), v(t')] \\
 &\exp \left\{ -\frac{1}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} k^2 f(k) \cos(kL) \left( 2\chi(s)\chi(t') - \frac{v(s)v(t')}{2} \right) K(t' - s) \right. \\
 &\quad - \frac{i}{2\hbar} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k [(\sin(kL) - kL \cos(kL)) (v' - v) + k \cos(kL) (u'v' - uv)] \\
 &\quad - \frac{i}{2\hbar} \int_0^t dt' \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k [\dot{v}(t') (\sin(kL) + k \cos(kL) (u(t') - L)) + 4k \cos(kL) \dot{r}(t') \chi(t')] \\
 &\quad \left. - \frac{i2\Omega}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) [k \sin(kL)v(t') + k^2 \cos(kL) (u(t') - L) v(t')] \right\}, \quad (\text{C.1})
 \end{aligned}$$

onde, o fator  $\mathcal{F}[r(t'), u(t'), \chi(t'), v(t')]$  resulta de se escrever o produto  $\mathcal{F}[x_1(t'), y_1(t')] \times \mathcal{F}[x_2(t'), y_2(t')]$  nas novas variáveis, e sua forma explicita corresponde a

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}[r(t'), u(t'), \chi(t'), v(t')] &= \exp \left\{ -\frac{i\eta}{\hbar} \int_0^t dt' \left( \frac{\dot{u}(t')v(t')}{2} + 2\dot{r}(t')\chi(t') \right) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\eta}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \left( \frac{v(s)v(t')}{2} + 2\chi(s)\chi(t') \right) K(t' - s) \right\}. \quad (\text{C.2})
 \end{aligned}$$

Para encontrarmos a forma final do propagador é necessário calcular as somas em  $k$ . Isto é feito

através da substituição usual  $\sum_k \rightarrow \frac{\tilde{L}}{2\pi} \int dk$ , onde  $\tilde{L}$  é a dimensão característica do sistema completo e usando a prescrição [12, 11],

$$\eta g(k) = \frac{\tilde{L}}{2\pi} \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \quad \text{com} \quad g(k) = \frac{1}{2k_0^3} e^{-k/k_0},$$

onde  $k_0^{-1}$  determina a escala de comprimentos relevantes do sistema. Assim, temos as somas

$$\begin{aligned} \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k^2 &= \eta \\ \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) \cos(kL) &= \frac{\eta}{2k_0^2} \frac{1}{1 + k_0^2 L^2} \\ \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k^2 \cos(kL) &= \eta \frac{1 - 3k_0^2 L^2}{(1 + k_0^2 L^2)^3} \\ \sum_k \kappa_k \kappa_{-k} f(k) k \sin(kL) &= \eta \frac{L}{(k_0^2 L^2 + 1)^2} \end{aligned}$$

Substituindo estas expressões em (C.1) e colocando todos os termos na expressão do propagador (2.64), chegamos na equação (3.49),

$$\begin{aligned} J &= \int_{r'}^r \int_{u'}^u \int_{\chi'}^\chi \int_{v'}^v \mathcal{D}r(t') \mathcal{D}u(t') \mathcal{D}\chi(t') \mathcal{D}v(t') \\ &\exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \int_0^t dt' (4\dot{r}(t')\dot{\chi}(t') + \dot{u}(t')\dot{v}(t')) - \frac{m}{2} \int_0^t dt' (4\omega_0^2 r(t')\chi(t') + \omega(L)^2 u(t')v(t') + F(L)v(t')) \right\} \\ &\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[ \eta_-(L) \frac{\dot{u}(t')v(t')}{2} + 2\eta_+(L)\dot{r}(t')\chi(t') \right] \right\} \\ &\exp \left\{ -\frac{1}{\hbar\pi} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \left[ \eta_-(L) \frac{v(s)v(t')}{2} + 2\eta_+(L)\chi(s)\chi(t') \right] K(t' - s) \right\}, \end{aligned}$$

com as definições (3.50 e 3.51).

### Equações de Movimento

Procedemos agora com o cálculo das integrais funcionais no propagador (3.49). As trajetórias que minimizam a ação em (3.49) satisfazem a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = 0. \quad (\text{C.3})$$

Até segunda ordem na ação, a variável  $r_c$  deve satisfazer a equação

$$\ddot{r}_c(t') + \omega_0^2 r_c(t') + \gamma_+(L)\dot{r}_c(t') = 0, \quad (\text{C.4})$$



onde definimos os novos coeficientes

$$\gamma_+(L) = \frac{\eta_+(L)}{m}, \quad \gamma = \frac{\eta}{m}. \quad (\text{C.5})$$

A solução da equação (C.4) é

$$r_c(t') = e^{-\gamma_+(L)t'/2} \left\{ C_1^{(r)} \exp\left(-\frac{t'}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right) + C_2^{(r)} \exp\left(\frac{t'}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right) \right\}, \quad (\text{C.6})$$

as constantes são facilmente encontradas usando as condições de contorno  $r(0) = r'$  e  $r(t) = r$ ,

$$C_1^{(r)} = \frac{r' \exp\left(\frac{t}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right) - r \exp\left(\frac{t}{2} \gamma_+(L)\right)}{2 \sinh\left(\frac{t}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right)}, \quad (\text{C.7})$$

$$C_2^{(r)} = \frac{r \exp\left(\frac{t}{2} \gamma_+(L)\right) - r' \exp\left(-\frac{t}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right)}{2 \sinh\left(\frac{t}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right)},$$

depois de substituir as constantes e simplificar a equação (C.6) obtemos a forma final da trajetória clássica para a variável  $r$

$$r_c(t') = \frac{e^{-\gamma_+(L)t'/2}}{\sinh\left(\frac{t}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right)} \left\{ r' \sinh\left[\frac{(t-t')}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right] + r e^{\gamma_+(L)t/2} \sinh\left[\frac{t'}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right] \right\}. \quad (\text{C.8})$$

Para a variável auxiliar  $\chi$  temos

$$\ddot{\chi}_c(t') + \omega_0^2 \chi_c(t') - \gamma_+(L) \dot{\chi}_c(t') = 0 \quad (\text{C.9})$$

e a solução correspondente é

$$\chi_c(t') = \frac{e^{\gamma_+(L)t'/2}}{\sinh\left(\frac{t}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right)} \left\{ \chi' \sinh\left[\frac{(t-t')}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right] + \chi e^{-\gamma_+(L)t/2} \sinh\left[\frac{t'}{2} \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}\right] \right\}. \quad (\text{C.10})$$

A equação de movimento clássica para a coordenada relativa e a sua respectiva solução são

$$\ddot{u}_c(t') + \omega(L)^2 u_c(t') + \gamma_-(L) \dot{u}_c(t') + F(L) = 0, \quad (\text{C.11})$$

$$u_c(t') = e^{-\gamma_-(L)t'/2} \left\{ C_1^{(u)} \exp\left(-\frac{t'}{2} \sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right) + C_2^{(u)} \exp\left(\frac{t'}{2} \sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right) \right\} - \frac{F(L)}{\omega(L)^2}, \quad (\text{C.12})$$

onde definimos

$$\gamma_-(L) = \frac{\eta_-(L)}{m}. \quad (\text{C.13})$$

Aplicando as condições de contorno temos

$$\begin{aligned} C_1^{(u)} &= \frac{u'(L) \exp\left(\frac{t}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right) - u(L) \exp\left(\frac{t}{2}\gamma_-(L)\right)}{2 \sinh\left(\frac{t}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right)}, \\ C_2^{(u)} &= \frac{u(L) \exp\left(\frac{t}{2}\gamma_-(L)\right) - u'(L) \exp\left(-\frac{t}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right)}{2 \sinh\left(\frac{t}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right)}, \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

onde  $u(L) = u + \frac{F(L)}{\omega(L)^2}$ ,  $u'(L) = u' + \frac{F(L)}{\omega(L)^2}$  e  $u' = u(0)$ ,  $u = u(t)$ . Substituindo as constantes na equação para  $u_c$  temos

$$\begin{aligned} u_c(t') &= \frac{e^{-\gamma_-(L)t'/2}}{\sinh\left(\frac{t}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right)} \left\{ u'(L) \sinh\left[\frac{(t-t')}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right] \right. \\ &\quad \left. + u(L) e^{\gamma_-(L)t'/2} \sinh\left[\frac{t'}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Finalmente a equação para  $v$  é

$$\ddot{v}_c(t') + \omega(L)^2 v_c(t') - \gamma_-(L) \dot{v}_c(t') = 0 \quad (\text{C.16})$$

e a sua solução

$$\begin{aligned} v_c(t') &= \frac{e^{\gamma_-(L)t'/2}}{\sinh\left(\frac{t}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right)} \left\{ v' \sinh\left[\frac{(t-t')}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right] \right. \\ &\quad \left. + v e^{-\gamma_-(L)t'/2} \sinh\left[\frac{t'}{2}\sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}\right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

com  $v' = v(0)$  e  $v = v(t)$ .

### Ação clássica correspondente às variáveis $r$ e $\chi$

Para encontrar a ação clássica, isolamos primeiro os termos da parte imaginária do expoente de (3.49) que dependem só das variáveis  $r$  e  $\chi$  e substituímos pelas trajetórias clássicas (C.8 e C.10)

$$\begin{aligned} &\frac{m}{2} \int_0^t dt' (4\dot{r}_c(t')\dot{\chi}_c(t') - 4\omega_0^2 r_c(t')\chi_c(t') - 4\gamma_+(L)\dot{r}_c(t')\chi_c(t')) \\ &= \frac{m}{\sinh[\Gamma_+(L)t/2]} \left\{ -\Gamma_+(L) \left( r'\chi e^{-\gamma_+(L)t/2} + r\chi' e^{\gamma_+(L)t/2} \right) \right. \\ &\quad \left. + (r'\chi' - r\chi) \gamma_+(L) \sinh[\Gamma_+(L)t/2] + (r'\chi' + r\chi) \Gamma_+(L) \cosh[\Gamma_+(L)t/2] \right\} \\ &= Q_r(t, L) (r'\chi' + r\chi) - O_r(t, L)r'\chi - N_r(t, L)r\chi' + m (r'\chi' - r\chi) \gamma_+(L), \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

onde definimos  $\Gamma_+(L) = \sqrt{\gamma_+(L)^2 - 4\omega_0^2}$  e as funções

$$Q_r(t, L) = m\Gamma_+(L) \coth [\Gamma_+(L)t/2] \quad (\text{C.19})$$

$$O_r(t, L) = \frac{m\Gamma_+(L)e^{-\gamma_+(L)t/2}}{\sinh [\Gamma_+(L)t/2]} \quad N_r(t, L) = \frac{m\Gamma_+(L)e^{\gamma_+(L)t/2}}{\sinh [\Gamma_+(L)t/2]}. \quad (\text{C.20})$$

Também é necessário substituir a trajetória clássica na parte real no expoente de (3.49). Primeiro observe o produto

$$\begin{aligned} 2\chi_c(s)\chi_c(\tau) = & \frac{e^{\gamma_+(L)(s+\tau-t)/2}}{2 \sinh [\Gamma_+(L)t/2]^2} \left\{ 4e^{-\gamma_+(L)t/2} \chi^2 \sinh [\Gamma_+(L)s/2] \sinh [\Gamma_+(L)\tau/2] \right. \\ & + 4\chi'^2 e^{\gamma_+(L)t/2} \sinh [\Gamma_+(L)(t-s)/2] \sinh [\Gamma_+(L)(t-\tau)/2] \\ & \left. + 4\chi\chi' (\sinh [\Gamma_+(L)s/2] \sinh [\Gamma_+(L)(t-\tau)/2] + \sinh [\Gamma_+(L)(t-s)/2] \sinh [\Gamma_+(L)\tau/2]) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

quando integramos em  $s$  e  $\tau$  podemos usar a simetria na troca dessas variáveis para escrever a integral dupla como

$$\int_0^t d\tau \int_0^\tau ds (2\chi(s)\chi(\tau)) K(\tau-s) = \frac{1}{2} \int_0^t d\tau \int_0^t ds (2\chi(s)\chi(\tau)) K(\tau-s). \quad (\text{C.22})$$

Usando o resultado acima na parte real correspondente à variável  $\chi$  do expoente do propagador (3.49) obtemos

$$\frac{2m}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds \gamma_+(L) \chi_c(s) \chi_c(\tau) K(\tau-s) = A_\chi(t, L) \chi^2 + B_\chi(t, L) \chi\chi' + C_\chi(t, L) \chi'^2, \quad (\text{C.23})$$

com as definições

$$A_\chi(t, L) = \frac{m\gamma_+(L)}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau-s) \frac{\sinh [\Gamma_+(L)\tau/2] \sinh [\Gamma_+(L)s/2]}{\sinh [\Gamma_+(L)t/2]^2} e^{-\gamma_+(L)t} e^{\gamma_+(L)(s+\tau)/2}, \quad (\text{C.24})$$

$$B_\chi(t, L) = \frac{2m\gamma_+(L)}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau-s) \frac{\sinh [\Gamma_+(L)\tau/2] \sinh [\Gamma_+(L)(t-s)/2]}{\sinh [\Gamma_+(L)t/2]^2} e^{-\gamma_+(L)t/2} e^{\gamma_+(L)(s+\tau)/2}, \quad (\text{C.25})$$

$$C_\chi(t, L) = \frac{m\gamma_+(L)}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau-s) \frac{\sinh [\Gamma_+(L)(t-\tau)/2] \sinh [\Gamma_+(L)(t-s)/2]}{\sinh [\Gamma_+(L)t/2]^2} e^{\gamma_+(L)(s+\tau)/2}. \quad (\text{C.26})$$

**Ação clássica para  $u$  e  $v$** 

A ação clássica correspondente às variáveis  $u$  e  $v$  é obtida de forma completamente análoga, o resultado é

$$\begin{aligned} & \frac{m}{2} \int_0^t d\tau (\dot{u}_c(\tau)\dot{v}_c(\tau) - \omega(L)^2 u_c(\tau)v_c(\tau) - F(L)v_c(\tau) - \gamma_-(L)\dot{u}_c(\tau)v_c(\tau)) \\ &= \frac{mF(L)\gamma_-(L)}{2\omega(L)^2} (v' - v) + \frac{2F(L)}{\omega(L)^2} Q_v(t, L)(v' + v) - \frac{2F(L)}{\omega(L)^2} (N_v(t, L)v' + O_v(t, L)v) \\ & \quad + Q_v(t, L) (u'v' + uv) - O_v(t, L)u'v - N_v(t, L)v'u + \frac{m\gamma_-(L)}{4} (u'v' - uv), \end{aligned} \quad (C.27)$$

onde introduzimos as definições

$$Q_v(t, L) = \frac{m\Gamma_-(L)}{4} \coth[\Gamma_-(L)t/2] \quad (C.28)$$

$$O_v(t, L) = \frac{m\Gamma_-(L)e^{-\gamma_-(L)t/2}}{4 \sinh[\Gamma_-(L)t/2]} \quad N_v(t, L) = \frac{m\Gamma_-(L)e^{\gamma_-(L)t/2}}{4 \sinh[\Gamma_-(L)t/2]} \quad (C.29)$$

e a função  $\Gamma_-(L) = \sqrt{\gamma_-(L)^2 - 4\omega(L)^2}$ .

A parte real correspondente à variável  $v$  é calculada começando pelo produto

$$\begin{aligned} \frac{v(s)v(\tau)}{2} &= \frac{e^{\gamma_-(L)(s+\tau-t)/2}}{2 \sinh[\Gamma_-(L)t/2]^2} \left\{ e^{-\gamma_-(L)t/2} v^2 \sinh[\Gamma_-(L)s/2] \sinh[\Gamma_-(L)\tau/2] \right. \\ & \quad + v'^2 e^{\gamma_-(L)t/2} \sinh[\Gamma_-(L)(t-s)/2] \sinh[\Gamma_-(L)(t-\tau)/2] \\ & \quad \left. + vv' (\sinh[\Gamma_-(L)s/2] \sinh[\Gamma_-(L)(t-\tau)/2] + \sinh[\Gamma_-(L)(t-s)/2] \sinh[\Gamma_-(L)\tau/2]) \right\}. \end{aligned}$$

Integrando em  $s$  e  $\tau$  podemos usar a simetria explícita na troca dessas variáveis para escrever

$$\int_0^t d\tau \int_0^\tau ds \left( \frac{v(s)v(\tau)}{2} \right) K(\tau - s) = \frac{1}{2} \int_0^t d\tau \int_0^t ds \left( \frac{v(s)v(\tau)}{2} \right) K(\tau - s),$$

e a forma final da parte real do expoente de (3.49) que depende da variável  $v$  pode ser escrita como

$$\frac{m}{2\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds \gamma_-(L) v(s)v(\tau) K(\tau - s) = A_v(t, L)v^2 + B_v(t, L)vv' + C_v(t, L)v'^2, \quad (C.30)$$

onde foram usadas as definições

$$A_v(t, L) = \frac{m\gamma_-(L)}{4\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau - s) \frac{\sinh[\Gamma_-(L)\tau/2] \sinh[\Gamma_-(L)s/2]}{\sinh[\Gamma_-(L)t/2]^2} e^{-\gamma_-(L)t} e^{\gamma_-(L)(s+\tau)/2}, \quad (C.31)$$

$$B_v(t, L) = \frac{m\gamma_-(L)}{2\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds K(\tau - s) \frac{\sinh[\Gamma_-(L)\tau/2] \sinh[\Gamma_-(L)(t-s)/2]}{\sinh[\Gamma_-(L)t/2]^2} e^{-\gamma_-(L)t/2} e^{\gamma_-(L)(s+\tau)/2}, \quad (C.32)$$

$$C_v(t, L) = \frac{m\gamma_-(L)}{4\pi} \int_0^t d\tau \int_0^t ds K(\tau - s) \frac{\sinh[\Gamma_-(L)(t - \tau)/2] \sinh[\Gamma_-(L)(t - s)/2]}{\sinh[\Gamma_-(L)t/2]^2} e^{\gamma_-(L)(s+\tau)/2}. \quad (\text{C.33})$$

Usando as expressões (C.18, C.23, C.27 e C.30), chegamos ao resultado da integração funcional em (3.49), que corresponde à equação (3.52)

$$\begin{aligned} J = & \mathcal{N}(t) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ Q_r(t, L) (r'\chi' + r\chi) - O_r(t, L)r'\chi - N_r(t, L)r\chi' + m\gamma_+(L) (r'\chi' - r\chi) \right. \\ & + \frac{mF(L)\gamma_-(L)}{2\omega(L)^2} (v' - v) + \frac{2F(L)}{\omega(L)^2} Q_v(t, L)(v' + v) - \frac{2F(L)}{\omega(L)^2} (N_v(t, L)v' + O_v(t, L)v) \\ & \left. + Q_v(t, L) (u'v' + uv) - O_v(t, L)u'v - N_v(t, L)v'u + \frac{m\gamma_-(L)}{4} (u'v' - uv) \right\} \\ & \exp -\frac{1}{\hbar} \left\{ A_\chi(t, L)\chi^2 + B_\chi(t, L)\chi\chi' + C_\chi(t, L)\chi'^2 + A_v(t, L)v^2 + B_v(t, L)vv' + C_v(t, L)v'^2 \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.34})$$

# Referências Bibliográficas

- [1] Selected Papers on Noise and Stochastics Processes, Nelson Wax, 2 ed. (Dover, New York, 1954)
- [2] H. B. Callen and T. A. Welton, Phys. Rev. **83**, 34-40 (1951)
- [3] E. Kanai, Prog. Theor. Phys. **3**, 440 (1948)
- [4] M. D. Kostin, J. Chem. Phys. **57** (1972) 3589
- [5] E. Nelson, Phys. Rev. **150** (1966) 1079
- [6] K. Yasue, Annals of Physics **114** (1978) 479
- [7] H. Dekker, Phys. Rev. A **16** (1977) 2126
- [8] I. R. Senitzky, Phys. Rev. **119** (1960) 670
- [9] R. Zwanzig, J. Chem. Phys. **33** (1960) 1338
- [10] R. H. Koch, D.J. Van Harlingen and John Clarke, Phys. Rev. Lett **45** (1980) 2132
- [11] O. S. Duarte, Estudo do acoplamento efetivo entre duas partículas brownianas quânticas, Tese de mestrado, Instituto de Física “Gleb Wataghin” Universidade Estadual de Campinas, Campinas, São Paulo (2006)
- [12] O. S. Duarte and A. O. Caldeira, Phys. Rev. Lett. **97** 250601 (2006)
- [13] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **46**, 211 (1981); A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Ann. Phys. (N.Y.) **149**, 374 (1983); *ibid.* **153**, 445(E) (1983)
- [14] P. Ullersma, Physica (Utrecht) **32**, 27 (1966); *ibid.* 56; 74; 90
- [15] V. Hakim and V. Ambegaokar, Phys. Rev. A **32**, 423 (1985)
- [16] Juan Pablo Paz and Augusto J. Roncaglia, Phys. Rev. Lett. **100**, 220401 (2008)
- [17] R. Zwanzig, J. Stat. Phys. **9** (1973) 215.
- [18] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Phys. Rev. A **31** (1985) 1059

- [19] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, (1965)
- [20] H. Grabert, P. Schramm, and G. L. Ingold, *Phys. Rep.* **168**, 115 (1988)
- [21] R. P. Feynman and A. F. L. Vernon, *Ann. Phys. (N.Y.)* **24**, 118 (1963)
- [22] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particles Systems*, McGraw-Hill (1971)
- [23] P. Hedegard and A. O. Caldeira, *Physica Scripta*. Vol **35**, 609-622 (1987)
- [24] F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1268 (1984)
- [25] A. O. Caldeira, *Alguns Aspectos da Dinâmica Quântica de uma Partícula Browniana*, Notas de Física Instituto de Física “Gleb Wataghin” Universidade Estadual de Campinas, Campinas, São Paulo (1994)
- [26] Hänggi P. and Ingold G. *Chaos* **15**, 026105 (1005)
- [27] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, Series in Modern Condensed Matter Physics, vol. 2, World Scientific (1993)
- [28] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935)
- [29] N. Bohr, *Phys. Rev.* **48**, 696 (1935)
- [30] E. Schrödinger, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **31**, 555 (1935)
- [31] John S. Bell, *Physics* **1** 195-200 (1964)
- [32] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1993), p. 170.
- [33] A. Aspect, P. Grangier and G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 460 (1981)
- [34] A. Aspect, P. Grangier and G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91 (1982)
- [35] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [36] Samuel L. Braunstein and Peter Van Loock, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 513 (2005)
- [37] A. Peres, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1413 (1996)
- [38] P. Horodecki, *Phys. Lett. A* **232**, 333 (1997)
- [39] R. Simon, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2726 (2000)
- [40] E. Wigner, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932)

- [41] Gerardo Adesso, Alessio Serafini, and Fabrizio Illuminati, *Phys. Rev. A* **70**, 022318 (2004)
- [42] G. Vidal and R. F. Werner, *Phys. Rev. A* **65**, 032314 (2002)
- [43] G. Adesso et al, *Phys. Rev. A* **79**, 040305 (2009)
- [44] M. P. Almeida et al, *Science* **316**, 579 (2007)
- [45] S.P. Walborn et al, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 160505 (2009)
- [46] E. Shchukin and W. Vogel, *Phys, Rev, Lett.* **95**, 230502 (2005); *Phys. Rev. Lett.* **95**, 249904(E) (2005); *Phys. Rev. Lett.* **96**, 129902(E) (2006); Adam Miranowicz and Marco Piani, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 058901 (2006); E. Shchukin and W. Vogel, *Phys, Rev, Lett.* **97**, 058902 (2006).
- [47] Ulf Leonhardt, *Measuring the Quantum State of Light* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [48] Christian Hörhammer and Helmut Büttner, *Phys. Rev. A*, **77**, 042305 (2008)
- [49] D. M. Valente and A. O. Caldeira, *Phys. Rev. A*, **81**, 012117 (2010)
- [50] O. S. Duarte and A. O. Caldeira, *Phys. Rev. A*, **80**, 032110 (2009)