



Tunelamento Dissipativo e o Método do Tempo Complexo: Cálculo do Espectro de Transmissão

Alexis Omar García Rodríguez

Tese apresentada ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” como
requisito para a obtenção do título de Doutor em Física

Orientador: Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira

*Este exemplar corresponde à redação final da Tese de Doutorado defendida pelo
aluno Alexis Omar García Rodríguez e aprovada pela comissão julgadora.*

8/8/2011

Campinas
2011

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

G165t

García Rodríguez, Alexis Omar, 1972-
Tunelamento dissipativo e o método do tempo
complexo : cálculo do espectro de transmissão / Alexis
Omar García Rodríguez. -- Campinas, SP : [s.n.], 2011.

Orientador: Amir Ordacgi Caldeira.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de
Campinas, Instituto de Física “Gleb Wataghin”.

1. Método do tempo complexo. 2. Tunelamento
(Física). 3. Dissipação de energia. 4. Integrais de
trajetórias. 5. Espectro de transmissão. I. Caldeira,
Amir Ordacgi. II. Universidade Estadual de Campinas.
Instituto de Física “Gleb Wataghin”. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: Dissipative tunneling and the complex time method : calculation of the transmission spectrum

Palavras-chave em inglês:

Complex-time method

Tunneling (Physics)

Energy dissipation

Path integrals

Transmission spectrum

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Titulação: Doutor em Ciências

Banca Examinadora:

Amir Ordacgi Caldeira [Orientador]

George Emanuel Avraam Matsas

Marcus Aloízio Martínez de Aguiar

Raimundo Rocha dos Santos

José Antonio Brum

Data da Defesa: 17-06-2011

Programa de Pós-Graduação em: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE ALEXIS OMAR GARCÍA RODRÍGUEZ - RA 991268, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN" DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 17/06/2011.

COMISSÃO JULGADORA:

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

Prof. Dr. George Emanuel Avraam Matsas – IFT/UNESP

Prof. Dr. Marcus Aloízio Martinez de Aguiar – DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Raimundo Rocha dos Santos – IF/UFRJ

Prof. Dr. José Antonio Brum – DFMC/IFGW/UNICAMP

À minha querida família

“Para um físico, a matemática não é apenas uma ferramenta através da qual os fenômenos podem ser calculados; ela é a principal fonte de conceitos e princípios por meio dos quais as novas teorias podem ser criadas.”

Freeman J. Dyson

“Quando nada parece ajudar, eu vou e olho o cortador de pedras martelando sua rocha talvez cem vezes sem que nem uma só rachadura apareça. No entanto, na centésima primeira martelada, a pedra se abre em duas e eu sei que não foi aquela a que conseguiu, mas todas as que vieram antes.”

Jacob A. Riis

Agradecimentos

Este trabalho foi possível graças à ajuda de muitas pessoas. Gostaria de agradecer

Ao Humberto e à Dania, ao Armando e à Priscila, e também ao Antonio, pela grande ajuda na minha chegada ao Brasil.

À minha querida esposa María Inés, pelo seu exemplo, sua dedicação e companhia que fizeram possível este trabalho.

Ao meu querido irmão Pedro pela sua ajuda ainda em momentos muito difíceis para ele.

Aos meus queridos pais Georgina e Pedro e às minhas queridas irmãs Tania e Mileydis, pelo apoio e a compreensão ao longo de todos estes anos.

Ao Oscar, ao Mark e ao John pelas pacientes conversas sobre diversos pontos deste trabalho.

Ao Amir pela leitura e as correções que ajudaram a melhorar o presente trabalho e também pela ajuda na fase prévia à defesa.

Ao Lora e à Vera pela grande amizade e a ajuda prestada em todos os momentos.

Ao Eugenio pela imensa ajuda de sempre.

À advogada Luciana pela amizade e a orientação em momentos críticos e também à Lindinalva, à Claudete e à Zilda.

À Susana pela ajuda prestada sempre que precisei.

À CAPES pelo financiamento.

Ao pessoal da Secretaria da Pós-Graduação do Instituto de Física pela dedicação e a orientação em todas as etapas do curso de doutorado.

Ao pessoal do Centro de Computação do Instituto de Física pela paciência e atenção.

Aos muitos amigos queridos que tive a sorte de conhecer ao longo de todos estes anos, pela sincera e agradável amizade que trouxe muitos momentos inesquecíveis, pelas palavras de apoio e pela ajuda nos momentos mais difíceis.

É pouco o que eu posso escrever nestas linhas para agradecer a todas as pessoas que me ajudaram de muitas maneiras para poder completar este trabalho. Nunca serão suficientes as palavras e sempre, muito injustamente, esquecerei de alguém. Fico sinceramente agradecido a todos e muito grato de poder encontrá-los no dia a dia e dizer pessoalmente, de alguma forma, **MUITO OBRIGADO!**

Resumo

Este trabalho foi motivado por várias dificuldades encontradas no estudo do artigo de M. Ueda, *Transmission Spectrum of a Tunneling Particle Interacting with Dynamical Fields: Real-Time Functional-Integral Approach*, Phys. Rev. B **54**, 8676 (1996). Nesse artigo, num formalismo de tempo real, é descrito o tunelamento de uma partícula através de uma barreira utilizando tempos não reais de travessia através dessa barreira. No presente trabalho é proposto um formalismo mais amplo de tempo real para uma introdução mais natural de valores complexos do tempo na descrição do tunelamento de uma partícula em interação com o ambiente. Esta proposta está baseada no chamado método do tempo complexo utilizado no caso do tunelamento de uma partícula sem interação com o ambiente estudado nos trabalhos de D. W. McLaughlin, J. Math. Phys. **13**, 1099 (1972) e B. R. Holstein e A. R. Swift, Am. J. Phys. **50**, 833 (1982).

Seguindo o trabalho citado de Ueda, o ambiente da partícula é representado através de um conjunto, ou banho térmico, de osciladores harmônicos caracterizado por uma função de densidade espectral $J(\omega)$. Utilizando o método de Feynman de integrais de trajetória, integramos sobre as coordenadas dos osciladores do banho e obtemos uma expressão exata para o espectro de transmissão da partícula para uma temperatura do banho $T > 0$. Limitando-nos então ao caso mais simples $T = 0$, estudamos o tunelamento dissipativo da partícula através da barreira.

Considerando \hbar um parâmetro pequeno (limite semiclássico), aproximamos o espectro de transmissão da partícula através da contribuição das trajetórias clássicas e suas trajetórias vizinhas. Nesta aproximação consideramos a variação da ação efetiva da partícula para tempos dados de duração das trajetórias e deste modo substituímos o procedimento variacional seguido no trabalho indicado de Ueda onde não é considerada a variação nos tempos de travessia da partícula através da barreira. Num segundo problema variacional nos tempos de duração das trajetórias clássicas de acordo com o método do tempo complexo e considerando também a variação nas posições iniciais e finais dessas trajetórias, obtemos as equações de movimento das chamadas trajetórias clássicas especiais. Este tratamento das coordenadas iniciais e finais das trajetórias clássicas substitui o procedimento seguido no trabalho de Ueda onde é considerada uma aceleração nula durante todo o trajeto de movimento incluindo o trajeto na região da barreira.

Diferentemente do artigo citado de Ueda, no presente trabalho utilizamos pacotes de ondas relativamente bem localizados para descrever os estados inicial e final da partícula. Em consequência, aproximamos o espectro de transmissão da partícula através de trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais e finais iguais ao valor médio da coordenada para esses pacotes de ondas.

O procedimento seguido neste trabalho, baseado no método do tempo complexo, permite obter o fator de acoplamento apropriado entre as duas trajetórias que descrevem a ação efetiva da partícula substituindo assim o procedimento de tipo *ad hoc* seguido com este fim no trabalho indicado de Ueda. O método do tempo complexo permite obter também o termo da diferença entre a ação efetiva da partícula e o expoente de tunelamento, sendo que estas grandezas são tratadas como iguais no trabalho citado de Ueda.

Considerando termos até primeira ordem num campo elétrico externo e na interação da partícula com o banho de osciladores, obtemos expressões gerais para o expoente de tunelamento, o espectro de transmissão, a taxa total de tunelamento e o tempo de travessia da partícula através da barreira, válidas para um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária. Assim temos que a interação da partícula com um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária diminui a taxa total de tunelamento. Adicionalmente, obtemos que a interação da partícula com os osciladores do banho com frequências $\omega_\alpha = \omega_c \approx 1.9 T_0^{-1}$, onde T_0 é o tempo característico de travessia através da barreira no caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico, não afeta o tempo característico de travessia através da barreira. Por outro lado, a interação da partícula com os osciladores do banho que têm frequências $\omega_\alpha < \omega_c$ ($\omega_\alpha > \omega_c$) diminui (aumenta) o tempo característico de travessia através da barreira.

No caso de um banho de osciladores com uma única frequência ω e uma constante de acoplamento com a partícula dada por $C_\alpha = \tilde{C}_\alpha(\omega T_0)^\sigma$, são identificados cinco comportamentos diferentes em função de ω para o expoente característico de tunelamento e o tempo característico de travessia através da barreira. Estes comportamentos correspondem aos valores de $\sigma < 1$, $\sigma = 1$, $1 < \sigma < 2$, $\sigma = 2$ e $\sigma > 2$. No trabalho de M. Ueda, Phys. Rev. B **54**, 8676 (1996), foi considerado somente o expoente característico de tunelamento no caso $\sigma = 1$.

No caso de um banho ôhmico de osciladores a temperatura zero, assim como no caso de um banho de osciladores com uma única frequência, obtemos que o espectro de transmissão da partícula é zero para uma energia final característica da partícula maior que a energia inicial característica. Este resultado corrige o resultado correspondente no trabalho citado de Ueda, o qual não é consistente do ponto de vista físico, permitindo também obter de um modo mais coerente a corrente de tunelamento entre dois metais separados por um material isolante a temperatura zero. Obtém-se também que a interação da partícula com um banho ôhmico de osciladores não afeta o tempo característico de travessia através da barreira até primeira ordem nessa interação.

Abstract

This work was motivated by several difficulties found when studying the article by M. Ueda, *Transmission Spectrum of a Tunneling Particle Interacting with Dynamical Fields: Real-Time Functional-Integral Approach*, Phys. Rev. B **54**, 8676 (1996). In that paper, using a real-time formalism, a tunneling particle is described by complex traversal times of tunneling. In the present work we propose a broader real-time formalism that allows for a more natural introduction of complex values of time in the description of a tunneling particle interacting with the environment. This proposal is based on the well-known complex time method used in the case of a tunneling particle with no interaction with the environment studied in the works of D. W. McLaughlin, J. Math. Phys. **13**, 1099 (1972) and B. R. Holstein and A. R. Swift, Am. J. Phys. **50**, 833 (1982).

Following the cited work of Ueda, the environment of the particle is represented by a set, or heat bath, of harmonic oscillators which is characterized by a spectral density function $J(\omega)$. Using the Feynman path integrals method, we integrate out the coordinates of the bath oscillators and obtain an exact expression for the transmission spectrum of the particle for a bath temperature $T > 0$. Limiting ourselves to the simpler case $T = 0$, we study the case of a dissipative tunneling of the particle.

Considering \hbar a small parameter (semiclassical limit) we approximate the transmission spectrum of the particle by the contribution of the classical trajectories and its neighboring paths. In this approach we consider the variation of the effective action of the particle for given duration times of the paths and replace the variational procedure followed in the cited work of Ueda where the variation in the traversal times of tunneling is not considered. In a second variational problem for the duration times of the classical paths, according to the complex time method and considering also the variation in the initial and final positions of these paths, we obtain the equations of motion for the so-called special classical paths. This treatment of the initial and final coordinates of the classical paths replaces the procedure followed in the cited work of Ueda where an acceleration equal to zero is considered during the entire path of motion including the region under the barrier.

Unlike the cited article of Ueda, we use in the present work wave packets relatively well localized to describe the initial and final states of the particle. Consequently, we approximate the transmission spectrum of the particle through special classical paths with initial and final coordinates equal to the average value of the coordinate for those wave packets.

The procedure followed in this work, based on the complex time method, gives the appropriate coupling factor between the two paths describing the effective action of the particle and thus replaces the *ad hoc* procedure followed for this purpose in the cited work of Ueda. The complex time method also allows us to obtain the difference term between the effective action of the particle and the tunneling exponent. These quantities are treated as equal in Ueda's work.

Considering terms up to first order in an external electric field and the interaction of the particle with the bath of oscillators, we obtain general expressions for the tunneling exponent, transmission spectrum, total tunneling rate and traversal time of tunneling, which are valid for a bath of oscillators with an

arbitrary spectral density function. We find that the interaction of the particle with a bath of oscillators with an arbitrary spectral density function decreases the total tunneling rate. Also, we find that the interaction of the particle with the bath oscillators with frequencies $\omega_\alpha = \omega_c \approx 1.9 T_0^{-1}$, where T_0 is the characteristic traversal time of tunneling when there is no interaction of the particle with the bath of oscillators nor electric field, does not affect the characteristic traversal time of tunneling. On the other hand, the interaction of the particle with the bath oscillators having frequencies $\omega_\alpha < \omega_c$ ($\omega_\alpha > \omega_c$) decreases (increases) the characteristic traversal time of tunneling.

In the case of a bath of oscillators with a single frequency ω and a coupling constant with the particle given by $C_\alpha = \tilde{C}_\alpha (\omega T_0)^\sigma$, we identify five different behaviors depending on ω for the characteristic tunneling exponent and the characteristic traversal time of tunneling. These behaviors correspond to the values of $\sigma < 1$, $\sigma = 1$, $1 < \sigma < 2$, $\sigma = 2$ and $\sigma > 2$. In the work of M. Ueda, Phys. Rev. B **54**, 8676 (1996), it was only considered the characteristic tunneling exponent in the case $\sigma = 1$.

In the case of an ohmic bath of oscillators at zero temperature, as well as in the case of a bath of oscillators with a single frequency, we obtain that the transmission spectrum of the particle is zero for a final characteristic energy of the particle greater than the initial characteristic energy. This result corrects the corresponding result in Ueda's work, which is not consistent from a physical point of view, allowing also for a more coherent derivation of the tunneling current between two metals separated by an insulating material at zero temperature. It is also obtained that the interaction of the particle with an ohmic bath of oscillators does not affect the characteristic traversal time of tunneling up to first order in that interaction.

Sumário

Lista de Figuras	xvii
Introdução	1
Capítulo 1 Cálculo Exato do Espectro de Transmissão	5
1.1 O sistema partícula - banho de osciladores	5
1.2 Definição do espectro de transmissão da partícula	8
1.3 Trajetória clássica e método do tempo complexo	9
1.4 Cálculo do espectro de transmissão	13
1.4.1 Banho de osciladores a $T > 0$	14
1.4.2 Banho de osciladores a $T = 0$: Caso dissipativo	20
Capítulo 2 Aproximações no Espectro de Transmissão	23
2.1 Trajetórias clássicas	23
2.2 Trajetórias clássicas especiais	25
2.3 Trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas	31
2.3.1 A ação efetiva da partícula	37
2.3.2 O expoente de tunelamento	40
2.3.3 Diferença entre a ação efetiva da partícula e o expoente de tunelamento	44
2.3.4 Solução das equações de movimento na região da barreira	45
2.4 Campo elétrico fraco e interação fraca da partícula com o banho de osciladores	50
2.4.1 Os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira e o método do tempo complexo	54
2.4.2 A taxa total de tunelamento	58
2.4.2.1 O tempo característico de travessia através da barreira	61
2.4.2.2 O expoente característico de tunelamento	64
Capítulo 3 Casos de um Banho de Osciladores com uma Única Frequência e Banho Ôhmico	65
3.1 Banho de osciladores com uma única frequência	65
3.1.1 Comportamento do expoente característico de tunelamento	66
3.1.2 Trajetórias clássicas reais e tempos complexos	78

3.1.3	Comportamento do tempo característico de travessia através da barreira	79
3.2	Banho ôhmico de osciladores	88
3.2.1	O expoente de tunelamento	94
3.2.2	Trajétórias clássicas reais e tempos complexos	95
3.2.3	A corrente de tunelamento	98
Conclusões	105
Referências	107

Lista de Figuras

Fig. 1.1	Barreira de potencial de altura U_0 e largura d na presença de um campo elétrico uniforme. Uma partícula representada por um pacote de ondas incide pelo lado esquerdo da barreira com uma energia característica $E < U_0$ e é transmitida via tunelamento ao outro lado da barreira com uma energia característica $E' < E$. p_i (p_f) é o valor médio do momento do pacote de ondas incidente (transmitido).	6
Fig. 1.2	Contornos na metade inferior do plano do tempo complexo τ para uma continuação analítica nessa região da amplitude de transição da partícula (1.16). (a) Contorno reto ou raio utilizado por Babbitt e Feldman nas Refs. 5 e 6. (b) Outro contorno arbitrário com parte imaginária não crescente quando percorrido desde 0 até τ pode ser utilizado de acordo com o trabalho de McLaughlin na Ref. 3.	11
Fig. 1.3	O contorno inicial de integração I sobre a parte positiva do eixo real na transformada de Fourier pode ser substituído por um contorno arbitrário II na metade inferior do plano complexo onde a amplitude de transição da partícula é analítica. A integração sobre o contorno II pode ser calculada numa aproximação de fase estacionária através da contribuição de um tempo de duração crítico $\bar{\tau}$	11
Fig. 2.1	Comportamento da função $D(x) = 1 - \frac{(1 - e^{-x})(3 - e^{-x})}{2x}$ para $x \geq 0$. Esta função determina a taxa total de tunelamento segundo a Eq. (2.92).	60
Fig. 2.2	Comportamento da função $\Delta(x) = D(x) - \frac{1}{2}(1 - e^{-x})^2$ para $x \geq 0$. Esta função determina o tempo característico de travessia através da barreira segundo a Eq. (2.98).	63
Fig. 3.1	Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = -1$, (b) $\sigma = -0.5$, (c) $\sigma = 0$ e (d) $\sigma = 0.5$	71
Fig. 3.2	Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) no caso $\sigma = 1$	72
Fig. 3.3	Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = 1.25$ e (b) $\sigma = 1.5$	73
Fig. 3.3	(Cont.) Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) no caso (c) $\sigma = 1.75$	74

Fig. 3.4	Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) no caso $\sigma = 2$	75
Fig. 3.5	Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = 2.5$ e (b) $\sigma = 3$	76
Fig. 3.6	Comportamentos típicos do expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) nos casos $\sigma = 1$ e $\sigma = 2$ e nas regiões $\sigma < 1$ (caracterizada através do caso $\sigma = 0$), $1 < \sigma < 2$ (caracterizada através do caso $\sigma = 1.5$) e $\sigma > 2$ (caracterizada através do caso $\sigma = 3$).	77
Fig. 3.7	Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = -1$ e (b) $\sigma = -0.5$	81
Fig. 3.7	(Cont.) Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos (c) $\sigma = 0$ e (d) $\sigma = 0.5$	82
Fig. 3.8	Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) no caso $\sigma = 1$	83
Fig. 3.9	Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = 1.25$, (b) $\sigma = 1.5$ e (c) $\sigma = 1.75$	84
Fig. 3.10	Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) no caso $\sigma = 2$	85
Fig. 3.11	Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = 2.5$ e (b) $\sigma = 3$	86
Fig. 3.12	Comportamentos típicos do tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos $\sigma = 1$ e $\sigma = 2$ e nas regiões $\sigma < 1$ (caracterizada através do caso $\sigma = 0$), $1 < \sigma < 2$ (caracterizada através do caso $\sigma = 1.5$) e $\sigma > 2$ (caracterizada através do caso $\sigma = 3$).	87

Introdução

Para descrever de maneira mais completa o tunelamento de uma partícula através de uma barreira de potencial podemos considerar o efeito, presente em situações reais, da interação da partícula com o ambiente. Entre os sistemas reais de interesse atual podemos citar¹ o transistor de um único elétron, junções Josephson utilizadas nas pesquisas sobre computação quântica e também os dispositivos supercondutores de interferência quântica (SQUID).

Dada a possibilidade da partícula perder ou absorver energia produto da interação com o ambiente, podemos ter uma energia característica E' da partícula no estado final diferente da energia característica E no estado inicial. Desse modo, dada a energia E , o tunelamento da partícula através de uma barreira é caracterizado pela probabilidade de transmissão para cada valor possível da energia final característica E' . Assim dizemos que existe um espectro de transmissão da partícula através da barreira.

No trabalho de M. Ueda, *Transmission Spectrum of a Tunneling Particle Interacting with Dynamical Fields: Real-Time Functional-Integral Approach*, Phys. Rev. B **54**, 8676 (1996), foi calculado o espectro de transmissão no caso do tunelamento de uma partícula em interação com o ambiente. No estudo dessa referência, porém, foram encontradas várias dificuldades. Assim, na Ref. 2, são introduzidos tempos não reais de travessia da partícula através da barreira no formalismo apresentado de tempo real. Esses valores complexos do tempo são obtidos no trabalho de Ueda² como consequência da condição de tunelamento $E < U_0$, onde U_0 é a altura da barreira de potencial, numa descrição do tunelamento da partícula através de trajetórias clássicas. Porém, nenhum argumento é dado na Ref. 2 para justificar a introdução desses valores não reais dos tempos de travessia através da barreira no formalismo apresentado de tempo real.

O problema da descrição do tunelamento de uma partícula sem interação com o ambiente por meio de uma trajetória clássica real, onde a coordenada toma valores somente reais, e o tempo toma valores no plano complexo, fora do eixo real, foi abordado nos trabalhos de D. W. McLaughlin, J. Math. Phys. **13**, 1099 (1972) e B. R. Holstein e A. R. Swift, Am. J. Phys. **50**, 833 (1982). No presente trabalho, baseando-nos nas ideias apresentadas nessas referências, propomos uma ampliação do formalismo de tempo real utilizado no trabalho de Ueda² para uma introdução mais natural de valores complexos do tempo na descrição do tunelamento de uma partícula em interação com o ambiente.

O procedimento seguido no trabalho de McLaughlin³, conhecido como método do tempo complexo, considera uma continuação analítica da amplitude de transição da partícula na metade inferior do plano do tempo complexo, sendo utilizada também a transformada de Fourier no tempo dessa amplitude^{3,4}. Esta transformada integral é calculada numa aproximação de fase estacionária através da contribuição

de um tempo crítico naquela região do plano complexo e dos valores próximos a ele. Adicionalmente, um contorno apropriado nessa mesma região é construído assumindo valores reais para a coordenada na trajetória clássica da partícula iguais às posições na região da barreira³. Desse modo, o tunelamento da partícula é descrito através de uma trajetória clássica real que evolui no tempo complexo.

No Capítulo 1 do presente trabalho, seguindo a Ref. 2, definimos o espectro de transmissão da partícula e representamos o ambiente através de um conjunto, ou banho térmico, de osciladores harmônicos caracterizado por uma função de densidade espectral $J(\omega)$. Em seguida, descrevemos o método do tempo complexo utilizado nos trabalhos de McLaughlin³ e Holstein e Swift⁴ no caso do tunelamento de uma partícula sem interação com o ambiente.

Considerando essa interação, aplicamos o método do tempo complexo escrevendo a amplitude de transição do sistema partícula - banho de osciladores do estado inicial para o estado final como a transformada inversa da transformada de Fourier no tempo da própria amplitude. Utilizando o método de Feynman de integrais de trajetória, integramos sobre as coordenadas dos osciladores do banho e obtemos uma expressão exata para o espectro de transmissão da partícula para uma temperatura do banho $T > 0$ em função da ação efetiva da partícula. Limitando-nos então ao caso mais simples $T = 0$, estudamos o caso de tunelamento dissipativo, no qual a partícula ao tunelar através da barreira perde energia produto da interação com o banho de osciladores. Nesse caso o banho de osciladores se encontra em seu estado de mínima energia possível podendo somente absorver energia da partícula.

No Capítulo 2 consideramos várias aproximações no espectro de transmissão da partícula. Primeiramente, considerando \hbar um parâmetro pequeno (limite semiclássico), aproximamos o espectro de transmissão através da contribuição das trajetórias clássicas e suas trajetórias vizinhas. Nesta aproximação consideramos a variação da ação efetiva da partícula para tempos dados de duração das trajetórias e substituímos assim o procedimento variacional seguido no trabalho de Ueda² onde não é considerada a variação nos tempos de travessia da partícula através da barreira. Definindo a ação total da partícula como a soma da ação efetiva da partícula e dos fatores de fase dos estados inicial e final da partícula e do método do tempo complexo, consideramos a variação dessa ação nos tempos de duração das trajetórias clássicas e também nas posições iniciais e finais dessas trajetórias. Este procedimento permite obter as equações de movimento das chamadas trajetórias clássicas especiais.

Diferentemente do trabalho de Ueda², utilizamos pacotes de ondas relativamente bem localizados para descrever os estados inicial e final da partícula. Em consequência, aproximamos o espectro de transmissão da partícula através de trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais e finais iguais ao valor médio da coordenada para esses pacotes de ondas. A ação total da partícula para estas trajetórias determina o espectro de transmissão, sendo chamada então de expoente de tunelamento. Seguindo o procedimento indicado, baseado no método do tempo complexo, obtemos o fator de acoplamento apropriado entre as duas trajetórias que descrevem a ação efetiva da partícula substituindo assim o procedimento de tipo *ad hoc* seguido com este fim na Ref. 2. Obtém-se também o termo da diferença entre a ação efetiva da partícula e o expoente de tunelamento, sendo que estas grandezas são tratadas como iguais no trabalho de Ueda².

Evitando a aplicação do método da transformada de Laplace para resolver as equações de movimento das trajetórias clássicas especiais, consideramos uma solução aproximada destas equações que inclui termos até primeira ordem num campo elétrico externo e na interação da partícula com o banho de osciladores. Seguindo o trabalho de Ueda² definimos a taxa total de tunelamento e obtemos expressões gerais para esta grandeza, o expoente de tunelamento, o espectro de transmissão e o tempo de travessia da partícula através da barreira, válidas para um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária.

No Capítulo 3 consideramos os casos de um banho de osciladores com uma única frequência e de um banho ôhmico. Um banho de osciladores com uma única frequência é descrito por uma função de densidade espectral $J(\omega') = \pi m \gamma \omega^3 \delta(\omega' - \omega)$ e um banho ôhmico de osciladores é caracterizado por uma função de densidade espectral $J(\omega) = m \eta \omega$. Seguindo o método do tempo complexo³, descrevemos o tunelamento da partícula em ambos casos através de trajetórias clássicas reais que evoluem no tempo complexo. No caso de um banho de osciladores com uma única frequência ω são identificados diferentes comportamentos em função de ω para o expoente característico de tunelamento e o tempo característico de travessia através da barreira. No caso de um banho ôhmico de osciladores a temperatura zero, assim como no caso de um banho de osciladores com uma única frequência, obtemos que o espectro de transmissão da partícula é zero para uma energia final característica da partícula maior que sua energia inicial. Este resultado permite obter de um modo coerente a corrente de tunelamento entre dois metais separados por um material isolante a temperatura zero.

Capítulo 1

Cálculo Exato do Espectro de Transmissão

1.1 O sistema partícula - banho de osciladores

Neste trabalho aplicaremos o método do tempo complexo^{3,4} ao cálculo do espectro de transmissão de uma partícula que tunela através de uma barreira de potencial enquanto interage com o ambiente, sendo este representado por um conjunto, ou banho térmico, de osciladores harmônicos. O sistema formado pela partícula e o banho de osciladores harmônicos é descrito pelo hamiltoniano

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) + \sum_{\alpha} \left\{ \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 [x_{\alpha} - f_{\alpha}(x)]^2 \right\}, \quad (1.1)$$

onde os dois primeiros termos correspondem à partícula, sendo \hat{p} o operador momento, m a massa e $V(x)$ a energia potencial. O somatório se estende sobre os osciladores do banho, sendo \hat{p}_{α} , m_{α} e ω_{α} o operador momento, a massa e a frequência de oscilação, respectivamente, do oscilador α . A energia potencial $V(x)$ inclui o efeito de uma barreira de potencial de largura d e altura U_0 (Fig. 1.1) e de um campo elétrico pequeno uniforme E_l aplicado na região da barreira. Caracterizando este campo pela diminuição U_1 na energia potencial da partícula ao passar do lado esquerdo ao lado direito da barreira, podemos escrever

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V(x) & 0 \leq x \leq d \\ 0 & x > d \end{cases}, \quad (1.2)$$

onde

$$V(x) = U_0 - U_1 \frac{x}{d}. \quad (1.3)$$

A diminuição U_1 na energia potencial da partícula corresponde ao trabalho realizado pela força elétrica na região da barreira. Para uma partícula com carga elétrica q temos $U_1 = |q|E_l d$.

A função $f_{\alpha}(x)$ no hamiltoniano (1.1) determina a interação entre a partícula e o oscilador α . Para esta função temos

$$f_{\alpha}(x) = \frac{C_{\alpha}}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} g(x), \quad (1.4)$$

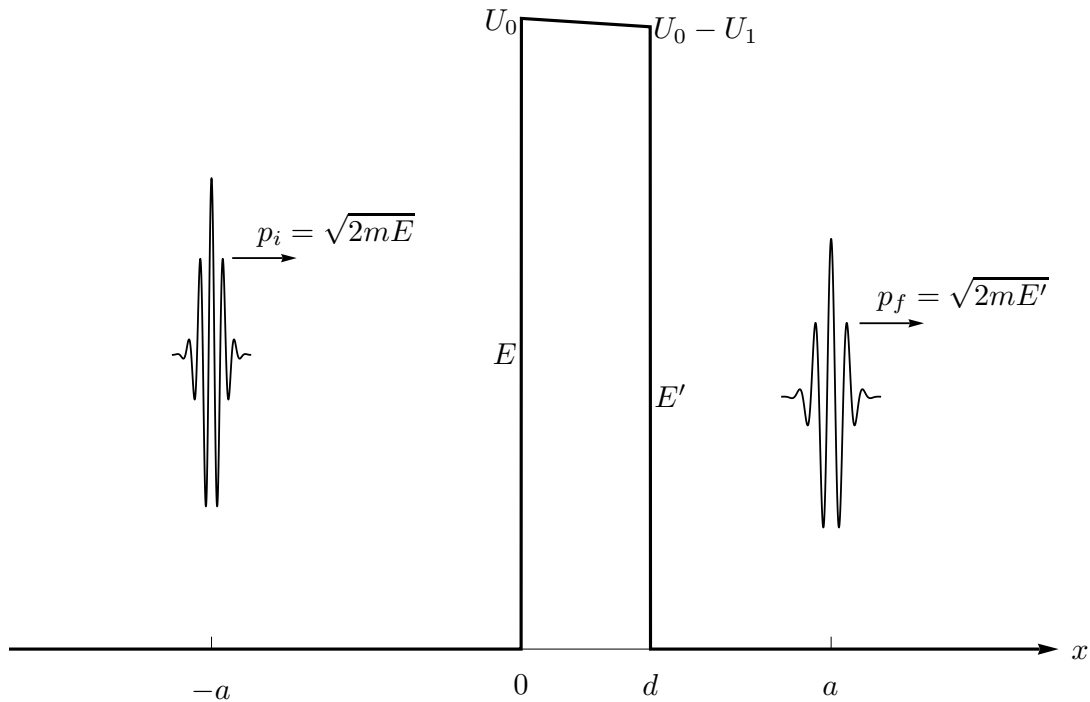


Fig. 1.1 Barreira de potencial de altura U_0 e largura d na presença de um campo elétrico uniforme. Uma partícula representada por um pacote de ondas incide pelo lado esquerdo da barreira com uma energia característica $E < U_0$ e é transmitida via tunelamento ao outro lado da barreira com uma energia característica $E' < E$. p_i (p_f) é o valor médio do momento do pacote de ondas incidente (transmitido).

onde C_α é uma constante que depende das propriedades do oscilador α (m_α, ω_α), enquanto $g(x)$ é uma função que depende da coordenada x da partícula na forma

$$g(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ x & 0 \leq x \leq d \\ d & x \geq d \end{cases} \quad (1.5)$$

A interação entre a partícula e o banho de osciladores pode ser representada de maneira mais explícita no hamiltoniano (1.1) se escrevemos este na forma

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \mathcal{V}(x) + \sum_{\alpha} \left(\frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2 \right) - \sum_{\alpha} F_{\alpha}(x) x_{\alpha}, \quad (1.6)$$

onde

$$\mathcal{V}(x) = V(x) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 f_{\alpha}^2(x), \quad (1.7)$$

e

$$F_{\alpha}(x) = C_{\alpha} g(x). \quad (1.8)$$

O último termo da Eq. (1.6) representa a interação entre a partícula e o banho de osciladores. De acordo com as Eqs. (1.8) e (1.5), a partícula interage com o banho de osciladores somente na região da barreira, ou seja, quando $0 < x < d$ (Fig. 1.1). Para $x > d$, a função $g(x)$ é diferente de zero mas não depende da coordenada da partícula. Na região da barreira, $g(x) = x$ e C_α atua então como constante de acoplamento entre a coordenada da partícula e a coordenada do oscilador α .

Para calcular o espectro de transmissão são consideradas as transições entre estados em que a partícula e o banho de osciladores não interagem. Para isso, representamos a partícula nos estados inicial e final através de pacotes de ondas gaussianos centrados em posições onde não há interação entre a partícula e o banho de osciladores. Considerando uma dispersão relativamente pequena na coordenada dos pacotes de ondas inicial e final, a interação com o banho de osciladores nesses estados da partícula pode ser desprezada.

O estado da partícula no instante inicial $t_i \rightarrow -\infty$ é descrito por um pacote de ondas da forma

$$\langle X_i | E \rangle = \frac{1}{(\pi \Delta_i^2)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} p_i (X_i + a)} e^{-\frac{(X_i + a)^2}{2\Delta_i^2}}, \quad (1.9)$$

onde a energia E determina o valor médio do momento deste pacote, dado por

$$\langle \hat{p} \rangle_i = p_i = \sqrt{2mE}. \quad (1.10)$$

Este pacote de ondas está centrado em $X_i = -a < 0$ e representa a partícula incidindo pelo lado esquerdo da barreira (Fig. 1.1). O parâmetro Δ_i na Eq. (1.9), determina as dispersões na coordenada e o momento do pacote de ondas incidente, sendo estas dadas por $\Delta X_i = \frac{\Delta_i}{\sqrt{2}}$ e $\Delta p_i = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\Delta_i}$, respectivamente. Uma dispersão relativamente pequena na coordenada corresponde ao caso $\Delta_i \ll a$. Para ter o valor da energia da partícula relativamente bem definido através do valor E , precisamos ter uma dispersão relativamente pequena no momento do pacote de ondas, ou seja, $\Delta p_i \ll p_i$, e portanto, $\Delta_i \gg \frac{\hbar}{p_i}$.

O estado da partícula no instante final $t_f \rightarrow +\infty$, de maneira análoga ao estado no instante inicial, é descrito por um pacote de ondas gaussiano da forma

$$\langle X_f | E' \rangle = \frac{1}{(\pi \Delta_f^2)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} p_f (X_f - a)} e^{-\frac{(X_f - a)^2}{2\Delta_f^2}}, \quad (1.11)$$

onde a energia E' determina o valor médio do momento deste pacote, dado por

$$\langle \hat{p} \rangle_f = p_f = \sqrt{2mE'}. \quad (1.12)$$

Este pacote de ondas está centrado em $X_f = a \gg d$ e corresponde à partícula uma vez transmitida através da barreira (Fig. 1.1). O parâmetro Δ_f na Eq. (1.11) determina as dispersões na coordenada

e o momento do pacote de ondas transmitido, sendo estas dadas por $\Delta X_f = \frac{\Delta_f}{\sqrt{2}}$ e $\Delta p_f = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\Delta_f}$, respectivamente. Dispersões relativamente pequenas na coordenada e o momento deste pacote de ondas correspondem aos casos $\Delta_f \ll a$ e $\Delta_f \gg \frac{\hbar}{p_f}$.

No caso do banho de osciladores, o estado inicial (final) é representado por $\prod_{\alpha} |n_{\alpha}^{i(f)}\rangle$, onde $n_{\alpha}^{i(f)}$ é o número de excitação do oscilador α no instante inicial (final), sendo $n_{\alpha}^{i(f)} = 0, 1, 2, \dots$. A energia inicial (final) do banho de osciladores é dada por

$$\epsilon_b^{i(f)} = \sum_{\alpha} \hbar\omega_{\alpha} \left(n_{\alpha}^{i(f)} + \frac{1}{2} \right). \quad (1.13)$$

O banho de osciladores tem uma certa probabilidade de encontrar-se num determinado estado inicial a uma temperatura T . Dado o conjunto ou configuração $\{n_{\alpha}^i\}$ de números iniciais de excitação, podemos escrever esta probabilidade como

$$P(\{n_{\alpha}^i\}) = \frac{e^{-\beta \sum_{\alpha} \hbar\omega_{\alpha} \left(n_{\alpha}^i + \frac{1}{2} \right)}}{\sum_{\{n_{\alpha}^i\}} e^{-\beta \sum_{\alpha} \hbar\omega_{\alpha} \left(n_{\alpha}^i + \frac{1}{2} \right)}}, \quad (1.14)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, sendo k_B a constante de Boltzmann. O somatório no denominador se estende sobre todos os conjuntos ou configurações $\{n_{\alpha}^i\}$ de números iniciais de excitação.

1.2 Definição do espectro de transmissão da partícula

O espectro de transmissão — que chamaremos de $\Gamma(E, E')$ — caracteriza a probabilidade de transição da partícula do estado descrito pelo pacote de ondas incidente (1.9), com uma energia característica E , para o estado descrito pelo pacote de ondas transmitido (1.11), com uma energia característica E' . Na presença do banho de osciladores consideramos a probabilidade de transição do sistema partícula - banho de osciladores do estado inicial representado por $|E\rangle \prod_{\alpha} |n_{\alpha}^i\rangle$ para o estado final representado por $|E'\rangle \prod_{\alpha} |n_{\alpha}^f\rangle$, sendo que em ambos estados, a partícula não interage com o banho de osciladores.

A evolução do sistema partícula - banho de osciladores se realiza através de seu hamiltoniano H , dado pelas Eqs. (1.1) e (1.6). Seguindo o trabalho de Ueda², definimos o espectro de transmissão da partícula

na forma

$$\Gamma(E, E') = \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \sum_{\{n_\alpha^i\}, \{n_\alpha^f\}} P(\{n_\alpha^i\}) \delta \left[E - E' - (\epsilon_b^f - \epsilon_b^i) \right] \\ \times \left| \prod_{\alpha} \langle n_\alpha^f | \langle E' | e^{-\frac{i}{\hbar} H (t_f - t_i)} | E \rangle \prod_{\alpha} | n_\alpha^i \rangle \right|^2. \quad (1.15)$$

Assim, para obter o espectro de transmissão $\Gamma(E, E')$, que depende das energias E e E' que caracterizam a partícula, somamos sobre todas as configurações iniciais e finais de números de excitação do banho de osciladores. Os termos da soma nas configurações iniciais são ponderados pela probabilidade de ocorrência de cada configuração, $P(\{n_\alpha^i\})$, dada pela Eq. (1.14). A função delta de Dirac na Eq. (1.15) impõe a condição de conservação de energia no sistema partícula - banho de osciladores. Somente os estados inicial e final do banho de osciladores que satisfazem a condição $\epsilon_b^f - \epsilon_b^i = E - E'$, onde $\epsilon_b^{i(f)}$ é a energia inicial (final) do banho de osciladores (Eq. (1.13)), têm contribuição no espectro de transmissão da partícula.

1.3 Trajetória clássica e método do tempo complexo

A transição do sistema partícula - banho de osciladores do estado inicial $|E\rangle \prod_{\alpha} |n_{\alpha}^i\rangle$ para o estado final $\langle E' | \prod_{\alpha} \langle n_{\alpha}^f |$ pode ser descrita através de transições entre estados intermediários arbitrários. Tomando estes últimos como os autoestados de posição da partícula e dos osciladores e introduzindo a representação de coordenadas para os estados inicial e final podemos descrever essa transição por meio de infinitos caminhos ou trajetórias. É possível calcular de maneira exata a contribuição de todas as trajetórias possíveis para o banho de osciladores harmônicos. Para a partícula, em geral, o cálculo pode ser feito somente de maneira aproximada. Nesse caso, considerando \hbar um parâmetro pequeno (limite semiclassico), podemos aproximar o cálculo através da contribuição da chamada trajetória clássica e suas trajetórias vizinhas. A trajetória clássica é determinada por um valor nulo da variação de primeira ordem da ação da partícula. Esta é uma aproximação de fase estacionária, onde a fase é dada pela ação da partícula em unidades de \hbar .

Como indicamos anteriormente, neste trabalho consideraremos o caso em que a partícula tunela através da barreira, ou seja, temos $E < U_0$ (Fig. 1.1). Neste caso, uma trajetória clássica real, que descreve a evolução temporal da coordenada da partícula tomando estes valores sobre o eixo real, requer que o tempo seja um parâmetro que toma valores no plano complexo, fora do eixo real. O problema da descrição do tunelamento de uma partícula por meio de uma trajetória clássica real que evolui no tempo complexo foi abordado por McLaughlin³ utilizando uma continuação analítica no tempo para a amplitude de transição da partícula proposta por Babbitt⁵ e Feldman⁶.

Nos trabalhos recém mencionados^{3,5,6} foi considerado o caso de uma partícula sem interação com o

ambiente descrita pelo hamiltoniano $\mathcal{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$, e foi analisada a expressão para a amplitude de transição da partícula entre duas posições reais x' e x , num tempo real $\tau > 0$, dada por

$$\langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\tau} | x' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^n \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (\tau_j - \tau_{j-1})} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_{n-1} \times e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \left[\frac{m (x_j - x_{j-1})^2}{2 \tau_j - \tau_{j-1}} - U(x_j) (\tau_j - \tau_{j-1}) \right]} \quad (1.16)$$

Esta expressão corresponde a uma partição do intervalo de tempo de 0 a τ em n partes de comprimento $\tau_j - \tau_{j-1}$, com $j = 1, 2, \dots, n$, $\tau_0 = 0$ e $\tau_n = \tau$. Aos instantes de tempo nessa partição dados por $\tau_0, \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$ correspondem valores da coordenada dados por $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, sendo $x_0 = x'$ e $x_n = x$. A expressão (1.16) pode ser obtida através do método de Feynman⁷ escrevendo o operador de evolução temporal $e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\tau}$ como o produto de n fatores $e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(\tau_j - \tau_{j-1})}$ entre os quais são colocados os operadores identidade $\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_j |x_j\rangle \langle x_j|$, para $j = 1, 2, \dots, n-1$. Desta forma, a transição da partícula da posição x' para a posição x é descrita por meio de infinitos processos de transições sucessivas da forma $x' \rightarrow x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \dots \rightarrow x_{n-1} \rightarrow x$. A amplitude de transição $\langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\tau} | x' \rangle$ é expressa como a soma (integral) das amplitudes de transição destes processos, sendo estas dadas pelo produto das amplitudes $\langle x_j | e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(\tau_j - \tau_{j-1})} | x_{j-1} \rangle$, com $j = 1, 2, \dots, n$.

McLaughlin³ considerou a extensão proposta por Babbitt⁵ e Feldman⁶ do domínio de definição no tempo τ da expressão (1.16) a valores deste parâmetro na metade inferior do plano complexo. Para valores de τ nessa região, com $U(x)$ integrável segundo Riemann⁶ e limitado inferiormente^{5,6}, a convergência da integração sobre as variáveis x_1, x_2, \dots, x_{n-1} na Eq. (1.16) é garantida³ pelo termo gaussiano $\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \frac{m (x_j - x_{j-1})^2}{2 \tau_j - \tau_{j-1}}$. Nesta continuação analítica, de maneira similar ao caso em que τ é real, o tempo toma valores ao longo de um contorno reto ou raio que vai desde 0 até um tempo τ na metade inferior do plano complexo (Fig. 1.2 (a)). Porém, McLaughlin³ observou que quando os valores do tempo são restritos a esse contorno, a coordenada na trajetória clássica da partícula entre as posições extremas x' e x não toma sempre valores reais, o que pode ser visto no caso de um potencial linear. McLaughlin³ demonstrou então que o valor da amplitude de transição (1.16) não muda se substituirmos esse contorno reto no plano do tempo complexo por um outro contorno qualquer com parte imaginária não crescente, quando percorrido desde 0 até τ (Fig. 1.2 (b)). Um contorno com essa característica pode ser então construído impondo que a coordenada na trajetória clássica da partícula tome valores somente reais, iguais às posições na região da barreira. Assim, o tunelamento da partícula é descrito através de uma

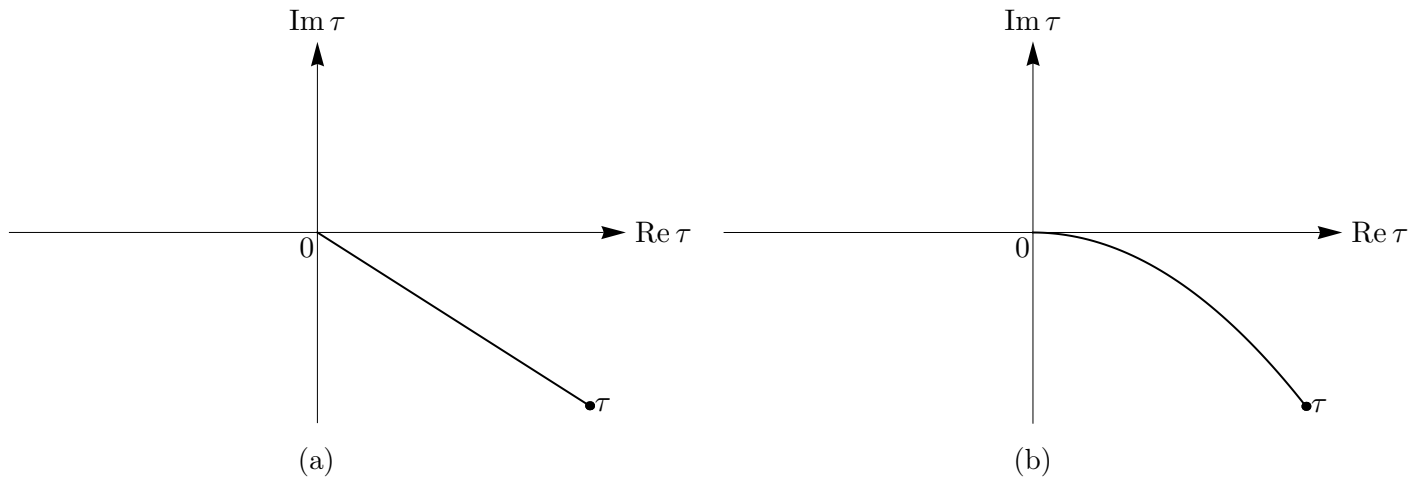


Fig. 1.2 Contornos na metade inferior do plano do tempo complexo τ para uma continuação analítica nessa região da amplitude de transição da partícula (1.16). (a) Contorno reto ou raio utilizado por Babbitt e Feldman nas Refs. 5 e 6. (b) Outro contorno arbitrário com parte imaginária não crescente quando percorrido desde 0 até τ pode ser utilizado de acordo com o trabalho de McLaughlin na Ref. 3.

trajetória clássica onde a coordenada toma valores somente reais e o tempo toma valores ao longo de um contorno na metade inferior do plano complexo.

Seguindo o trabalho de Holstein e Swift⁴, a amplitude de transição da partícula $\langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \tau} | x' \rangle$ pode ser expressa como a transformada inversa da transformada de Fourier no tempo $\tau > 0$ da própria amplitude de transição. Nesta última transformada integral, o contorno inicial de integração sobre a parte positiva do eixo real (Fig. 1.3) pode ser substituído por um contorno arbitrário na metade inferior do plano complexo, onde a amplitude de transição da partícula é analítica^{3,5,6}. Cada valor do tempo nesse outro contorno define um tempo de duração complexo para as infinitas trajetórias que descrevem a transição da partícula da posição x' para a posição x . Para cada tempo de duração dado, a amplitude de transição

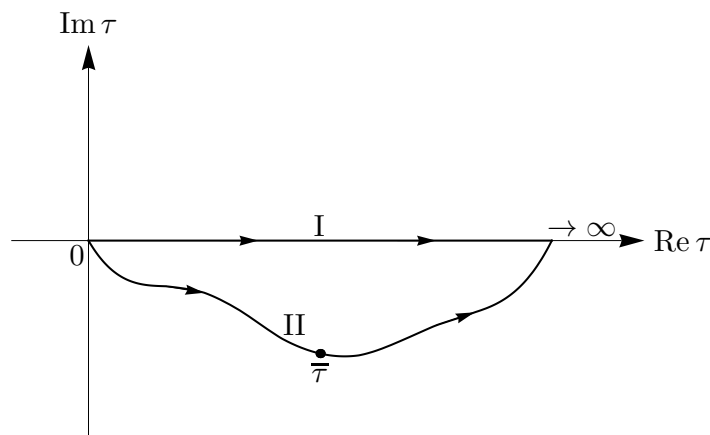


Fig. 1.3 O contorno inicial de integração I sobre a parte positiva do eixo real na transformada de Fourier pode ser substituído por um contorno arbitrário II na metade inferior do plano complexo onde a amplitude de transição da partícula é analítica. A integração sobre o contorno II pode ser calculada numa aproximação de fase estacionária através da contribuição de um tempo de duração crítico $\bar{\tau}$.

pode ser aproximada através da contribuição da trajetória clássica e suas trajetórias vizinhas.

A transformada de Fourier no tempo sobre um contorno na metade inferior do plano complexo pode ser calculada numa aproximação de fase estacionária através da contribuição de um tempo de duração crítico $\bar{\tau}$ e dos valores próximos a ele (Fig. 1.3). A este tempo de duração crítico corresponde uma trajetória clássica em particular para a qual o tempo toma valores complexos sobre um contorno que vai desde 0 até $\bar{\tau}$. De acordo com McLaughlin³, esse contorno pode ser construído assumindo valores reais para a coordenada na trajetória clássica da partícula iguais às posições na região da barreira.

O procedimento indicado, que permite descrever o tunelamento da partícula através de uma trajetória clássica real que evolui no tempo complexo, é chamado de método do tempo complexo. De acordo com o explicado anteriormente podemos dividir este método nas seguintes etapas. Primeiramente, a amplitude de transição da partícula é expressa como a transformada inversa da transformada de Fourier no tempo τ da própria amplitude de transição. Esta última transformada, considerando que a amplitude de transição da partícula é analítica na metade inferior do plano do tempo complexo τ , é calculada então numa aproximação de fase estacionária através da contribuição de um tempo de duração crítico $\bar{\tau}$ nessa região do plano complexo e dos valores próximos a ele. Finalmente, um contorno com parte imaginária não crescente quando percorrido desde 0 até $\bar{\tau}$ é construído assumindo valores reais para a coordenada na trajetória clássica da partícula iguais às posições na região da barreira.

No presente trabalho nos propusemos aplicar o método do tempo complexo ao cálculo do espectro de transmissão por tunelamento de uma partícula em interação com o ambiente. Como indicamos, nos trabalhos antes mencionados^{3,4} o método do tempo complexo foi aplicado ao caso do tunelamento de uma partícula sem interação com o ambiente. O cálculo do espectro de transmissão por tunelamento de uma partícula em interação com o ambiente foi abordado no trabalho de Ueda² mas sem a utilização do método do tempo complexo. Nesse trabalho, valores complexos do tempo são obtidos como consequência da condição de tunelamento $E < U_0$ mas nenhum argumento é dado para justificar a introdução desses valores não reais no formalismo apresentado de tempo real².

O método do tempo complexo, além de permitir a introdução de valores complexos do tempo para descrever o tunelamento por meio de uma trajetória clássica real, permite obter também a ação efetiva da partícula (subseção 2.3.1) contendo fatores que são introduzidos de maneira *ad hoc* na Ref. 2. Também, através deste método, podemos obter o termo da diferença entre a ação efetiva da partícula e o expoente de tunelamento (subseção 2.3.3). Estas duas grandezas não são distinguidas entre si no trabalho de Ueda², sendo representadas da mesma forma e obtendo-se o expoente de tunelamento, segundo a Ref. 2, simplificando a ação efetiva da partícula. Pode ser concluído que na verdade o termo da diferença entre ambas grandezas foi introduzido no trabalho de Ueda² mas nenhuma explicação é dada nesse trabalho com respeito à origem desse termo.

Baseando-nos nas ideias apresentadas nas Refs. 3 e 4, onde é utilizada a transformada de Fourier da amplitude de transição da partícula de um estado inicial para um estado final, começamos a aplicar o método do tempo complexo expressando a amplitude de transição do sistema partícula - banho de oscila-

dores do estado inicial $|E\rangle \prod_{\alpha} |n_{\alpha}^i\rangle$ para o estado final $|E'\rangle \prod_{\alpha} |n_{\alpha}^f\rangle$, na Eq. (1.15), como a transformada inversa da transformada de Fourier no tempo da própria amplitude, ou seja,

$$\begin{aligned} & \prod_{\alpha} \langle n_{\alpha}^f | \langle E' | e^{-\frac{i}{\hbar} H (t_f - t_i)} | E \rangle \prod_{\alpha} |n_{\alpha}^i\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 (t_f - t_i)} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} dT_1 e^{\frac{i}{\hbar} (E_1 + i\delta) T_1} \prod_{\alpha} \langle n_{\alpha}^f | \langle E' | e^{-\frac{i}{\hbar} H T_1} | E \rangle \prod_{\alpha} |n_{\alpha}^i\rangle . \end{aligned} \quad (1.17)$$

Uma expressão similar pode ser escrita para a conjugada desta amplitude de transição. O uso destas expressões diferencia o procedimento seguido no presente trabalho daquele seguido no trabalho de Ueda².

Utilizando a expressão (1.17) para a amplitude de transição do sistema partícula - banho de osciladores e a expressão correspondente para a conjugada dessa amplitude, e escrevendo também a delta de Dirac na Eq. (1.15) na forma

$$\delta \left[E - E' - (\epsilon_b^f - \epsilon_b^i) \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (E - E') t} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_b^f t} e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon_b^i t} , \quad (1.18)$$

podemos obter

$$\begin{aligned} \Gamma(E, E') &= \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 (t_f - t_i)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} E_2 (t_f - t_i)} \\ &\quad \times \int_0^{\infty} dT_1 e^{\frac{i}{\hbar} (E_1 + i\delta) T_1} \int_0^{\infty} dT_2 e^{-\frac{i}{\hbar} (E_2 - i\delta) T_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (E - E') t} \\ &\quad \times \sum_{\{n_{\alpha}^i\}, \{n_{\alpha}^f\}} P(\{n_{\alpha}^i\}) e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon_b^i t} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_b^f t} \prod_{\alpha} \langle n_{\alpha}^f | \langle E' | e^{-\frac{i}{\hbar} H T_1} | E \rangle \prod_{\alpha} |n_{\alpha}^i\rangle \\ &\quad \times \prod_{\alpha} \langle n_{\alpha}^i | \langle E | e^{\frac{i}{\hbar} H T_2} | E' \rangle \prod_{\alpha} |n_{\alpha}^f\rangle . \end{aligned} \quad (1.19)$$

1.4 Cálculo do espectro de transmissão

Neste trabalho consideramos o caso de tunelamento dissipativo, no qual a partícula ao tunelar através da barreira perde energia produto da interação com o banho de osciladores, ou seja, temos $E' < E$. Para isso, estudaremos o caso do banho de osciladores a uma temperatura $T = 0$. Nesse caso (Eq. (1.14) para $\beta \rightarrow \infty$) o banho de osciladores se encontra em seu estado de mínima energia possível podendo somente

absorver energia da partícula.

Dividiremos o cálculo do espectro de transmissão em dois casos. No primeiro trataremos o caso mais geral em que o banho de osciladores se encontra a uma temperatura $T > 0$ e no segundo trataremos o caso do banho de osciladores a uma temperatura $T = 0$.

1.4.1 Banho de osciladores a $T > 0$

O cálculo exato do espectro de transmissão resulta num processo um tanto trabalhoso do qual indicaremos somente as principais etapas.

Primeiramente, efetuando as somas sobre as configurações iniciais e finais do banho de osciladores, podemos obter para as duas últimas linhas da Eq. (1.19),

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\{n_\alpha^i\}, \{n_\alpha^f\}} P(\{n_\alpha^i\}) e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon_b^i t} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_b^f t} \prod_\alpha \langle n_\alpha^f | \langle E' | e^{-\frac{i}{\hbar} H T_1} | E \rangle \prod_\alpha | n_\alpha^i \rangle \\
 & \quad \times \prod_\alpha \langle n_\alpha^i | \langle E | e^{\frac{i}{\hbar} H T_2} | E' \rangle \prod_\alpha | n_\alpha^f \rangle \\
 & = \prod_\alpha 2 \sinh \frac{\beta \hbar \omega_\alpha}{2} \prod_\alpha \int_{-\infty}^{\infty} dx_\alpha^i dx_\alpha^f dy_\alpha^i dy_\alpha^f \prod_\alpha \langle x_\alpha^f | \langle E' | e^{-\frac{i}{\hbar} H T_1} | E \rangle \prod_\alpha | x_\alpha^i \rangle \\
 & \quad \times \prod_\alpha \langle x_\alpha^i | e^{(-\beta + it/\hbar) h_{osc}^\alpha} | y_\alpha^i \rangle \\
 & \quad \times \prod_\alpha \langle y_\alpha^i | \langle E | e^{\frac{i}{\hbar} H T_2} | E' \rangle \prod_\alpha | y_\alpha^f \rangle \prod_\alpha \langle y_\alpha^f | e^{-\frac{i}{\hbar} h_{osc}^\alpha t} | x_\alpha^f \rangle,
 \end{aligned} \tag{1.20}$$

onde h_{osc}^α é o hamiltoniano do oscilador harmônico α e introduzimos a representação de coordenadas para os osciladores do banho. O fator $\langle y_\alpha^f | e^{-\frac{i}{\hbar} h_{osc}^\alpha t} | x_\alpha^f \rangle$ é o propagador de um oscilador harmônico que tem uma expressão conhecida⁸ dada por

$$\langle y_\alpha^f | e^{-\frac{i}{\hbar} h_{osc}^\alpha t} | x_\alpha^f \rangle = \left(\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2\pi i \hbar \sin \omega_\alpha t} \right)^{1/2} e^{-\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2i\hbar \sin \omega_\alpha t} \left[(x_\alpha^{f2} + y_\alpha^{f2}) \cos \omega_\alpha t - 2x_\alpha^f y_\alpha^f \right]}, \tag{1.21}$$

e uma expressão similar pode ser escrita para o fator $\langle x_\alpha^i | e^{(-\beta + it/\hbar) h_{osc}^\alpha} | y_\alpha^i \rangle$ na Eq. (1.20), substituindo t por $-t - i\beta\hbar$ na Eq. (1.21). Com ajuda destas expressões podemos obter para o espectro de transmissão (1.19),

$$\Gamma(E, E') = \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi \hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (E - E') t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi \hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 (t_f - t_i)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi \hbar} e^{\frac{i}{\hbar} E_2 (t_f - t_i)}$$

$$\begin{aligned}
& \times \int_0^\infty dT_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 + i\delta)T_1} \int_0^\infty dT_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - i\delta)T_2} \\
& \times \int_{-\infty}^\infty dX_i dX_f dY_i dY_f \langle E'|X_f\rangle \langle X_i|E\rangle \langle E|Y_i\rangle \langle Y_f|E'\rangle \\
& \times \prod_\alpha 2 \sinh \frac{\beta\hbar\omega_\alpha}{2} \left(\frac{m_\alpha\omega_\alpha}{2\pi i\hbar \sin \omega_\alpha t} \right)^{1/2} \left[\frac{m_\alpha\omega_\alpha}{-2\pi i\hbar \sin \omega_\alpha (t + i\beta\hbar)} \right]^{1/2} \\
& \times \prod_\alpha \int_{-\infty}^\infty dx_\alpha^i dx_\alpha^f dy_\alpha^i dy_\alpha^f \exp -\frac{m_\alpha\omega_\alpha}{2i\hbar \sin \omega_\alpha t} \left[(x_\alpha^f)^2 + (y_\alpha^f)^2 \right] \cos \omega_\alpha t - 2x_\alpha^f y_\alpha^f \\
& \quad \times \exp \frac{m_\alpha\omega_\alpha}{2i\hbar \sin \omega_\alpha (t + i\beta\hbar)} \left[(x_\alpha^i)^2 + (y_\alpha^i)^2 \right] \cos \omega_\alpha (t + i\beta\hbar) - 2x_\alpha^i y_\alpha^i \\
& \quad \times \prod_\alpha \langle x_\alpha^f | \langle X_f | e^{-\frac{i}{\hbar}HT_1} | X_i \rangle \prod_\alpha |x_\alpha^i\rangle \prod_\alpha \langle y_\alpha^i | \langle Y_i | e^{\frac{i}{\hbar}HT_2} | Y_f \rangle \prod_\alpha |y_\alpha^f\rangle,
\end{aligned} \tag{1.22}$$

onde introduzimos a representação de coordenadas para a partícula.

Na Eq. (1.22) podemos obter para as amplitudes de transição $\prod_\alpha \langle x_\alpha^f | \langle X_f | e^{-\frac{i}{\hbar}HT_1} | X_i \rangle \prod_\alpha |x_\alpha^i\rangle$ e $\prod_\alpha \langle y_\alpha^i | \langle Y_i | e^{\frac{i}{\hbar}HT_2} | Y_f \rangle \prod_\alpha |y_\alpha^f\rangle$ expressões similares à Eq. (1.16). Seguindo o método de Feynman⁷ utilizado para derivar esta última equação e empregando o hamiltoniano (1.6) do sistema partícula - banho de osciladores, obtemos

$$\begin{aligned}
& \prod_\alpha \langle x_\alpha^f | \langle X_f | e^{-\frac{i}{\hbar}HT_1} | X_i \rangle \prod_\alpha |x_\alpha^i\rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^n \left[\frac{m}{2\pi i\hbar (T_{1j} - T_{1j-1})} \right]^{1/2} \\
& \quad \times \int_{-\infty}^\infty \cdots \int_{-\infty}^\infty dx_1 \cdots dx_{n-1} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \left[\frac{m(x_j - x_{j-1})^2}{2(T_{1j} - T_{1j-1})} - \mathcal{V}(x_j)(T_{1j} - T_{1j-1}) \right]} \\
& \quad \times \prod_\alpha \prod_{j=1}^n \left[\frac{m_\alpha}{2\pi i\hbar (T_{1j} - T_{1j-1})} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^\infty \cdots \int_{-\infty}^\infty dx_\alpha^1 \cdots dx_\alpha^{n-1} \\
& \quad \times e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \left[\frac{m_\alpha(x_\alpha^j - x_\alpha^{j-1})^2}{2(T_{1j} - T_{1j-1})} - \frac{1}{2}m_\alpha\omega_\alpha^2 x_\alpha^{j2} (T_{1j} - T_{1j-1}) + F_\alpha(x_j) x_\alpha^j (T_{1j} - T_{1j-1}) \right]},
\end{aligned} \tag{1.23}$$

onde $T_{10} = 0$, $T_{1n} = T_1$, $x_0 = X_i$, $x_n = X_f$, $x_\alpha^0 = x_\alpha^i$ e $x_\alpha^n = x_\alpha^f$. As primeiras duas linhas desta

expressão são semelhantes à Eq. (1.16) que corresponde ao caso de uma partícula sem interação com o ambiente. As duas linhas seguintes da Eq. (1.23) são resultado da presença do banho de osciladores harmônicos que representa o ambiente em interação com a partícula.

Como foi indicado na seção 1.3, para descrever o tunelamento de uma partícula sem interação com o ambiente no trabalho de McLaughlin³ foi utilizada uma continuação analítica da amplitude de transição da partícula (1.16) para valores do tempo τ na metade inferior do plano complexo. No presente trabalho, onde estudamos o caso do tunelamento de uma partícula em interação com o ambiente, assumimos que o domínio de definição no tempo T_1 da amplitude de transição (1.23) para o sistema partícula - banho de osciladores pode ser também estendido a valores de T_1 na metade inferior do plano complexo. Esta extensão é sugerida pela semelhança indicada entre as Eqs. (1.16) e (1.23) e a presença na Eq. (1.23) de termos gaussianos para a partícula e os osciladores do banho que são similares ao termo gaussiano $\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n \frac{m}{2} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\tau_j - \tau_{j-1}}$, na Eq. (1.16). Como indicamos na seção 1.3, este termo garante a convergência da integração sobre as variáveis x_1, x_2, \dots, x_{n-1} na Eq. (1.16) para valores de τ na metade inferior do plano complexo no caso de um potencial $U(x)$ integrável segundo Riemann e limitado inferiormente.

Na última linha da Eq. (1.23), de acordo com o hamiltoniano (1.6), temos termos que correspondem a um potencial para cada oscilador α da forma $\frac{1}{2}m_\alpha\omega_\alpha^2x_\alpha^2 - F_\alpha(x)x_\alpha$. Este potencial, com $-\infty < x_\alpha < \infty$ e $F_\alpha(x)$ dado pela Eq. (1.8), não é limitado inferiormente por causa do termo $-F_\alpha(x)x_\alpha$. A condição de que o potencial $U(x)$ na representação (1.16) da amplitude de transição da partícula seja limitado inferiormente foi utilizada nos trabalhos de Babbitt⁵ e Feldman⁶ para provar a validade dessa representação para valores de τ na metade inferior do plano complexo³. No entanto, de acordo com a referência 15 do trabalho de McLaughlin³, essa representação é ainda válida no caso de um potencial linear, não limitado inferiormente. Este é o caso do termo $-F_\alpha(x)x_\alpha$ no potencial dos osciladores do banho na Eq. (1.23), sendo este termo linear na coordenada x_α . Assim, a presença deste termo não invalida a possibilidade de estender o domínio de definição no tempo T_1 da amplitude de transição (1.23) a valores deste parâmetro na metade inferior do plano complexo.

No caso da amplitude de transição $\prod_{\alpha} \langle y_{\alpha}^i | \langle Y_i | e^{\frac{i}{\hbar}HT_2} | Y_f \rangle \prod_{\alpha} | y_{\alpha}^f \rangle$, presente também na Eq. (1.22), uma expressão similar à Eq. (1.23) pode ser derivada, sendo que o sinal dos termos gaussianos resultantes é o oposto do sinal desses termos na Eq. (1.23). Desse modo, no caso da amplitude de transição $\prod_{\alpha} \langle y_{\alpha}^i | \langle Y_i | e^{\frac{i}{\hbar}HT_2} | Y_f \rangle \prod_{\alpha} | y_{\alpha}^f \rangle$, assumimos que o domínio de definição no tempo T_2 pode ser estendido a valores deste parâmetro na metade superior do plano complexo.

A integração sobre as variáveis x_1, x_2, \dots, x_{n-1} na Eq. (1.23), mantendo fixas as posições extremas $x_0 = X_i$ e $x_n = X_f$, define uma integral sobre todas as trajetórias $x(t')$ da partícula que satisfazem as condições de contorno $x(0) = X_i$ e $x(T_1) = X_f$. Analogamente, a integração sobre as variáveis $x_{\alpha}^1, x_{\alpha}^2, \dots, x_{\alpha}^{n-1}$ na Eq. (1.23), mantendo fixas as posições extremas $x_{\alpha}^0 = x_{\alpha}^i$ e $x_{\alpha}^n = x_{\alpha}^f$, define uma integral

sobre todas as trajetórias $x_\alpha(t')$ do oscilador α que cumprem as condições de contorno $x_\alpha(0) = x_\alpha^i$ e $x_\alpha(T_1) = x_\alpha^f$. Numa notação⁷ mais compacta escrevemos então a Eq. (1.23) na forma

$$\begin{aligned} \prod_\alpha \langle x_\alpha^f | \langle X_f | e^{-\frac{i}{\hbar}HT_1} | X_i \rangle \prod_\alpha | x_\alpha^i \rangle &= \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^{T_1} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}(t_1)^2 - \mathcal{V}[x(t_1)] \right\} \\ &\times \prod_\alpha \int_{x_\alpha(0)=x_\alpha^i}^{x_\alpha(T_1)=x_\alpha^f} \mathcal{D}x_\alpha(t') \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^{T_1} dt_1 \left\{ \frac{m_\alpha}{2} \dot{x}_\alpha(t_1)^2 - \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 x_\alpha(t_1)^2 + F_\alpha[x(t_1)] x_\alpha(t_1) \right\}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

onde, no limite $n \rightarrow \infty$, os somatórios nas exponenciais da Eq. (1.23) foram escritos como integrais de 0 a T_1 . Na integral deste tipo, na segunda linha da Eq. (1.24), temos no integrando a lagrangiana de um oscilador harmônico sujeito a uma força externa $F_\alpha[x(t_1)]$ por parte da partícula. Esta lagrangiana é quadrática na velocidade e na coordenada do oscilador α , e a integral sobre todas as trajetórias possíveis $x_\alpha(t')$, correspondente ao propagador de um oscilador harmônico forçado, pode ser calculada de maneira exata⁸. Desse modo temos⁹

$$\begin{aligned} \prod_\alpha \langle x_\alpha^f | \langle X_f | e^{-\frac{i}{\hbar}HT_1} | X_i \rangle \prod_\alpha | x_\alpha^i \rangle &= \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^{T_1} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}(t_1)^2 - \mathcal{V}[x(t_1)] \right\} \\ &\times \prod_\alpha \left(\frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2\pi i \hbar \sin \omega_\alpha T_1} \right)^{1/2} \\ &\times \prod_\alpha \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m_\alpha \omega_\alpha}{2 \sin \omega_\alpha T_1} \left[(x_\alpha^i)^2 + x_\alpha^f{}^2 \right] \cos \omega_\alpha T_1 - 2x_\alpha^i x_\alpha^f \right. \\ &+ \frac{x_\alpha^i}{\sin \omega_\alpha T_1} \int_0^{T_1} dt_1 F_\alpha[x(t_1)] \sin \omega_\alpha (T_1 - t_1) \\ &+ \frac{x_\alpha^f}{\sin \omega_\alpha T_1} \int_0^{T_1} dt_1 F_\alpha[x(t_1)] \sin \omega_\alpha t_1 \\ &\left. - \frac{1}{m_\alpha \omega_\alpha \sin \omega_\alpha T_1} \int_0^{T_1} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 F_\alpha[x(t_1)] F_\alpha[x(t_2)] \sin \omega_\alpha (T_1 - t_1) \sin \omega_\alpha t_2 \right\}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

No caso da amplitude de transição $\prod_\alpha \langle y_\alpha^i | \langle Y_i | e^{\frac{i}{\hbar}HT_2} | Y_f \rangle \prod_\alpha | y_\alpha^f \rangle$, podemos obter uma expressão

similar à (1.25). Substituindo na Eq. (1.22) ambas expressões e integrando sobre as variáveis $x_\alpha^i, x_\alpha^f, y_\alpha^i$ e y_α^f , obtemos

$$\begin{aligned}
 \Gamma(E, E') &= \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t_f - t_i)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}E_2(t_f - t_i)} \\
 &\times \int_0^{\infty} dT_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 + i\delta)T_1} \int_0^{\infty} dT_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - i\delta)T_2} \prod_\alpha a_\alpha(T_1, T_2) \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} dX_i dX_f dY_i dY_f \langle E'|X_f \rangle \langle X_i|E \rangle \langle E|Y_i \rangle \langle Y_f|E' \rangle \\
 &\times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^{T_1} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}(t_1)^2 - \mathcal{V}[x(t_1)] \right\} \\
 &\times \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp -\frac{i}{\hbar} \int_0^{T_2} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}(t_1)^2 - \mathcal{V}[\tilde{x}(t_1)] \right\} \\
 &\times \prod_\alpha \exp -\frac{1}{4m_\alpha \hbar \omega_\alpha \sinh \frac{\beta \hbar \omega_\alpha + i\omega_\alpha(T_1 - T_2)}{2}} \int_0^{\infty} dt_1 \int_0^{\infty} dt_2 (F_\alpha[x(t_1)] - F_\alpha[\tilde{x}(t_1)]) \\
 &\times \begin{pmatrix} \Delta_\alpha \left(\begin{smallmatrix} |t_1 - t_2| \\ |t_1 - t_2| \end{smallmatrix}, T_1 - T_2 \right) \theta(T_1 - t_1) \theta(T_1 - t_2) \\ \Delta_\alpha(t_1 - t_2 + t, T_2 - T_1) \theta(T_2 - t_1) \theta(T_1 - t_2) \\ \Delta_\alpha(t_2 - t_1 + t, T_2 - T_1) \theta(T_1 - t_1) \theta(T_2 - t_2) \\ \Delta_\alpha \left(-\begin{smallmatrix} |t_1 - t_2| \\ |t_1 - t_2| \end{smallmatrix}, T_1 - T_2 \right) \theta(T_2 - t_1) \theta(T_2 - t_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_\alpha[x(t_2)] \\ -F_\alpha[\tilde{x}(t_2)] \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{1.26}$$

onde

$$a_\alpha(T_1, T_2) = \frac{\sinh \frac{\beta \hbar \omega_\alpha}{2}}{\sinh \frac{\beta \hbar \omega_\alpha + i\omega_\alpha(T_1 - T_2)}{2}},$$

e

$$\Delta_\alpha(\tau, T) = \cosh \left(\frac{\beta \hbar \omega_\alpha + i\omega_\alpha T}{2} - i\omega_\alpha \tau \right).$$

Na Eq. (1.26), $\theta(x)$ representa a função degrau unitário dada por $\theta(x) = 1$ para $x > 0$ e $\theta(x) = 0$ para $x < 0$. No caso da função $\begin{smallmatrix} |t_1 - t_2| \\ |t_1 - t_2| \end{smallmatrix}$, ela é similar à função módulo $|t_1 - t_2|$, coincidindo com esta para

valores positivos de t_1 e t_2 . Porém, a função $|t_1 - t_2|$ é definida também para valores complexos de t_1 e t_2 fora do eixo real, os quais são necessários para descrever o tunelamento da partícula por meio de trajetórias clássicas reais $x(t')$ e $\tilde{x}(t')$. Neste caso, t_1 e t_2 tomam valores ao longo de contornos de integração de 0 a T_1 e de 0 a T_2 , sendo que, como indicado antes, T_1 e T_2 podem tomar valores na metade inferior e superior do plano complexo, respectivamente. O valor da função $|t_1 - t_2|$ é dado pela diferença $t_1 - t_2$ se o tempo t_1 se encontra depois de t_2 no sentido de percurso do contorno de 0 a T_1 ou de 0 a T_2 . Caso contrário, o valor da função $|t_1 - t_2|$ é dado pela diferença $t_2 - t_1$.

A Eq. (1.26) é uma expressão exata do espectro de transmissão da partícula para uma temperatura do banho de osciladores $T > 0$. Esta equação é o resultado correspondente ao obtido por Ueda² através das Eqs. (4), (15) e (16) da Ref. 2, sem o uso do método do tempo complexo. A Eq. (1.26) pode ser escrita de maneira mais explícita, sem a função degrau unitário, na forma

$$\begin{aligned}
\Gamma(E, E') &= \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t_f - t_i)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}E_2(t_f - t_i)} \\
&\times \int_0^{\infty} dT_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 + i\delta)T_1} \int_0^{\infty} dT_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - i\delta)T_2} \prod_{\alpha} a_{\alpha}(T_1, T_2) \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} dX_i dX_f dY_i dY_f \langle E'|X_f \rangle \langle X_i|E \rangle \langle E|Y_i \rangle \langle Y_f|E' \rangle \\
&\times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^{T_1} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}(t_1)^2 - \mathcal{V}[x(t_1)] \right\} \\
&\times \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp -\frac{i}{\hbar} \int_0^{T_2} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}(t_1)^2 - \mathcal{V}[\tilde{x}(t_1)] \right\} \\
&\times \prod_{\alpha} \exp -\frac{1}{4m_{\alpha}\hbar\omega_{\alpha} \sinh \frac{\beta\hbar\omega_{\alpha} + i\omega_{\alpha}(T_1 - T_2)}{2}} \left\{ \int_0^{T_1} dt_1 \int_0^{T_1} dt_2 F_{\alpha}[x(t_1)] F_{\alpha}[x(t_2)] \right. \\
&\quad \times \Delta_{\alpha} \left(|t_1 - t_2|, T_1 - T_2 \right) - 2 \int_0^{T_1} dt_1 \int_0^{T_2} dt_2 F_{\alpha}[x(t_1)] F_{\alpha}[\tilde{x}(t_2)] \Delta_{\alpha}(t_2 - t_1 + t, T_2 - T_1) \\
&\quad \left. + \int_0^{T_2} dt_1 \int_0^{T_2} dt_2 F_{\alpha}[\tilde{x}(t_1)] F_{\alpha}[\tilde{x}(t_2)] \Delta_{\alpha} \left(-|t_1 - t_2|, T_1 - T_2 \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{1.27}$$

1.4.2 Banho de osciladores a $T = 0$: Caso dissipativo

Para estudar o caso dissipativo, no qual a partícula perde energia ao interagir com o banho de osciladores, trataremos o caso $T = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$). Chamaremos o espectro de transmissão neste caso de $\Gamma_0(E, E')$. Utilizando a Eq. (1.8) podemos obter a partir da Eq. (1.27), no limite $\beta \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned}
\Gamma_0(E, E') &= \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t_f - t_i)} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}E_2(t_f - t_i)} \int_0^{\infty} dT_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 + i\delta)T_1} \int_0^{\infty} dT_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - i\delta)T_2} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} dX_i dX_f dY_i dY_f \langle E' | X_f \rangle \langle X_i | E \rangle \langle E | Y_i \rangle \langle Y_f | E' \rangle \\
&\times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp \frac{i}{\hbar} S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t],
\end{aligned} \tag{1.28}$$

onde $S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t]$ é a ação efetiva da partícula na presença de um banho de osciladores a $T = 0$, dada por

$$\begin{aligned}
S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] &= \int_0^{T_1} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}(t_1)^2 - \mathcal{V}[x(t_1)] \right\} - \int_0^{T_2} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}(t_1)^2 - \mathcal{V}[\tilde{x}(t_1)] \right\} \\
&+ i \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{T_1} dt_1 \int_0^{T_1} dt_2 g[x(t_1)] g[x(t_2)] e^{-i\omega |t_1 - t_2|} \right. \\
&\quad - 2 \int_0^{T_1} dt_1 \int_0^{T_2} dt_2 g[x(t_1)] g[\tilde{x}(t_2)] e^{i\omega(T_2 - T_1)} e^{-i\omega(t_2 - t_1 + t)} \\
&\quad \left. + \int_0^{T_2} dt_1 \int_0^{T_2} dt_2 g[\tilde{x}(t_1)] g[\tilde{x}(t_2)] e^{i\omega |t_1 - t_2|} \right\}.
\end{aligned} \tag{1.29}$$

Nesta equação, $J(\omega)$ é a chamada função de densidade espectral do banho de osciladores, definida como

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}} \delta(\omega - \omega_{\alpha}). \tag{1.30}$$

Utilizando as Eqs. (1.7) e (1.4) podemos escrever

$$\mathcal{V}[x(t_1)] = V[x(t_1)] + \frac{1}{2} \mu g^2 [x(t_1)] ,$$

onde

$$\mu = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} . \quad (1.31)$$

A ação efetiva da partícula (1.29) pode ser escrita então na forma

$$\begin{aligned} S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] = & \int_0^{T_1} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}(t_1)^2 - V[x(t_1)] - \frac{1}{2} \mu g^2 [x(t_1)] \right\} \\ & - \int_0^{T_2} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}(t_1)^2 - V[\tilde{x}(t_1)] - \frac{1}{2} \mu g^2 [\tilde{x}(t_1)] \right\} \\ & + i \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{T_1} dt_1 \int_0^{T_1} dt_2 g[x(t_1)] g[x(t_2)] e^{-i\omega |t_1 - t_2|} \right. \\ & - 2 \int_0^{T_1} dt_1 \int_0^{T_2} dt_2 g[x(t_1)] g[\tilde{x}(t_2)] e^{i\omega (T_2 - T_1)} e^{-i\omega (t_2 - t_1 + t)} \\ & \left. + \int_0^{T_2} dt_1 \int_0^{T_2} dt_2 g[\tilde{x}(t_1)] g[\tilde{x}(t_2)] e^{i\omega |t_1 - t_2|} \right\} . \quad (1.32) \end{aligned}$$

Capítulo 2

Aproximações no Espectro de Transmissão

O cálculo exato do espectro de transmissão da partícula através da expressão (1.28) requereria calcular a contribuição de todas as trajetórias possíveis $x(t')$ e $\tilde{x}(t')$ que cumpram as condições $x(0) = X_i$, $x(T_1) = X_f$, $\tilde{x}(0) = Y_i$ e $\tilde{x}(T_2) = Y_f$. Em lugar disso, neste capítulo realizaremos um cálculo aproximado do espectro de transmissão.

2.1 Trajetórias clássicas

Primeiramente, aproximaremos a contribuição de todas as trajetórias possíveis através da contribuição das chamadas trajetórias clássicas e suas trajetórias vizinhas. As trajetórias clássicas $x_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ são aquelas para as quais a variação de primeira ordem da ação efetiva da partícula $S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t]$ é zero, ou seja,

$$\delta^{(1)} S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \Big|_{\substack{x(t') = x_c(t') \\ \tilde{x}(t') = \tilde{x}_c(t')}} = 0. \quad (2.1)$$

Neste caso dizemos também que a ação efetiva da partícula é estacionária para pequenas variações em torno das trajetórias clássicas $x_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$. Estas trajetórias satisfazem as condições de contorno

$$x_c(0) = X_i \quad x_c(T_1) = X_f \quad \tilde{x}_c(0) = Y_i \quad \tilde{x}_c(T_2) = Y_f. \quad (2.2)$$

As equações de movimento das trajetórias clássicas podem ser obtidas a partir da condição (2.1). Utilizando a expressão (1.32) para a ação efetiva da partícula, temos

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_c(t_1) = & -V'[x_c(t_1)] - \mu g[x_c(t_1)] g'[x_c(t_1)] \\ & + i g'[x_c(t_1)] \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{T_1} dt_2 g[x_c(t_2)] e^{-i\omega|t_1 - t_2|} \right. \\ & \left. - \int_0^{T_2} dt_2 g[\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega(T_2 - T_1)} e^{-i\omega(t_2 - t_1 + t)} \right\}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

e

$$\begin{aligned}
 m\ddot{\tilde{x}}_c(t_1) = & -V'[\tilde{x}_c(t_1)] - \mu g[\tilde{x}_c(t_1)]g'[\tilde{x}_c(t_1)] \\
 & - i g'[\tilde{x}_c(t_1)] \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{T_2} dt_2 g[\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega|t_1 - t_2|} \right. \\
 & \left. - \int_0^{T_1} dt_2 g[x_c(t_2)] e^{i\omega(T_2 - T_1)} e^{-i\omega(t_1 - t_2 + t)} \right\}. \tag{2.4}
 \end{aligned}$$

Estas equações de movimento e as condições de contorno (2.2) determinam as trajetórias clássicas $x_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$.

Utilizando as trajetórias clássicas podemos aproximar a integração sobre todas as trajetórias possíveis $x(t')$ e $\tilde{x}(t')$ no espectro de transmissão (1.28) na forma

$$\begin{aligned}
 & \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp \frac{i}{\hbar} S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \\
 & \approx \exp \frac{i}{\hbar} S_0[x_c(t'), \tilde{x}_c(t'), T_1, T_2, t] \\
 & \times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \delta^{(2)} S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \Big|_{\substack{x(t')=x_c(t') \\ \tilde{x}(t')=\tilde{x}_c(t')}}
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

onde $S_0[x_c(t'), \tilde{x}_c(t'), T_1, T_2, t]$ é a ação efetiva da partícula para as trajetórias clássicas $x_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$. De acordo com a Eq. (1.32), esta ação é dada por

$$\begin{aligned}
 S_0[x_c(t'), \tilde{x}_c(t'), T_1, T_2, t] = & \int_0^{T_1} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}_c(t_1)^2 - V[x_c(t_1)] - \frac{1}{2} \mu g^2[x_c(t_1)] \right\} \\
 & - \int_0^{T_2} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}_c(t_1)^2 - V[\tilde{x}_c(t_1)] - \frac{1}{2} \mu g^2[\tilde{x}_c(t_1)] \right\} \\
 & + i \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{T_1} dt_1 \int_0^{T_1} dt_2 g[x_c(t_1)] g[x_c(t_2)] e^{-i\omega|t_1 - t_2|} \right. \\
 & \left. - 2 \int_0^{T_1} dt_1 \int_0^{T_2} dt_2 g[x_c(t_1)] g[\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega(T_2 - T_1)} e^{-i\omega(t_2 - t_1 + t)} \right\}
 \end{aligned}$$

$$+ \left. \int_0^{T_2} dt_1 \int_0^{T_2} dt_2 g[\tilde{x}_c(t_1)] g[\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega|t_1 - t_2|} \right\}. \quad (2.6)$$

Na Eq. (2.5), $\delta^{(2)}S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \Big|_{\substack{x(t')=x_c(t') \\ \tilde{x}(t')=\tilde{x}_c(t')}}$ é a variação de segunda ordem da ação efetiva da partícula e corresponde à contribuição das trajetórias próximas às trajetórias clássicas. Substituindo essa equação na expressão (1.28) para o espectro de transmissão obtemos

$$\begin{aligned} \Gamma_0(E, E') &\approx \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t_f - t_i)} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}E_2(t_f - t_i)} \int_0^{\infty} dT_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 + i\delta)T_1} \int_0^{\infty} dT_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - i\delta)T_2} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dX_i dX_f dY_i dY_f \langle E'|X_f \rangle \langle X_i|E \rangle \langle E|Y_i \rangle \langle Y_f|E' \rangle \\ &\times \exp \frac{i}{\hbar} S_0[x_c(t'), \tilde{x}_c(t'), T_1, T_2, t] \\ &\times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \delta^{(2)} S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \Big|_{\substack{x(t')=x_c(t') \\ \tilde{x}(t')=\tilde{x}_c(t')}}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Do procedimento seguido nesta seção podemos ver que o método do tempo complexo oferece um marco apropriado para obter as equações de movimento das trajetórias clássicas (2.3) e (2.4). Este método permite considerar a variação da ação efetiva da partícula na Eq. (1.28) para tempos fixos de duração das trajetórias T_1 e T_2 . Na Ref. 2, as equações de movimento (32) para as trajetórias clássicas foram obtidas considerando a variação da ação efetiva da partícula (30) para tempos fixos de travessia T_X e T_Y através da barreira. Porém, estes tempos são distintos para as diferentes trajetórias possíveis $X(t')$ e $Y(t')$ consideradas na Ref. 2, sendo fixos somente os tempos inicial e final t_i e t_f dessas trajetórias.

2.2 Trajetórias clássicas especiais

Utilizando as expressões dos estados inicial e final da partícula, Eqs. (1.9) e (1.11), respectivamente, obtemos para o espectro de transmissão (2.7)

$$\Gamma_0(E, E') \approx \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t_f - t_i)}$$

$$\begin{aligned}
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}E_2(t_f - t_i)} \int_0^{\infty} dT_1 \int_{-\infty}^{\infty} dT_2 \int dX_i dX_f dY_i dY_f e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{E_1, E_2}(X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t)} \\
& \times \frac{e^{-\frac{\delta}{\hbar}T_1}}{(\pi\Delta_i^2)^{1/2}} \frac{e^{-\frac{\delta}{\hbar}T_2}}{(\pi\Delta_f^2)^{1/2}} e^{-\frac{(X_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(X_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} e^{-\frac{(Y_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(Y_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} \\
& \times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \delta^{(2)} S_0 [x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \Bigg|_{\substack{x(t')=x_c(t') \\ \tilde{x}(t')=\tilde{x}_c(t')}} ,
\end{aligned} \tag{2.8}$$

onde $\mathcal{S}_{E_1, E_2}(X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t)$, que chamamos de ação total da partícula, contém a ação efetiva da partícula e também os fatores de fase dos estados inicial e final da partícula e do método do tempo complexo, sendo dada por

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_{E_1, E_2}(X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t) &= E_1 T_1 - E_2 T_2 + p_i X_i - p_f X_f - p_i Y_i + p_f Y_f \\
&+ S_0 [x_c(t'), \tilde{x}_c(t'), T_1, T_2, t] .
\end{aligned} \tag{2.9}$$

A ação total da partícula depende, além das variáveis E_1 , E_2 e t , das coordenadas iniciais e finais das trajetórias, X_i , X_f , Y_i e Y_f , e dos tempos de duração T_1 e T_2 . Para cada conjunto destas variáveis, um par de trajetórias clássicas $x_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ pode ser determinado de acordo com as equações de movimento (2.3) e (2.4) e as condições de contorno (2.2).

A integração na Eq. (2.8) sobre as variáveis X_i , X_f , Y_i , Y_f , T_1 e T_2 pode ser aproximada através da contribuição daqueles valores críticos (e dos valores próximos a eles) \bar{X}_i , \bar{X}_f , \bar{Y}_i , \bar{Y}_f , \bar{T}_1 e \bar{T}_2 para os quais a variação de primeira ordem da ação total da partícula é zero, ou seja,

$$\delta^{(1)} \mathcal{S}_{E_1, E_2}(X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t) \Bigg|_{\substack{X_i = \bar{X}_i & X_f = \bar{X}_f \\ Y_i = \bar{Y}_i & Y_f = \bar{Y}_f \\ T_1 = \bar{T}_1 & T_2 = \bar{T}_2}} = 0 . \tag{2.10}$$

Assim como no caso da condição (2.1) para a ação efetiva da partícula, dizemos também que a ação total da partícula é estacionária para pequenos deslocamentos em torno dos valores \bar{X}_i , \bar{X}_f , \bar{Y}_i , \bar{Y}_f , \bar{T}_1 e \bar{T}_2 . Para o espectro de transmissão (2.8) queremos então aproximar a integração sobre as variáveis X_i , X_f , Y_i , Y_f , T_1 e T_2 na forma

$$\int_0^{\infty} dT_1 \int_{-\infty}^{\infty} dT_2 \int dX_i dX_f dY_i dY_f e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{E_1, E_2}(X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t)}$$

$$\begin{aligned}
& \times \frac{e^{-\frac{\delta}{\hbar} T_1}}{(\pi \Delta_i^2)^{1/2}} \frac{e^{-\frac{\delta}{\hbar} T_2}}{(\pi \Delta_f^2)^{1/2}} e^{-\frac{(X_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(X_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} e^{-\frac{(Y_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(Y_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} \\
& \times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \delta^{(2)} S_0 [x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \Bigg|_{\substack{x(t')=x_c(t') \\ \tilde{x}(t')=\tilde{x}_c(t')}} \\
& \approx e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}_{E_1, E_2} (\bar{X}_i, \bar{X}_f, \bar{Y}_i, \bar{Y}_f, \bar{T}_1, \bar{T}_2, t)} \tag{2.11} \\
& \times \int dT_1 dT_2 \int dX_i dX_f dY_i dY_f \exp \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \delta^{(2)} \mathcal{S}_{E_1, E_2} (X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t) \Bigg|_{\substack{X_i=\bar{X}_i & X_f=\bar{X}_f \\ Y_i=\bar{Y}_i & Y_f=\bar{Y}_f \\ T_1=\bar{T}_1 & T_2=\bar{T}_2}} \\
& \times \frac{1}{(\pi \Delta_i^2)^{1/2}} \frac{1}{(\pi \Delta_f^2)^{1/2}} e^{-\frac{(X_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(X_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} e^{-\frac{(Y_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(Y_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} \\
& \times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \delta^{(2)} S_0 [x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \Bigg|_{\substack{x(t')=x_c(t') \\ \tilde{x}(t')=\tilde{x}_c(t')}} ,
\end{aligned}$$

onde $\delta^{(2)} \mathcal{S}_{E_1, E_2} (X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t) \Bigg|_{\substack{X_i=\bar{X}_i & X_f=\bar{X}_f \\ Y_i=\bar{Y}_i & Y_f=\bar{Y}_f \\ T_1=\bar{T}_1 & T_2=\bar{T}_2}}$ é a variação de segunda ordem da ação total da

partícula e corresponde à contribuição dos valores próximos a $\bar{X}_i, \bar{X}_f, \bar{Y}_i, \bar{Y}_f, \bar{T}_1$ e \bar{T}_2 .

As equações que determinam os valores de $\bar{X}_i, \bar{X}_f, \bar{Y}_i, \bar{Y}_f, \bar{T}_1$ e \bar{T}_2 podem ser obtidas através da condição (2.10). Para obter $\delta^{(1)} \mathcal{S}_{E_1, E_2} (X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t)$ consideramos a variação

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{S}_{E_1, E_2} (X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t) &= E_1 \delta T_1 - E_2 \delta T_2 + p_i \delta X_i - p_f \delta X_f - p_i \delta Y_i + p_f \delta Y_f \\
&+ S_0 [x'_c(t'), \tilde{x}'_c(t'), T_1 + \delta T_1, T_2 + \delta T_2, t] - S_0 [x_c(t'), \tilde{x}_c(t'), T_1, T_2, t] , \tag{2.12}
\end{aligned}$$

até termos de primeira ordem nos deslocamentos das coordenadas e os tempos de duração dados por $\delta X_i, \delta X_f, \delta Y_i, \delta Y_f, \delta T_1$ e δT_2 . Para calcular a variação (2.12), tomamos duas trajetórias clássicas $x_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ que satisfazem as condições de contorno (2.2) e outras duas trajetórias clássicas $x'_c(t')$ e $\tilde{x}'_c(t')$ que satisfazem condições similares com as coordenadas iniciais e finais e os tempos de duração deslocados. Assim temos

$$\begin{aligned}
x_c(0) &= X_i & x_c(T_1) &= X_f & \tilde{x}_c(0) &= Y_i & \tilde{x}_c(T_2) &= Y_f \\
x'_c(0) &= X_i + \delta X_i & x'_c(T_1 + \delta T_1) &= X_f + \delta X_f & \tilde{x}'_c(0) &= Y_i + \delta Y_i & \tilde{x}'_c(T_2 + \delta T_2) &= Y_f + \delta Y_f . \tag{2.13}
\end{aligned}$$

A ação efetiva da partícula para o par de trajetórias clássicas $x'_c(t')$ e $\tilde{x}'_c(t')$, segundo a Eq. (2.6), é dada por

$$\begin{aligned}
S_0 [x'_c(t'), \tilde{x}'_c(t'), T_1 + \delta T_1, T_2 + \delta T_2, t] &= \int_0^{T_1 + \delta T_1} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}'_c(t_1)^2 - V[x'_c(t_1)] - \frac{1}{2} \mu g^2 [x'_c(t_1)] \right\} \\
&- \int_0^{T_2 + \delta T_2} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}'_c(t_1)^2 - V[\tilde{x}'_c(t_1)] - \frac{1}{2} \mu g^2 [\tilde{x}'_c(t_1)] \right\} \\
&+ i \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{T_1 + \delta T_1} dt_1 \int_0^{T_1 + \delta T_1} dt_2 g[x'_c(t_1)] g[x'_c(t_2)] e^{-i\omega |t_1 - t_2|} \right. \\
&\quad - 2 \int_0^{T_1 + \delta T_1} dt_1 \int_0^{T_2 + \delta T_2} dt_2 g[x'_c(t_1)] g[\tilde{x}'_c(t_2)] e^{i\omega [T_2 + \delta T_2 - (T_1 + \delta T_1)]} e^{-i\omega (t_2 - t_1 + t)} \\
&\quad \left. + \int_0^{T_2 + \delta T_2} dt_1 \int_0^{T_2 + \delta T_2} dt_2 g[\tilde{x}'_c(t_1)] g[\tilde{x}'_c(t_2)] e^{i\omega |t_1 - t_2|} \right\}.
\end{aligned}$$

Utilizando esta expressão e também as Eqs. (2.6) e (2.13), podemos obter

$$\begin{aligned}
&S_0 [x'_c(t'), \tilde{x}'_c(t'), T_1 + \delta T_1, T_2 + \delta T_2, t] - S_0 [x_c(t'), \tilde{x}_c(t'), T_1, T_2, t] \\
&\approx -m\dot{x}_c(0) \delta X_i + m\dot{x}_c(T_1) \delta X_f + m\dot{\tilde{x}}_c(0) \delta Y_i - m\dot{\tilde{x}}_c(T_2) \delta Y_f - \mathcal{E} \delta T_1 + \tilde{\mathcal{E}} \delta T_2,
\end{aligned} \tag{2.14}$$

onde \mathcal{E} e $\tilde{\mathcal{E}}$ são as energias associadas às trajetórias clássicas $x_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$, respectivamente, sendo dadas por

$$\begin{aligned}
\mathcal{E} &= \frac{m}{2} \dot{x}_c(t_1)^2 + V[x_c(t_1)] + \frac{1}{2} \mu g^2 [x_c(t_1)] \\
&- i g[x_c(t_1)] \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{T_1} dt_2 g[x_c(t_2)] e^{-i\omega |t_1 - t_2|} \right. \\
&\quad \left. - \int_0^{T_2} dt_2 g[\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega (T_2 - T_1)} e^{-i\omega (t_2 - t_1 + t)} \right\} \\
&+ \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \omega \int_0^{t_1} dt' g[x_c(t')] \int_0^{T_2} dt_2 g[\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega (T_2 - T_1)} e^{-i\omega (t_2 - t' + t)}
\end{aligned}$$

$$- \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \omega \int_{t_1}^{T_1} dt' g[x_c(t')] \int_0^{t_1} dt_2 g[x_c(t_2)] e^{-i\omega(t' - t_2)}, \quad (2.15)$$

e

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{E}} = & \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}_c(t_1)^2 + V[\tilde{x}_c(t_1)] + \frac{1}{2} \mu g^2[\tilde{x}_c(t_1)] \\ & + i g[\tilde{x}_c(t_1)] \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{T_2} dt_2 g[\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega|t_1 - t_2|} \right. \\ & \left. - \int_0^{T_1} dt_2 g[x_c(t_2)] e^{i\omega(T_2 - T_1)} e^{-i\omega(t_1 - t_2 + t)} \right\} \\ & + \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \omega \int_0^{t_1} dt' g[\tilde{x}_c(t')] \int_0^{T_1} dt_2 g[x_c(t_2)] e^{i\omega(T_2 - T_1)} e^{-i\omega(t' - t_2 + t)} \\ & - \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \omega \int_{t_1}^{T_2} dt' g[\tilde{x}_c(t')] \int_0^{t_1} dt_2 g[\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega(t' - t_2)}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Estas energias são constantes de movimento, sendo que as equações de movimento (2.3) e (2.4) podem ser obtidas a partir das condições $\frac{d\mathcal{E}}{dt_1} = 0$ e $\frac{d\tilde{\mathcal{E}}}{dt_1} = 0$.

Da condição (2.10), utilizando as Eqs. (2.12) e (2.14), obtemos

$$\begin{aligned} \delta^{(1)} \mathcal{S}_{E_1, E_2}(X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t) \Bigg|_{\substack{X_i = \bar{X}_i & X_f = \bar{X}_f \\ Y_i = \bar{Y}_i & Y_f = \bar{Y}_f \\ T_1 = \bar{T}_1 & T_2 = \bar{T}_2}} = 0 \\ = (E_1 - \bar{\mathcal{E}}) \delta T_1 + [p_i - m\dot{\bar{x}}_c(0)] \delta X_i + [m\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1) - p_f] \delta X_f \\ + (\bar{\mathcal{E}} - E_2) \delta T_2 + [m\dot{\bar{x}}_c(0) - p_i] \delta Y_i + [p_f - m\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_2)] \delta Y_f. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Nesta expressão, as energias $\bar{\mathcal{E}}$ e $\tilde{\mathcal{E}}$ e as velocidades $\dot{\bar{x}}_c(0)$, $\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1)$, $\dot{\tilde{x}}_c(0)$ e $\dot{\tilde{x}}_c(\bar{T}_2)$, correspondem às trajetórias clássicas $\bar{x}_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ com coordenadas iniciais e finais \bar{X}_i , \bar{X}_f , \bar{Y}_i e \bar{Y}_f e tempos de duração \bar{T}_1 e \bar{T}_2 . Chamamos estas trajetórias clássicas de trajetórias clássicas especiais. De acordo com as Eqs. (2.3), (2.4) e (2.2), estas trajetórias satisfazem as equações de movimento

$$m\ddot{\bar{x}}_c(t_1) = -V'[\bar{x}_c(t_1)] - \mu g[\bar{x}_c(t_1)] g'[\bar{x}_c(t_1)]$$

$$\begin{aligned}
& + i g' [\bar{x}_c(t_1)] \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{\bar{T}_1} dt_2 g [\bar{x}_c(t_2)] e^{-i\omega |t_1 - t_2|} \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. - \int_0^{\bar{T}_2} dt_2 g [\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega (\bar{T}_2 - \bar{T}_1)} e^{-i\omega (t_2 - t_1 + t)} \right\}, \tag{2.18}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
m \ddot{\tilde{x}}_c(t_1) &= -V' [\tilde{x}_c(t_1)] - \mu g [\tilde{x}_c(t_1)] g' [\tilde{x}_c(t_1)] \\
& - i g' [\tilde{x}_c(t_1)] \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{\bar{T}_2} dt_2 g [\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega |t_1 - t_2|} \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. - \int_0^{\bar{T}_1} dt_2 g [\bar{x}_c(t_2)] e^{i\omega (\bar{T}_2 - \bar{T}_1)} e^{-i\omega (t_1 - t_2 + t)} \right\}, \tag{2.19}
\end{aligned}$$

e as condições de contorno

$$\bar{x}_c(0) = \bar{X}_i \quad \bar{x}_c(\bar{T}_1) = \bar{X}_f \quad \tilde{x}_c(0) = \bar{Y}_i \quad \tilde{x}_c(\bar{T}_2) = \bar{Y}_f. \tag{2.20}$$

Também, de acordo com as Eqs. (2.15) e (2.16), as energias associadas às trajetórias clássicas especiais $\bar{x}_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ são dadas por

$$\begin{aligned}
\bar{\mathcal{E}} &= \frac{m}{2} \dot{\bar{x}}_c(t_1)^2 + V [\bar{x}_c(t_1)] + \frac{1}{2} \mu g^2 [\bar{x}_c(t_1)] \\
& - i g [\bar{x}_c(t_1)] \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{\bar{T}_1} dt_2 g [\bar{x}_c(t_2)] e^{-i\omega |t_1 - t_2|} \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. - \int_0^{\bar{T}_2} dt_2 g [\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega (\bar{T}_2 - \bar{T}_1)} e^{-i\omega (t_2 - t_1 + t)} \right\} \\
& + \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \omega \int_0^{t_1} dt' g [\bar{x}_c(t')] \int_0^{\bar{T}_2} dt_2 g [\tilde{x}_c(t_2)] e^{i\omega (\bar{T}_2 - \bar{T}_1)} e^{-i\omega (t_2 - t' + t)}
\end{aligned}$$

$$- \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \omega \int_{t_1}^{\bar{T}_1} dt' g[\bar{x}_c(t')] \int_0^{t_1} dt_2 g[\bar{x}_c(t_2)] e^{-i\omega(t' - t_2)}, \quad (2.21)$$

e

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{E}} = & \frac{m}{2} \dot{\bar{x}}_c(t_1)^2 + V[\bar{x}_c(t_1)] + \frac{1}{2} \mu g^2[\bar{x}_c(t_1)] \\ & + i g[\bar{x}_c(t_1)] \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{\bar{T}_2} dt_2 g[\bar{x}_c(t_2)] e^{i\omega|t_1 - t_2|} \right. \\ & \left. - \int_0^{\bar{T}_1} dt_2 g[\bar{x}_c(t_2)] e^{i\omega(\bar{T}_2 - \bar{T}_1)} e^{-i\omega(t_1 - t_2 + t)} \right\} \\ & + \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \omega \int_0^{t_1} dt' g[\bar{x}_c(t')] \int_0^{\bar{T}_1} dt_2 g[\bar{x}_c(t_2)] e^{i\omega(\bar{T}_2 - \bar{T}_1)} e^{-i\omega(t' - t_2 + t)} \\ & - \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \omega \int_{t_1}^{\bar{T}_2} dt' g[\bar{x}_c(t')] \int_0^{t_1} dt_2 g[\bar{x}_c(t_2)] e^{i\omega(t' - t_2)}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

De acordo com a Eq. (2.17), as trajetórias clássicas especiais são caracterizadas pelas condições

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{E}} = E_1 & \quad m\dot{\bar{x}}_c(0) = p_i & \quad m\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1) = p_f \\ \bar{\mathcal{E}} = E_2 & \quad m\dot{\bar{x}}_c(0) = p_i & \quad m\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_2) = p_f \end{aligned} \quad (2.23)$$

Assim, as energias associadas às trajetórias clássicas especiais têm valores iguais aos das variáveis de integração E_1 e E_2 no espectro de transmissão (2.8). Adicionalmente, os momentos iniciais e finais destas trajetórias são iguais, respectivamente, aos momentos médios p_i e p_f (Eqs. (1.10) e (1.12)) dos pacotes de ondas incidente e transmitido que caracterizam a partícula.

2.3 Trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas

Ao aproximar a integração sobre as variáveis X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1 e T_2 no espectro de transmissão (2.8) através da expressão (2.11), não consideramos a influência dos fatores exponenciais reais que caracterizam a posição média dos pacotes de ondas incidente (1.9) e transmitido (1.11). Seguidamente consideramos

os fatores $e^{-\frac{(X_i + a)^2}{2\Delta_i^2}}$ e $e^{-\frac{(Y_i + a)^2}{2\Delta_i^2}}$ que caracterizam o pacote de ondas incidente (1.9).

Como foi indicado na seção 1.1, consideramos uma dispersão pequena na coordenada do pacote de ondas

incidente, ou seja, temos $\Delta_i \ll a$. Neste caso, a contribuição principal na Eq. (2.8) provém de trajetórias com coordenadas $X_i \approx -a$ e $Y_i \approx -a$. Dado que a integração sobre X_i e Y_i na aproximação (2.11) se realiza sobre valores próximos a \bar{X}_i e \bar{Y}_i , queremos aproximar o espectro de transmissão através de trajetórias clássicas especiais $\bar{x}_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ com coordenadas iniciais $\bar{X}_i = -a < 0$ e $\bar{Y}_i = -a < 0$.

Os valores de \bar{X}_i , \bar{X}_f , \bar{Y}_i , \bar{Y}_f , \bar{T}_1 e \bar{T}_2 são determinados pelas Eqs. (2.23) para valores dados das variáveis de integração E_1 e E_2 no espectro de transmissão (2.8). É possível encontrar os valores de E_1 e E_2 que são necessários para a existência de trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas arbitrárias. As energias associadas às trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas podem ser obtidas através das Eqs. (2.21) e (2.22). Destas equações, fazendo $t_1 = 0$, temos

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{m}{2} \dot{\bar{x}}_c(0)^2, \quad (2.24)$$

e

$$\tilde{\mathcal{E}} = \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}_c(0)^2, \quad (2.25)$$

onde consideramos as Eqs. (2.20), (1.2) e (1.5) para $\bar{X}_i < 0$ e $\bar{Y}_i < 0$. Por outro lado, utilizando as Eqs. (1.10) e (1.12), podemos ver que as Eqs. (2.23) conduzem a

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{E}} = E_1 & \quad \frac{m}{2} \dot{\bar{x}}_c(0)^2 = E & \quad \frac{m}{2} \dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1)^2 = E' \\ \tilde{\mathcal{E}} = E_2 & \quad \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}_c(0)^2 = E & \quad \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}_c(\bar{T}_2)^2 = E' \end{aligned}$$

Para trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas, estas equações, de acordo com (2.24) e (2.25), tomam a forma

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{E}} = E_1 & \quad \bar{\mathcal{E}} = E & \quad \frac{m}{2} \dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1)^2 = E' \\ \tilde{\mathcal{E}} = E_2 & \quad \tilde{\mathcal{E}} = E & \quad \frac{m}{2} \dot{\tilde{x}}_c(\bar{T}_2)^2 = E' \end{aligned}$$

Aqui podemos ver que para a trajetória $\bar{x}_c(t')$, o valor da energia associada $\bar{\mathcal{E}}$ deve ser igual ao valor da variável de integração E_1 e também igual ao valor da energia E que caracteriza o pacote de ondas incidente. Para que isto seja possível, precisamos ter $E_1 = E$. De maneira similar, para a trajetória $\tilde{x}_c(t')$, a energia associada $\tilde{\mathcal{E}}$ deve ser igual a E_2 e a E , o que é possível para $E_2 = E$. Assim, os valores $E_1 = E$ e $E_2 = E$ no espectro de transmissão (2.8) são necessários para a existência de trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas.

Para $E_1 = E$ e $E_2 = E$ na Eq. (2.8), as Eqs. (2.23) podem ser escritas na forma

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{E}} = E & \quad m \dot{\bar{x}}_c(0) = p_i & \quad m \dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1) = p_f \\ \tilde{\mathcal{E}} = E & \quad m \dot{\tilde{x}}_c(0) = p_i & \quad m \dot{\tilde{x}}_c(\bar{T}_2) = p_f \end{aligned} \quad (2.26)$$

Se substituirmos as condições $\bar{\mathcal{E}} = E$ e $m\dot{\bar{x}}_c(0) = p_i$ na Eq. (2.21) para $t_1 = 0$ e as condições $\bar{\tilde{\mathcal{E}}} = E$ e $m\dot{\bar{\tilde{x}}}_c(0) = p_i$ na Eq. (2.22), também para $t_1 = 0$, e utilizamos as Eqs. (1.10) e (2.20), obtemos

$$0 = V[\bar{X}_i] + \frac{1}{2}\mu g^2[\bar{X}_i] - i g[\bar{X}_i] \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{\bar{T}_1} dt_2 g[\bar{x}_c(t_2)] e^{-i\omega t_2} - \int_0^{\bar{T}_2} dt_2 g[\bar{\tilde{x}}_c(t_2)] e^{i\omega(\bar{T}_2 - \bar{T}_1)} e^{-i\omega(t_2 + t)} \right\},$$

e

$$0 = V[\bar{Y}_i] + \frac{1}{2}\mu g^2[\bar{Y}_i] + i g[\bar{Y}_i] \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left\{ \int_0^{\bar{T}_2} dt_2 g[\bar{\tilde{x}}_c(t_2)] e^{i\omega t_2} - \int_0^{\bar{T}_1} dt_2 g[\bar{x}_c(t_2)] e^{i\omega(\bar{T}_2 - \bar{T}_1)} e^{i\omega(t_2 - t)} \right\}.$$

Estas equações, de acordo com (1.2) e (1.5), podem ser satisfeitas para coordenadas iniciais negativas arbitrárias. Para ter a maior contribuição dos fatores $e^{-\frac{(X_i + a)^2}{2\Delta_i^2}}$ e $e^{-\frac{(Y_i + a)^2}{2\Delta_i^2}}$ na aproximação (2.11), tomamos os valores $\bar{X}_i = -a$ e $\bar{Y}_i = -a$.

Para coordenadas iniciais negativas, de acordo com as Eqs. (2.24) e (2.25), as condições $\bar{\mathcal{E}} = E$ e $\bar{\tilde{\mathcal{E}}} = E$ nas Eqs. (2.26) são satisfeitas automaticamente a partir das condições $m\dot{\bar{x}}_c(0) = p_i$ e $m\dot{\bar{\tilde{x}}}_c(0) = p_i$, com p_i dado pela Eq. (1.10). Assim, as condições $\bar{\mathcal{E}} = E$ e $\bar{\tilde{\mathcal{E}}} = E$ nas Eqs. (2.26) podem ser substituídas pelas condições $\bar{X}_i = -a$ e $\bar{Y}_i = -a$. Então, em lugar das Eqs. (2.26), podemos escrever

$$\begin{aligned} \bar{X}_i = -a & & m\dot{\bar{x}}_c(0) = p_i & & m\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1) = p_f \\ \bar{Y}_i = -a & & m\dot{\bar{\tilde{x}}}_c(0) = p_i & & m\dot{\bar{\tilde{x}}}_c(\bar{T}_2) = p_f \end{aligned} \quad (2.27)$$

Para $E_1 = E$ e $E_2 = E$, estas equações correspondem às Eqs. (2.23) que determinam as coordenadas iniciais e finais e os tempos de duração das trajetórias clássicas especiais $\bar{x}_c(t')$ e $\bar{\tilde{x}}_c(t')$. Dadas as coordenadas iniciais $\bar{X}_i = -a$ e $\bar{Y}_i = -a$, devemos determinar as coordenadas finais \bar{X}_f e \bar{Y}_f e os tempos de duração \bar{T}_1 e \bar{T}_2 .

Além dos fatores $e^{-\frac{(X_i + a)^2}{2\Delta_i^2}}$ e $e^{-\frac{(Y_i + a)^2}{2\Delta_i^2}}$ que caracterizam o pacote de ondas incidente (1.9), os

fatores $e^{-\frac{(X_f - a)^2}{2\Delta_f^2}}$ e $e^{-\frac{(Y_f - a)^2}{2\Delta_f^2}}$ que provêm do pacote de ondas transmitido (1.11), com $\Delta_f \ll a$, estão presentes também no espectro de transmissão (2.8). A contribuição dominante nessa equação corresponde então às trajetórias com coordenadas finais $X_f \approx a$ e $Y_f \approx a$. Dado que a integração sobre X_f e Y_f na aproximação (2.11) se realiza sobre valores próximos a \bar{X}_f e \bar{Y}_f , queremos aproximar o espectro de transmissão através de trajetórias clássicas especiais caracterizadas através das Eqs. (2.27) que tenham também coordenadas finais $\bar{X}_f = a > d$ e $\bar{Y}_f = a > d$. Para ver se isto é possível, podemos estudar primeiro a possibilidade de que as trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas — em particular aquelas definidas através das Eqs. (2.27) — tenham coordenadas finais com valores arbitrários no lado direito da barreira, ou seja, $\bar{X}_f > d$ e $\bar{Y}_f > d$ (Fig. 1.1).

Devido às descontinuidades na derivada do potencial $V(x)$ (Eq. (1.2)) e da função $g(x)$ (Eq. (1.5)) para $x = 0$ e $x = d$, utilizamos as equações de movimento (2.18) e (2.19) para determinar as trajetórias $\bar{x}_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ nas regiões a cada lado e na região da barreira (Fig. 1.1). Podemos ver que para trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas, as coordenadas finais \bar{X}_f e \bar{Y}_f não podem tomar valores também negativos. Para $\bar{x}_c(t_1) < 0$ e $\tilde{x}_c(t_1) < 0$, as Eqs. (2.18) e (2.19) descrevem um movimento com velocidade constante. Neste caso, de acordo com as condições $m\dot{\bar{x}}_c(0) = p_i$ e $m\dot{\tilde{x}}_c(0) = p_i$ (Eqs. (2.27)), temos então $m\dot{\bar{x}}_c(t_1) = p_i$ e $m\dot{\tilde{x}}_c(t_1) = p_i$ para todos os instantes t_1 em que a posição é negativa. Para $X_f < 0$ e $Y_f < 0$ teríamos, de acordo com as condições de contorno (2.20), $\bar{x}_c(\bar{T}_1) = \bar{X}_f < 0$ e $\tilde{x}_c(\bar{T}_2) = \bar{Y}_f < 0$. Então, nos instantes \bar{T}_1 e \bar{T}_2 , para os quais as posições \bar{X}_f e \bar{Y}_f seriam negativas, teríamos $m\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1) = p_f$ e $m\dot{\tilde{x}}_c(\bar{T}_2) = p_f$, de acordo com as Eqs. (2.27). Estas condições, para $p_f \neq p_i$ ($E' \neq E$), com p_i e p_f definidos através das Eqs. (1.10) e (1.12), iriam contradizer as condições $m\dot{\bar{x}}_c(t_1) = p_i$ e $m\dot{\tilde{x}}_c(t_1) = p_i$ que são válidas para posições negativas.

As coordenadas finais de trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas também não podem tomar valores na região da barreira (Fig. 1.1). No caso limite de campo elétrico nulo ($U_1 \rightarrow 0$) e interação da partícula com o banho de osciladores também nula ($C_\alpha \rightarrow 0$ e portanto, $J(\omega) \rightarrow 0$ (Eq. (1.30)) e $\mu \rightarrow 0$ (Eq. (1.31))), as Eqs. (2.18) e (2.19) para $0 < \bar{x}_c(t_1) < d$ e $0 < \tilde{x}_c(t_1) < d$ descrevem, assim como nos casos $\bar{x}_c(t_1) < 0$ e $\tilde{x}_c(t_1) < 0$, um movimento com velocidade constante. Esta velocidade na região da barreira pode ser obtida utilizando as Eqs. (2.21) e (2.22) das energias das trajetórias como constantes de movimento. Considerando dois instantes de tempo antes e depois de ser alcançado o limite da barreira $x = 0$ (Fig. 1.1), podemos ver que para os instantes de tempo t_1 que correspondem a posições na região da barreira temos $\frac{m}{2}\dot{\bar{x}}_c(0)^2 = \frac{m}{2}\dot{\bar{x}}_c(t_1)^2 + U_0$ e $\frac{m}{2}\dot{\tilde{x}}_c(0)^2 = \frac{m}{2}\dot{\tilde{x}}_c(t_1)^2 + U_0$. Utilizando as Eqs. (2.27) e (1.10) temos então $\frac{m}{2}\dot{\bar{x}}_c(t_1)^2 = -(U_0 - E) < 0$ e $\frac{m}{2}\dot{\tilde{x}}_c(t_1)^2 = -(U_0 - E) < 0$. Isto implica que a velocidade na região da barreira é imaginária. Por outro lado, para os instantes de tempo \bar{T}_1 e \bar{T}_2 que correspondem às posições \bar{X}_f e \bar{Y}_f , que estariam na região da barreira, teríamos de acordo com as Eqs. (2.27), $m\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1) = p_f$ e $m\dot{\tilde{x}}_c(\bar{T}_2) = p_f$, ou seja, as velocidades seriam reais.

Da análise anterior podemos concluir que as coordenadas finais \bar{X}_f e \bar{Y}_f das trajetórias clássicas

especiais com coordenadas iniciais negativas podem tomar valores somente no lado direito da barreira. Nesta região, assim como no caso $\bar{x}_c(t_1) < 0$ e $\tilde{x}_c(t_1) < 0$, as Eqs. (2.18) e (2.19) descrevem um movimento com velocidade constante. Na região à direita da barreira as Eqs. (2.27) especificam apenas as velocidades através das equações $m\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1) = p_f$ e $m\dot{\tilde{x}}_c(\bar{T}_2) = p_f$. Para valores não conhecidos dos tempos de duração \bar{T}_1 e \bar{T}_2 , as Eqs. (2.27) podem ser satisfeitas para valores arbitrários das coordenadas

finais $\bar{X}_f > d$ e $\bar{Y}_f > d$. Para ter a maior contribuição dos fatores $e^{-\frac{(X_f - a)^2}{2\Delta_f^2}}$ e $e^{-\frac{(Y_f - a)^2}{2\Delta_f^2}}$ na aproximação (2.11), tomamos os valores $\bar{X}_f = a$ e $\bar{Y}_f = a$. Se acrescentamos estas duas equações das coordenadas finais às Eqs. (2.27), temos

$$\begin{aligned} \bar{X}_i = -a & & m\dot{\bar{x}}_c(0) = p_i & & m\dot{\bar{x}}_c(\bar{T}_1) = p_f & & \bar{X}_f = a \\ \bar{Y}_i = -a & & m\dot{\tilde{x}}_c(0) = p_i & & m\dot{\tilde{x}}_c(\bar{T}_2) = p_f & & \bar{Y}_f = a \end{aligned} \quad (2.28)$$

Para $E_1 = E$ e $E_2 = E$, estas equações correspondem às trajetórias clássicas especiais com a maior contribuição no espectro de transmissão (2.8).

Dadas as coordenadas finais \bar{X}_f e \bar{Y}_f , resta determinar os tempos de duração correspondentes \bar{T}_1 e \bar{T}_2 . Para isso, somamos os intervalos de tempo que correspondem ao movimento nas regiões à esquerda, no espaço e à direita da barreira (Fig. 1.1). Chamando de t_0 e t_d os instantes em que são alcançados os limites da barreira para a trajetória $\bar{x}_c(t')$, ou seja, $\bar{x}_c(t_0) = 0$ e $\bar{x}_c(t_d) = d$, e de \tilde{t}_0 e \tilde{t}_d os instantes correspondentes para a trajetória $\tilde{x}_c(t')$, ou seja, $\tilde{x}_c(\tilde{t}_0) = 0$ e $\tilde{x}_c(\tilde{t}_d) = d$, temos

$$\bar{T}_1 = t_0 + (t_d - t_0) + (\bar{T}_1 - t_d) ,$$

e

$$\bar{T}_2 = \tilde{t}_0 + (\tilde{t}_d - \tilde{t}_0) + (\bar{T}_2 - \tilde{t}_d) .$$

As Eqs. (2.28) permitem determinar os intervalos de tempo do movimento nos lados esquerdo e direito da barreira. Os valores de t_0 e \tilde{t}_0 , assim como de $\bar{T}_1 - t_d$ e $\bar{T}_2 - \tilde{t}_d$, são os mesmos para as duas trajetórias dado que, segundo as Eqs. (2.28), são percorridos os mesmos trajetos antes e depois da barreira com as mesmas velocidades. Para os tempos de duração \bar{T}_1 e \bar{T}_2 temos

$$\bar{T}_1 = \frac{a}{p_i/m} + t_d - t_0 + \frac{a - d}{p_f/m} , \quad (2.29)$$

e

$$\bar{T}_2 = \frac{a}{p_i/m} + \tilde{t}_d - \tilde{t}_0 + \frac{a - d}{p_f/m} . \quad (2.30)$$

Para determinar os intervalos $t_d - t_0$ e $\tilde{t}_d - \tilde{t}_0$ devemos resolver as equações de movimento (2.18) e (2.19) na região da barreira. Como condições iniciais nesta região temos $\bar{x}_c(t_0) = 0$ e $\tilde{x}_c(\tilde{t}_0) = 0$, com $t_0 = \frac{a}{p_i/m} = \tilde{t}_0$, devendo ser determinadas as velocidades iniciais correspondentes para cada trajetória.

Representaremos estas velocidades através de $\dot{\bar{x}}_c(t_{0+})$ e $\dot{\tilde{x}}_c(\tilde{t}_{0+})$ onde t_{0+} e \tilde{t}_{0+} são instantes de tempos infinitamente próximos a t_0 e \tilde{t}_0 , respectivamente, depois de ser alcançado o limite da barreira $x = 0$, ou seja, $\bar{x}_c(t_{0+}) = 0^+ = \tilde{x}_c(\tilde{t}_{0+})$. Como veremos na subseção 2.3.4, devemos tomar para a trajetória $\bar{x}_c(t')$ o valor $\dot{\bar{x}}_c(t_{0+}) = +i\sqrt{2(U_0 - E)/m}$, e para a trajetória $\tilde{x}_c(t')$, o valor $\dot{\tilde{x}}_c(\tilde{t}_{0+}) = -i\sqrt{2(U_0 - E)/m}$. Utilizando estas velocidades iniciais e as condições $\bar{x}_c(t_0) = 0$ e $\tilde{x}_c(\tilde{t}_0) = 0$ podemos obter uma solução das equações de movimento na região da barreira integrando-as diretamente duas vezes. Este procedimento conduz a equações integrais que serão estudadas na seção 2.4 no caso de um campo elétrico fraco e uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores. Uma vez resolvidas as equações de movimento para as trajetórias $\bar{x}_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ na região da barreira, podemos utilizar as condições $\bar{x}_c(t_d) = d$ e $\tilde{x}_c(\tilde{t}_d) = d$ para determinar os instantes t_d e \tilde{t}_d e obter então os tempos de duração \bar{T}_1 e \bar{T}_2 a partir das Eqs. (2.29) e (2.30).

Dado que os valores $E_1 = E$ e $E_2 = E$ são necessários para a existência de trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas, aproximamos o espectro de transmissão (2.8) na forma

$$\begin{aligned} \Gamma_0(E, E') &\approx \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} \int \frac{dE_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t_f - t_i)} \\ &\times \int \frac{dE_2}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}E_2(t_f - t_i)} \int_0^{\infty} dT_1 dT_2 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E)T_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - E)T_2} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dX_i dX_f dY_i dY_f e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{E,E}(X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t)} \\ &\times \frac{e^{-\frac{\delta}{\hbar}T_1}}{(\pi\Delta_i^2)^{1/2}} \frac{e^{-\frac{\delta}{\hbar}T_2}}{(\pi\Delta_f^2)^{1/2}} e^{-\frac{(X_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(X_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} e^{-\frac{(Y_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(Y_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} \\ &\times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \delta^{(2)} S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \Big|_{\substack{x(t')=x_c(t') \\ \tilde{x}(t')=\tilde{x}_c(t')}} \end{aligned}$$

onde a integração sobre as variáveis E_1 e E_2 se realiza sobre valores próximos a $E_1 = E$ e $E_2 = E$. Neste caso, considerando pequena a influência dos fatores $e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E)T_1}$ e $e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - E)T_2}$, podemos aproximar a integração sobre as variáveis X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1 e T_2 através da expressão (2.11) para $E_1 = E$ e $E_2 = E$. Empregando as Eqs. (2.28) temos

$$\Gamma_0(E, E') \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{E,E}(-a, a, -a, a, \bar{T}_1, \bar{T}_2, t)} \mathcal{N}(t), \quad (2.31)$$

onde \bar{T}_1 e \bar{T}_2 são determinados pelas Eqs. (2.29) e (2.30) e o fator $\mathcal{N}(t)$ é dado por

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(t) &= \lim_{\substack{t_f \rightarrow +\infty \\ t_i \rightarrow -\infty}} \frac{1}{t_f - t_i} \int \frac{dE_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t_f - t_i)} \int \frac{dE_2}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}E_2(t_f - t_i)} \\
&\times \int dT_1 dT_2 \int dX_i dX_f dY_i dY_f e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E)T_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - E)T_2} \\
&\times \exp \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \delta^{(2)} \mathcal{S}_{E,E}(X_i, X_f, Y_i, Y_f, T_1, T_2, t) \Bigg|_{\substack{X_i = -a & X_f = a \\ Y_i = -a & Y_f = a \\ T_1 = \bar{T}_1 & T_2 = \bar{T}_2}} \\
&\times \frac{1}{(\pi\Delta_i^2)^{1/2}} \frac{1}{(\pi\Delta_f^2)^{1/2}} e^{-\frac{(X_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(X_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} e^{-\frac{(Y_i + a)^2}{2\Delta_i^2}} e^{-\frac{(Y_f - a)^2}{2\Delta_f^2}} \\
&\times \int_{x(0)=X_i}^{x(T_1)=X_f} \mathcal{D}x(t') \int_{\tilde{x}(0)=Y_i}^{\tilde{x}(T_2)=Y_f} \mathcal{D}\tilde{x}(t') \exp \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \delta^{(2)} S_0[x(t'), \tilde{x}(t'), T_1, T_2, t] \Bigg|_{\substack{x(t') = x_c(t') \\ \tilde{x}(t') = \tilde{x}_c(t')}}.
\end{aligned}$$

Assumindo uma dependência de t relativamente fraca para o fator $\mathcal{N}(t)$ no espectro de transmissão (2.31), temos

$$\Gamma_0(E, E') \approx N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}_{E,E}(-a, a, -a, a, \bar{T}_1, \bar{T}_2, t)}, \quad (2.32)$$

onde N é um fator de proporcionalidade. Esta expressão corresponde à Eq. (29) da Ref. 2. Porém, em lugar da ação efetiva da partícula, temos a ação total da partícula $\mathcal{S}_{E,E}(-a, a, -a, a, \bar{T}_1, \bar{T}_2, t)$. De acordo com as Eqs. (2.9), (2.29) e (2.30) temos

$$\mathcal{S}_{E,E}(-a, a, -a, a, \bar{T}_1, \bar{T}_2, t) = E(t_d - t_0) - E(\tilde{t}_d - \tilde{t}_0) + S_0[\bar{x}_c(t'), \tilde{x}_c(t'), \bar{T}_1, \bar{T}_2, t], \quad (2.33)$$

onde $S_0[\bar{x}_c(t'), \tilde{x}_c(t'), \bar{T}_1, \bar{T}_2, t]$ é a ação efetiva da partícula para as trajetórias clássicas especiais $\bar{x}_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ caracterizadas através das Eqs. (2.28). Como mencionamos antes, t_0 , t_d , \tilde{t}_0 e \tilde{t}_d correspondem aos instantes em que são alcançados os limites da barreira para essas trajetórias, ou seja, $\bar{x}_c(t_0) = 0 = \tilde{x}_c(\tilde{t}_0)$ e $\bar{x}_c(t_d) = d = \tilde{x}_c(\tilde{t}_d)$.

2.3.1 A ação efetiva da partícula

Para calcular o espectro de transmissão (2.32) devemos obter a ação efetiva da partícula na Eq. (2.33) dada por $S_0[\bar{x}_c(t'), \tilde{x}_c(t'), \bar{T}_1, \bar{T}_2, t]$. Esta pode ser obtida através da Eq. (2.6). Nessa expressão podemos

considerar as contribuições das trajetórias $\bar{x}_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$ nas regiões à esquerda, no espaço e à direita da barreira. Integrando por partes os termos de energia cinética para cada região e substituindo os termos de aceleração resultantes através das equações de movimento (2.18) e (2.19), obtemos

$$\begin{aligned}
S_0 \left[\bar{x}_c(t'), \tilde{x}_c(t'), \bar{T}_1, \bar{T}_2, t \right] &= \frac{m}{2} \left[\dot{\bar{x}}_c(t_{d-}) - \dot{\tilde{x}}_c(\tilde{t}_{d-}) \right] d \\
&+ \int_{t_0}^{t_d} dt_1 \left\{ \frac{1}{2} \bar{x}_c(t_1) \mathbf{V}' [\bar{x}_c(t_1)] - \mathbf{V} [\bar{x}_c(t_1)] \right\} - \int_{\tilde{t}_0}^{\tilde{t}_d} dt_1 \left\{ \frac{1}{2} \tilde{x}_c(t_1) \mathbf{V}' [\tilde{x}_c(t_1)] - \mathbf{V} [\tilde{x}_c(t_1)] \right\} \\
&+ id^2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} \left(1 - e^{-i\omega t} \right) \left[1 - i \frac{\omega}{2} \int_{t_0}^{t_d} dt_1 e^{i\omega(t_1 - t_d)} \frac{\bar{x}_c(t_1)}{d} \right. \\
&\qquad \qquad \qquad \left. + i \frac{\omega}{2} \int_{\tilde{t}_0}^{\tilde{t}_d} dt_1 e^{-i\omega(t_1 - \tilde{t}_d)} \frac{\tilde{x}_c(t_1)}{d} \right]. \tag{2.34}
\end{aligned}$$

Nesta expressão, t_{d-} e \tilde{t}_{d-} correspondem a instantes infinitamente próximos a t_d e \tilde{t}_d , respectivamente, antes de ser alcançado o limite da barreira $x = d$, ou seja, $\bar{x}_c(t_{d-}) = d - 0^+ = \tilde{x}_c(\tilde{t}_{d-})$. $\mathbf{V}(x)$ corresponde ao potencial (1.3) na região da barreira.

Como vemos na Eq. (2.34), a ação efetiva da partícula $S_0 \left[\bar{x}_c(t'), \tilde{x}_c(t'), \bar{T}_1, \bar{T}_2, t \right]$ depende somente das contribuições das trajetórias na região da barreira. Nesse caso é conveniente tomar os instantes t_0 e \tilde{t}_0 em que é alcançado o limite da barreira $x = 0$ como origens de medição do tempo. Definindo novas trajetórias $X(t')$ e $Y(t')$ tais que $X(0) = 0 = Y(0)$ e de uma forma mais geral, $\bar{x}_c(t_2 + t_0) = X(t_2)$ e $\tilde{x}_c(t_2 + \tilde{t}_0) = Y(t_2)$, temos

$$\begin{aligned}
S_0 \left[\bar{x}_c(t'), \tilde{x}_c(t'), \bar{T}_1, \bar{T}_2, t \right] &\xrightarrow[\tilde{x}_c(t') \rightarrow Y(t')]{\bar{x}_c(t') \rightarrow X(t')} \frac{m}{2} \left[\dot{X}(T_X^-) - \dot{Y}(T_Y^-) \right] d \\
&+ \int_0^{T_X} dt_1 \left\{ \frac{1}{2} X(t_1) \mathbf{V}' [X(t_1)] - \mathbf{V} [X(t_1)] \right\} - \int_0^{T_Y} dt_1 \left\{ \frac{1}{2} Y(t_1) \mathbf{V}' [Y(t_1)] - \mathbf{V} [Y(t_1)] \right\} \\
&+ id^2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} \left(1 - e^{-i\omega t} \right) \left[1 - i \frac{\omega}{2} \int_0^{T_X} dt_1 e^{i\omega(t_1 - T_X)} \frac{X(t_1)}{d} \right. \\
&\qquad \qquad \qquad \left. + i \frac{\omega}{2} \int_0^{T_Y} dt_1 e^{-i\omega(t_1 - T_Y)} \frac{Y(t_1)}{d} \right], \tag{2.35}
\end{aligned}$$

onde $T_X = t_d - t_0$ e $T_Y = \tilde{t}_d - \tilde{t}_0$. Chamamos T_X e T_Y de tempos de travessia através da barreira,

sendo que $X(T_X) = d = Y(T_Y)$. T_X^- e T_Y^- correspondem a instantes infinitamente próximos a T_X e T_Y , respectivamente, antes de ser alcançado o limite da barreira $x = d$. A expressão (2.35) corresponde à Eq. (42) da Ref. 2 onde o fator id que multiplica a integral sobre ω não é dimensionalmente correto e deve ser substituído pelo fator id^2 da expressão (2.35).

A Eq. (42) da Ref. 2 foi obtida a partir da Eq. (30) dessa referência para a ação efetiva da partícula que também deve ser corrigida. O resultado correspondente a essa última equação pode ser obtido a partir da Eq. (2.6) integrando por partes somente os termos de energia cinética nas regiões à esquerda e à direita da barreira. Nesse caso obtemos

$$\begin{aligned}
S_0 \left[\bar{x}_c(t'), \bar{\tilde{x}}_c(t'), \bar{T}_1, \bar{T}_2, t \right] & \xrightarrow[\bar{\tilde{x}}_c(t') \rightarrow Y(t')]{\bar{x}_c(t') \rightarrow X(t')} \int_0^{T_X} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{X}(t_1)^2 - V[X(t_1)] - \frac{1}{2} \mu X(t_1)^2 \right\} \\
& - \int_0^{T_Y} dt_1 \left\{ \frac{m}{2} \dot{Y}(t_1)^2 - V[Y(t_1)] - \frac{1}{2} \mu Y(t_1)^2 \right\} \\
& + i \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega) \left[\int_0^{T_X} dt_1 \int_0^{T_X} dt_2 X(t_1) X(t_2) e^{-i\omega |t_1 - t_2|} \right. \\
& \quad - 2 \int_0^{T_X} dt_1 \int_0^{T_Y} dt_2 X(t_1) Y(t_2) e^{i\omega (T_Y - T_X)} e^{-i\omega (t_2 - t_1 + t)} \\
& \quad \left. + \int_0^{T_Y} dt_1 \int_0^{T_Y} dt_2 Y(t_1) Y(t_2) e^{i\omega |t_1 - t_2|} \right] \\
& + id^2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} (1 - e^{-i\omega t}) \left[1 - i\omega \int_0^{T_X} dt_1 e^{i\omega (t_1 - T_X)} \frac{X(t_1)}{d} \right. \\
& \quad \left. + i\omega \int_0^{T_Y} dt_1 e^{-i\omega (t_1 - T_Y)} \frac{Y(t_1)}{d} \right].
\end{aligned} \tag{2.36}$$

A segunda integral sobre ω nesta expressão corrige a integral correspondente na Eq. (30) da Ref. 2. Também, na integral do termo misto $X(t_1)Y(t_2)$ na expressão (2.36), podemos notar o fator $e^{-i\omega t}$ que foi omitido na Eq. (30) da Ref. 2 e reapareceu depois nas equações de movimento (32) das trajetórias clássicas. Na expressão (2.36) temos também na integral do termo misto o fator $e^{i\omega (T_Y - T_X)}$. Este fator foi introduzido de maneira *ad hoc* no trabalho de Ueda². Esse procedimento é justificado na Ref. 2 como necessário devido à aproximação no cálculo do espectro de transmissão através das trajetórias clássicas.

No presente trabalho, o fator exponencial $e^{i\omega(T_Y - T_X)}$ na expressão (2.36) foi obtido a partir do fator $e^{i\omega(\bar{T}_2 - \bar{T}_1)}$, proveniente da Eq. (2.6), utilizando as Eqs. (2.29) e (2.30). Estas equações foram derivadas na aproximação do espectro de transmissão através de trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas. Porém, o fator $e^{i\omega(T_2 - T_1)}$ na Eq. (2.6) tem sua origem no cálculo exato do espectro de transmissão usando o método do tempo complexo (Capítulo 1). Este fator foi obtido na Eq. (1.29) na integral do termo misto $g[x(t_1)]g[\tilde{x}(t_2)]$ no caso limite em que o banho de osciladores se encontra a temperatura zero. Na Eq. (1.27) para o espectro de transmissão quando o banho de osciladores se encontra a temperatura maior que zero, a integral do termo misto $F_\alpha[x(t_1)]F_\alpha[\tilde{x}(t_2)]$ apresenta uma dependência com T_1 e T_2 da forma $T_2 - T_1$. Esta dependência introduz o fator exponencial $e^{i\omega(T_2 - T_1)}$ na Eq. (1.29). Para as integrais dos termos não mistos na Eq. (1.27), $F_\alpha[x(t_1)]F_\alpha[x(t_2)]$ e $F_\alpha[\tilde{x}(t_1)]F_\alpha[\tilde{x}(t_2)]$, essa dependência é diferente, sendo da forma $T_1 - T_2$.

As Eqs. (2.29) e (2.30) que permitiram obter o fator $e^{i\omega(T_Y - T_X)}$ na expressão (2.36) foram derivadas aproximando a integração sobre as coordenadas iniciais e finais das trajetórias através daqueles valores críticos para os quais a ação total da partícula é estacionária (seção 2.2). O procedimento seguido nas Eqs. (21) – (24) da Ref. 2 para tratar essa integração considera uma aceleração nula durante todo o trajeto de movimento incluindo o trajeto na região da barreira. Isso contradiz as equações de movimento (32) das trajetórias clássicas obtidas mais adiante para essa região². As Eqs. (2.29) e (2.30) foram obtidas também utilizando pacotes de ondas relativamente bem localizados, ou seja, com uma dispersão relativamente pequena na coordenada, para descrever os estados inicial e final da partícula (Eqs. (1.9) e (1.11)). Estes estados foram descritos nas equações (22) da Ref. 2 através de estados com momentos bem definidos e portanto, estados completamente deslocalizados, ou seja, com uma dispersão infinita na coordenada.

2.3.2 O expoente de tunelamento

Utilizando a expressão (2.35) para a ação efetiva da partícula podemos obter a ação total da partícula através da Eq. (2.33). Representando de maneira mais simples a ação total $\mathcal{S}_{E,E}(-a, a, -a, a, \bar{T}_1, \bar{T}_2, t)$ através de $\mathcal{S}_{E,E}(t)$, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{E,E}(t) = & E T_X - E T_Y + \frac{m}{2} \left[\dot{X}(T_X^-) - \dot{Y}(T_Y^-) \right] d \\ & + \int_0^{T_X} dt_1 \left\{ \frac{1}{2} X(t_1) V' [X(t_1)] - V [X(t_1)] \right\} - \int_0^{T_Y} dt_1 \left\{ \frac{1}{2} Y(t_1) V' [Y(t_1)] - V [Y(t_1)] \right\} \\ & + id^2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} (1 - e^{-i\omega t}) \left[1 - i \frac{\omega}{2} \int_0^{T_X} dt_1 e^{i\omega(t_1 - T_X)} \frac{X(t_1)}{d} \right. \\ & \left. + i \frac{\omega}{2} \int_0^{T_Y} dt_1 e^{-i\omega(t_1 - T_Y)} \frac{Y(t_1)}{d} \right]. \end{aligned} \quad (2.37)$$

A ação total da partícula $\mathcal{S}_{E,E}(t)$ determina o espectro de transmissão (2.32) na forma

$$\Gamma_0(E, E') = N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{E,E}(t)}, \quad (2.38)$$

e a chamaremos de agora em diante de expoente de tunelamento $\mathcal{S}_{E,E}(t)$. De acordo com a Eq. (2.38), o espectro de transmissão da partícula $\Gamma_0(E, E')$ pode ser calculado através da transformada de Fourier no parâmetro t do fator exponencial $e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{E,E}(t)}$. A representação (2.38) do espectro de transmissão é consequência da representação (1.18) da função delta de Dirac onde o parâmetro t foi introduzido. Como indicamos na seção 1.2, a função delta de Dirac impõe a condição de conservação de energia no sistema partícula - banho de osciladores.

No caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores ($C_\alpha = 0$ e portanto, $J(\omega) = 0$ (Eq. (1.30))), o expoente de tunelamento (2.37) não depende do parâmetro t e pode ser representado através de $\mathcal{S}_{E,E}$. Neste caso o espectro de transmissão (2.38) é dado por

$$\Gamma_0(E, E') = N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{E,E}} = N \delta(E - E') e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{E,E}}. \quad (2.39)$$

A função delta de Dirac nesta expressão mostra a conservação de energia para a partícula quando esta não interage com o banho de osciladores. Neste caso a probabilidade de transmissão da partícula é nula para uma energia final característica E' diferente da energia E que caracteriza o estado inicial da partícula.

O expoente de tunelamento (2.37) pode ser normalizado pelo seu valor no caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico ($U_1 = 0$). Representaremos o expoente de tunelamento neste caso através de $\mathcal{S}_{E,E}^{(0)}$, e chamaremos os tempos de travessia correspondentes através da barreira de $T_X^{(0)}$ e $T_Y^{(0)}$. Segundo a expressão (2.36) para a ação efetiva da partícula e a Eq. (2.33) para o expoente de tunelamento, temos que

$$\mathcal{S}_{E,E}^{(0)} = E T_X^{(0)} - E T_Y^{(0)} + \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 \left[\frac{m}{2} \dot{X}(t_1)^2 - U_0 \right] - \int_0^{T_Y^{(0)}} dt_1 \left[\frac{m}{2} \dot{Y}(t_1)^2 - U_0 \right].$$

Na região da barreira, de acordo com o caso limite de campo elétrico nulo e interação da partícula com o banho de osciladores também nula, analisado na seção 2.3, temos que $E - U_0 = \frac{m}{2} \dot{X}(t_1)^2$ e

$E - U_0 = \frac{m}{2} \dot{Y}(t_1)^2$. Desse modo podemos escrever

$$\mathcal{S}_{E,E}^{(0)} = \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 m \dot{X}(t_1)^2 - \int_0^{T_Y^{(0)}} dt_1 m \dot{Y}(t_1)^2 = \int_0^d dx m \dot{X}(x) - \int_0^d dx m \dot{Y}(x),$$

onde $\dot{X}(x)$ e $\dot{Y}(x)$ representam as velocidades em função da posição x na região da barreira. Das condições $E - U_0 = \frac{m}{2} \dot{X}(t_1)^2$ e $E - U_0 = \frac{m}{2} \dot{Y}(t_1)^2$ vemos que estas velocidades são na verdade constantes. Para $m \dot{X}(x)$ e $m \dot{Y}(x)$ temos $m \dot{X}(x)_{1,2} = \pm i \sqrt{2m(U_0 - E)}$ e $m \dot{Y}(x)_{1,2} = \pm i \sqrt{2m(U_0 - E)}$. Para ter uma diminuição no espectro de transmissão (2.39) com o aumento da altura U_0 da barreira, tomamos os valores $m \dot{X}(x) = +i \sqrt{2m(U_0 - E)}$ e $m \dot{Y}(x) = -i \sqrt{2m(U_0 - E)}$. Neste caso temos

$$\mathcal{S}_{E,E}^{(0)} = 2i \sqrt{2m(U_0 - E)} d, \quad (2.40)$$

e para o espectro de transmissão (2.39), que chamamos aqui de $\Gamma_0^{(0)}(E, E')$, temos

$$\Gamma_0^{(0)}(E, E') = N \delta(E - E') e^{-\frac{1}{\hbar} 2\sqrt{2m(U_0 - E)} d}. \quad (2.41)$$

Este resultado é consistente com o valor aproximado do coeficiente de transmissão da partícula através da barreira. No caso de uma barreira relativamente alta e/ou larga que satisfaz a condição $\kappa d \gg 1$, onde $\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$, a função de onda da partícula na região da barreira é dada por $\Psi(x) \approx C e^{-\kappa x}$. O coeficiente de transmissão pode ser estimado então através do valor $|\Psi(d)/\Psi(0)|^2 \approx e^{-2\kappa d}$ que reproduz o fator exponencial do espectro de transmissão (2.41).

A expressão (2.40) para o expoente de tunelamento quando não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico pode ser escrita como

$$\mathcal{S}_{E,E}^{(0)} = i \mathcal{S}_0, \quad (2.42)$$

onde

$$\mathcal{S}_0 = 2\sqrt{2m(U_0 - E)} d, \quad (2.43)$$

ou, de forma mais compacta, $\mathcal{S}_0 = 2\hbar\kappa d$. No caso mais geral dado pela Eq. (2.37), onde o campo elétrico e a interação da partícula com o banho de osciladores não são nulos, é conveniente introduzir o tempo

$$T_0 = \frac{d}{\frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{m}}, \quad (2.44)$$

em relação ao qual poderemos expressar os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira. Utilizando

a expressão (2.44) podemos substituir a largura d da barreira na Eq. (2.43) e obter

$$\mathcal{S}_0 = 4(U_0 - E)T_0. \quad (2.45)$$

Empregando a Eq. (2.44) podemos obter também

$$\mathcal{S}_0 = \frac{2md^2}{T_0}. \quad (2.46)$$

As duas últimas equações permitem então escrever o expoente de tunelamento (2.37) em relação a \mathcal{S}_0 na forma

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} = & \frac{\dot{X}(T_X^-) T_0}{4d} - \frac{\dot{Y}(T_Y^-) T_0}{4d} - \frac{T_X}{4T_0} + \frac{T_Y}{4T_0} + \frac{U_1}{2\mathcal{S}_0} \int_0^{T_X} dt_1 \frac{X(t_1)}{d} - \frac{U_1}{2\mathcal{S}_0} \int_0^{T_Y} dt_1 \frac{Y(t_1)}{d} \\ & + \frac{iT_0}{2m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} \left(1 - e^{-i\omega t}\right) \left[1 - i\frac{\omega}{2} \int_0^{T_X} dt_1 e^{i\omega(t_1 - T_X)} \frac{X(t_1)}{d} \right. \\ & \left. + i\frac{\omega}{2} \int_0^{T_Y} dt_1 e^{-i\omega(t_1 - T_Y)} \frac{Y(t_1)}{d} \right]. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Esta expressão permite reproduzir a Eq. (2.42) no caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico. Como vimos antes, as velocidades na região da barreira nesse caso são constantes e dadas por $\dot{X} = i\sqrt{2m(U_0 - E)}/m$ e $\dot{Y} = -i\sqrt{2m(U_0 - E)}/m$. Utilizando a Eq. (2.44) podemos escrever $\dot{X} = id/T_0$ e $\dot{Y} = -id/T_0$. Assim, para as velocidades $\dot{X}(T_X^-)$ e $\dot{Y}(T_Y^-)$ na Eq. (2.47) temos nesse caso $\dot{X}(T_X^-) = id/T_0$ e $\dot{Y}(T_Y^-) = -id/T_0$, e para os tempos de travessia T_X e T_Y temos $T_X = T_X^{(0)} = d/\dot{X} = -iT_0$ e $T_Y = T_Y^{(0)} = d/\dot{Y} = +iT_0$. Substituindo estas expressões na Eq. (2.47), a Eq. (2.42) pode ser obtida no caso $U_1 = 0$ e $J(\omega) = 0$.

A Eq. (2.47) nos leva à expressão (43) da Ref. 2 assumindo que $X(t_1) = Y(-t_1)$ e $T_X = -T_Y$ e considerando que nessa expressão o fator $1 - e^{-i\omega t}$ foi omitido na integral sobre ω . As condições $X(t_1) = Y(-t_1)$ e $T_X = -T_Y$ fazem parte das Eqs. (39) da Ref. 2 como propriedades gerais das trajetórias $X(t')$ e $Y(t')$. Porém, do estudo realizado desta referência, não ficou claro o procedimento seguido para derivar essas condições. A condição $T_X = -T_Y$ poderia ser resultante da condição $X(t_1) = Y(-t_1)$ dado que, segundo esta condição, os valores das trajetórias $X(t_1)$ e $Y(t_1)$ coincidem para instantes de tempo com sinais opostos. Como para T_X e T_Y temos $X(T_X) = d = Y(T_Y)$, poderíamos ter então $T_X = -T_Y$. Com respeito à condição $X(t_1) = Y(-t_1)$, de acordo com a Ref. 2, ela pode ser encontrada a partir das Eqs. (37) e (38) desse trabalho. Como veremos na subseção 2.3.4, os termos $X(t')/d$ e $Y(t')/d$ foram omitidos nas integrais sobre t' nas Eqs. (37) da Ref. 2. A substituição repetida desses termos nessas equações através das próprias Eqs. (37) sugere a validade da condição $X(t_1) = Y(-t_1)$ se assumimos

que $a_\omega(t) = b_\omega(t)$. As funções $a_\omega(t)$ e $b_\omega(t)$ são definidas nas Eqs. (38) do trabalho de Ueda² e também nas Eqs. (2.53) e (2.54) do presente trabalho. A condição $a_\omega(t) = b_\omega(t)$ faz parte também das Eqs. (39) da Ref. 2. Porém, de acordo com as Eqs. (38) dessa referência, $a_\omega(t)$ e $b_\omega(t)$ dependem das próprias trajetórias $X(t')$ e $Y(t')$. A condição $a_\omega(t) = b_\omega(t)$ poderia ser derivada assumindo a validade da mesma condição que queremos encontrar, $X(t_1) = Y(-t_1)$.

Como vimos anteriormente, no caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico, as velocidades na região da barreira são constantes e dadas por $\dot{X} = id/T_0$ e $\dot{Y} = -id/T_0$. Nesse caso, dadas as condições iniciais $X(0) = 0$ e $Y(0) = 0$, temos que $X(t_1) = (id/T_0)t_1$ e $Y(t_1) = (-id/T_0)t_1$ e portanto, a condição $X(t_1) = Y(-t_1)$ é satisfeita. Para os tempos de travessia temos que $T_X = T_X^{(0)} = -iT_0$ e $T_Y = T_Y^{(0)} = iT_0$ e portanto, a condição $T_X = -T_Y$ também é satisfeita. Na seção 2.4 estudaremos o caso de um campo elétrico fraco e uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores. Nesse caso veremos que considerando termos até primeira ordem no campo elétrico e na interação da partícula com o banho de osciladores, as condições $X(t_1) = Y(-t_1)$ e $T_X = -T_Y$ são também satisfeitas. Estes resultados sugerem que a validade geral das condições $X(t_1) = Y(-t_1)$ e $T_X = -T_Y$ poderia ser demonstrada seguindo um método indutivo. Porém, este método não foi desenvolvido no presente trabalho e não foi assumida a validade geral dessas condições. Assim, neste trabalho, em lugar da expressão (43) do trabalho de Ueda², utilizamos a Eq. (2.47) como expressão geral do expoente de tunelamento $\mathcal{S}_{E,E}(t)$.

2.3.3 Diferença entre a ação efetiva da partícula e o expoente de tunelamento

Para obter a Eq. (2.47) que nos leva à expressão (43) da Ref. 2 assumindo que $X(t_1) = Y(-t_1)$ e $T_X = -T_Y$, escrevemos o expoente de tunelamento (2.37) em relação a \mathcal{S}_0 . Por outro lado, de acordo com o trabalho de Ueda², a expressão (43) pode ser obtida simplificando a ação efetiva da partícula dada na Eq. (42) desse trabalho. Como indicamos antes, à Eq. (42) da Ref. 2 corresponde a expressão (2.35) do presente trabalho. Comparando as expressões para a ação efetiva da partícula (2.35) e o expoente de tunelamento (2.37) podemos ver que estas duas grandezas são diferentes, sendo a diferença entre ambas dada através do termo $ET_X - ET_Y$. Estas duas grandezas não são distinguidas entre si no trabalho de Ueda², sendo representadas da mesma forma nas Eqs. (42) e (43). Dado que para obter a Eq. (2.47) utilizamos o expoente de tunelamento (2.37) contendo o termo $ET_X - ET_Y$, concluímos que este termo foi introduzido no trabalho de Ueda² para derivar o expoente de tunelamento na expressão (43) a partir da ação efetiva da partícula (42). Porém, nenhuma explicação é dada nesse trabalho com respeito à origem desse termo.

Como vimos no presente trabalho, o termo da diferença entre a ação efetiva da partícula (2.35) e o expoente de tunelamento (2.37), dado por $ET_X - ET_Y$, pode ser obtido utilizando o método do tempo complexo. Este método produz o termo $E_1T_1 - E_2T_2$ na ação total da partícula (2.9) do qual pode ser derivado o termo $ET_X - ET_Y$. Como foi mostrado, os valores $E_1 = E$ e $E_2 = E$ são necessários para a existência de trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas, as quais permitem aproximar o espectro de transmissão da partícula. Adicionalmente, utilizando pacotes de

ondas relativamente bem localizados, ou seja, com uma dispersão relativamente pequena na coordenada, para descrever os estados inicial e final da partícula, podemos obter as Eqs. (2.29) e (2.30) para os tempos de duração $T_1 \rightarrow \bar{T}_1$ e $T_2 \rightarrow \bar{T}_2$. Estas equações permitem obter então o termo $ET_X - ET_Y$ onde T_X e T_Y são os tempos de travessia através da barreira dados por $T_X = t_d - t_0$ e $T_Y = \tilde{t}_d - \tilde{t}_0$.

2.3.4 Solução das equações de movimento na região da barreira

Para obter o expoente de tunelamento $\mathcal{S}_{E,E}(t)$ através da Eq. (2.47) e calcular o espectro de transmissão (2.38), devemos conhecer as trajetórias na região da barreira dadas por $X(t')$ e $Y(t')$. Para isso, consideramos as equações de movimento (2.18) e (2.19) nessa região. Considerando a forma do potencial $V(x)$ (Eq. (1.2)) e da função $g(x)$ (Eq. (1.5)) e utilizando as relações entre as trajetórias $\bar{x}_c(t')$ e $\tilde{\bar{x}}_c(t')$ e as trajetórias $X(t')$ e $Y(t')$, dadas por $\bar{x}_c(t_2 + t_0) = X(t_2)$ e $\tilde{\bar{x}}_c(t_2 + \tilde{t}_0) = Y(t_2)$, temos

$$\begin{aligned}
m\ddot{X}(t_1) = & -V'[X(t_1)] - \mu X(t_1) \\
& + i \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left[\int_0^{T_X} dt_2 e^{-i\omega|t_1 - t_2|} X(t_2) \right. \\
& \left. - \int_0^{T_Y} dt_2 e^{i\omega(T_Y - T_X)} e^{-i\omega(t_2 - t_1 + t)} Y(t_2) \right] \\
& + d \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} (1 - e^{-i\omega t}) e^{i\omega(t_1 - T_X)},
\end{aligned} \tag{2.48}$$

e

$$\begin{aligned}
m\ddot{Y}(t_1) = & -V'[Y(t_1)] - \mu Y(t_1) \\
& - i \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \left[\int_0^{T_Y} dt_2 e^{i\omega|t_1 - t_2|} Y(t_2) \right. \\
& \left. - \int_0^{T_X} dt_2 e^{i\omega(T_Y - T_X)} e^{-i\omega(t_1 - t_2 + t)} X(t_2) \right] \\
& + d \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} (1 - e^{-i\omega t}) e^{-i\omega(t_1 - T_Y)}.
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Estas expressões correspondem às equações de movimento (32) da Ref. 2 onde, na equação para a trajetória $Y(t_1)$, os sinais dos coeficientes das integrais sobre ω devem ser corrigidos.

Utilizando a Eq. (1.3) para o potencial $V(x)$ na região da barreira, podemos escrever as equações de

movimento (2.48) e (2.49) na forma

$$\begin{aligned} \frac{\ddot{X}(t_1)}{d} &= u_1 - \frac{1}{m} \mu \frac{X(t_1)}{d} + \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \int_0^{t_1} dt_2 \sin \omega (t_1 - t_2) \frac{X(t_2)}{d} \\ &+ \frac{1}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} e^{i\omega t_1} a_\omega(t), \end{aligned} \quad (2.50)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\ddot{Y}(t_1)}{d} &= u_1 - \frac{1}{m} \mu \frac{Y(t_1)}{d} + \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \int_0^{t_1} dt_2 \sin \omega (t_1 - t_2) \frac{Y(t_2)}{d} \\ &+ \frac{1}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} e^{-i\omega t_1} b_\omega(t), \end{aligned} \quad (2.51)$$

onde

$$u_1 = \frac{U_1}{md^2} = \frac{2U_1}{\mathcal{S}_0 T_0}, \quad (2.52)$$

$$\begin{aligned} a_\omega(t) &= i\omega \int_0^{T_X} dt_1 e^{-i\omega t_1} \frac{X(t_1)}{d} - i\omega \int_0^{T_Y} dt_1 e^{-i\omega (t_1 + t + T_X - T_Y)} \frac{Y(t_1)}{d} \\ &+ (1 - e^{-i\omega t}) e^{-i\omega T_X}, \end{aligned} \quad (2.53)$$

e

$$\begin{aligned} b_\omega(t) &= -i\omega \int_0^{T_Y} dt_1 e^{i\omega t_1} \frac{Y(t_1)}{d} + i\omega \int_0^{T_X} dt_1 e^{i\omega (t_1 - t - T_X + T_Y)} \frac{X(t_1)}{d} \\ &+ (1 - e^{-i\omega t}) e^{i\omega T_Y}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Na segunda igualdade da expressão (2.52) consideramos a Eq. (2.46). As Eqs. (2.53) e (2.54) correspondem às expressões (38) da Ref. 2 onde, na expressão para $b_\omega(t)$, o limite superior da primeira integral sobre t' deve ser corrigido.

As trajetórias $X(t')$ e $Y(t')$ nas equações de movimento (2.50) e (2.51) satisfazem as condições iniciais $X(0) = 0$ e $Y(0) = 0$ devendo ser determinadas as velocidades iniciais correspondentes na região da barreira. Representaremos estas velocidades através de $\dot{X}(0^+)$ e $\dot{Y}(0^+)$ onde 0^+ representa um instante de tempo infinitamente próximo de 0, depois de ser alcançado o limite da barreira $x = 0$. As velocidades iniciais $\dot{X}(0^+)$ e $\dot{Y}(0^+)$ podem ser encontradas utilizando as equações das energias (2.21) e (2.22) como constantes de movimento. Procedendo de maneira similar ao caso limite de campo elétrico nulo e interação da partícula com o banho de osciladores também nula, analisado na seção 2.3, podemos obter

$E = \frac{m}{2}\dot{X}(0^+)^2 + U_0$ e $E = \frac{m}{2}\dot{Y}(0^+)^2 + U_0$. Assim, utilizando a Eq. (2.44), temos $\dot{X}(0^+)_{1,2} = \pm id/T_0$ e $\dot{Y}(0^+)_{1,2} = \pm id/T_0$. No caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico, visto na subseção 2.3.2, para ter uma diminuição no espectro de transmissão com o aumento da altura U_0 da barreira, tomamos os valores constantes na região da barreira $\dot{X} = +id/T_0$ e $\dot{Y} = -id/T_0$. Para ser consistentes com esse caso tomamos então os valores

$$\dot{X}(0^+) = +id/T_0, \quad (2.55)$$

e

$$\dot{Y}(0^+) = -id/T_0. \quad (2.56)$$

Utilizando as velocidades iniciais (2.55) e (2.56) na região da barreira e as condições $X(0) = 0$ e $Y(0) = 0$, podemos obter uma solução das equações de movimento (2.50) e (2.51) integrando-as diretamente duas vezes. Desse modo temos

$$\begin{aligned} \frac{X(t_1)}{d} &= i \frac{t_1}{T_0} + \frac{u_1}{2} t_1^2 - \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} \int_0^{t_1} dt_2 \sin \omega (t_1 - t_2) \frac{X(t_2)}{d} \\ &\quad - \frac{1}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left(e^{i\omega t_1} - i\omega t_1 - 1 \right) a_\omega(t), \end{aligned} \quad (2.57)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{Y(t_1)}{d} &= -i \frac{t_1}{T_0} + \frac{u_1}{2} t_1^2 - \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} \int_0^{t_1} dt_2 \sin \omega (t_1 - t_2) \frac{Y(t_2)}{d} \\ &\quad - \frac{1}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left(e^{-i\omega t_1} + i\omega t_1 - 1 \right) b_\omega(t). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Estas equações correspondem às expressões (37) da Ref. 2 onde, como indicamos antes, os termos $X(t')/d$ e $Y(t')/d$ foram omitidos nas integrais sobre t' .

As Eqs. (2.55) e (2.56) que permitiram derivar as soluções (2.57) e (2.58) das equações de movimento, correspondem à expressão (35) da Ref. 2. Elas foram derivadas nessa referência identificando as energias associadas às trajetórias $X(t')$ e $Y(t')$ com a energia incidente E da partícula. Essa identificação foi introduzida no trabalho de Ueda² para ser consistente com o resultado WKB. Também na Ref. 2, a escolha de sinais das velocidades iniciais na região da barreira na expressão (35) foi feita para assegurar que a função de onda decaia na região da barreira.

No presente trabalho, as trajetórias $X(t')$ e $Y(t')$ correspondem às trajetórias clássicas especiais com coordenadas iniciais negativas, $\bar{x}_c(t')$ e $\bar{\tilde{x}}_c(t')$, na região da barreira. Assim, para deduzir as velocidades iniciais (2.55) e (2.56) nessa região, utilizamos as equações das energias (2.21) e (2.22) como constantes

de movimento considerando um instante de tempo antes de ser alcançado o limite da barreira $x = 0$ e um outro instante de tempo infinitamente próximo de 0, depois de ser alcançado esse limite. Também empregamos as Eqs. (2.23) que indicam que os momentos iniciais das trajetórias clássicas especiais são iguais ao momento médio $p_i = \sqrt{2mE}$ do pacote de ondas incidente. Com respeito aos sinais das velocidades iniciais (2.55) e (2.56), sua escolha foi baseada no comportamento do espectro de transmissão no caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico, estudado na subseção 2.3.2.

As soluções (2.57) e (2.58) das equações de movimento contêm as próprias trajetórias que queremos determinar, $X(t')$ e $Y(t')$, nas integrais mostradas explicitamente nessas soluções e também nas integrais que aparecem nas expressões (2.53) e (2.54) para $a_\omega(t)$ e $b_\omega(t)$. Estas expressões contêm ambas trajetórias e portanto, as Eqs. (2.57) e (2.58) formam um sistema de equações integrais¹⁰ acopladas. No trabalho de Ueda² foi utilizada a transformada de Laplace para obter uma solução exata destas equações, sendo elas também desacopladas utilizando a condição $X(t_1) = Y(-t_1)$ como propriedade geral das soluções (2.57) e (2.58).

Como indicado no final da subseção 2.3.2, do estudo realizado da Ref. 2 não ficou claro o procedimento seguido para derivar a condição $X(t_1) = Y(-t_1)$ e no presente trabalho não foi assumida a validade geral desta condição. Neste caso, um procedimento alternativo, similar ao utilizado na Ref. 2 mas sem o uso da condição $X(t_1) = Y(-t_1)$, poderia ser sugerido. Neste procedimento, a transformada de Laplace seria empregada para obter uma solução exata das Eqs. (2.57) e (2.58) em função de $a_\omega(t)$ e $b_\omega(t)$, as quais, seguindo o trabalho de Ueda², seriam determinadas substituindo as próprias soluções $X(t_1)$ e $Y(t_1)$ obtidas com a transformada de Laplace nas Eqs. (2.53) e (2.54) para $a_\omega(t)$ e $b_\omega(t)$. Como pode ser visto nestas últimas equações, os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira também devem ser determinados e para isso utilizaríamos as condições $X(T_X) = d$ e $Y(T_Y) = d$.

O procedimento alternativo descrito anteriormente para resolver as equações integrais (2.57) e (2.58) sem empregar a condição $X(t_1) = Y(-t_1)$, mas utilizando a transformada de Laplace é porém, controverso. A transformada de Laplace é um método de grande utilidade na resolução de equações integrais e se apresenta como um método conveniente no caso das Eqs. (2.57) e (2.58) dada a possibilidade de utilizar o teorema da convolução¹⁰. Porém, a aplicação deste método às Eqs. (2.57) e (2.58) é polêmica dado que o tempo t_1 deve tomar valores no plano complexo, fora do eixo real, para descrever o tunelamento da partícula por meio de trajetórias clássicas reais $X(t_1)$ e $Y(t_1)$. Por outro lado, na definição habitual¹¹ da transformada de Laplace de uma função $F(t_1)$, é assumido que t_1 é uma variável real.

A aplicação na forma habitual da transformada de Laplace para resolver as Eqs. (2.57) e (2.58) garante a validade das soluções obtidas somente no caso em que o tempo t_1 toma valores reais. Na Ref. 2, dada a condição $X(t_1) = Y(-t_1)$, é obtida a trajetória $X(t_1)$ invertendo a transformada de Laplace desta trajetória nos casos de um banho de osciladores com uma única frequência e de um banho ôhmico. Um banho de osciladores com uma única frequência é descrito por uma função de densidade espectral $J(\omega') = \pi m \gamma \omega^3 \delta(\omega' - \omega)$ e um banho ôhmico de osciladores é caracterizado por uma função de densidade espectral $J(\omega) = m \eta \omega$. Neste último caso, somente quando assumimos valores reais e positivos para t_1 ,

conseguimos verificar que a solução obtida na Ref. 2 para $X(t_1)$ (Eq. (67)), é de fato solução da Eq. (2.57) do presente trabalho. Valores positivos de t_1 estão de acordo também com a definição habitual¹¹ da transformada de Laplace, sendo esta dada por uma integração sobre t_1 na parte positiva do eixo real.

Para valores somente reais do tempo t_1 de evolução das trajetórias $X(t_1)$ e $Y(t_1)$, os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira podem tomar valores somente reais. Porém, os tempos de travessia obtidos na Ref. 2, tanto no caso de um banho de osciladores com uma única frequência como no caso de um banho ôhmico, são complexos, fora do eixo real. Como indicamos na subseção 2.3.2, além da condição $X(t_1) = Y(-t_1)$, na Ref. 2 é utilizada também a expressão $T_X = -T_Y$ como propriedade geral das soluções (2.57) e (2.58). Nesse caso, somente um dos tempos de travessia, T_X ou T_Y , precisa ser determinado. Valores não reais para o tempo de travessia T_X através da barreira, chamado simplesmente de T , são obtidos na Eq. (54) da Ref. 2 para um banho de osciladores com uma única frequência e na Eq. (72) dessa referência no caso de um banho ôhmico.

No presente trabalho queremos descrever o tunelamento da partícula por meio de trajetórias clássicas reais $X(t_1)$ e $Y(t_1)$ que evoluem no tempo complexo t_1 . A necessidade de considerar valores reais e positivos para t_1 ao comprovar a validade da solução $X(t_1)$ da Ref. 2 no caso de um banho ôhmico de osciladores sugere que a aplicação na forma habitual do método da transformada de Laplace não é apropriada em nosso caso. Adicionalmente, valores complexos para os tempos de travessia através da barreira obtidos na Ref. 2 tanto no caso de um banho de osciladores com uma única frequência como no caso de um banho ôhmico, não são compatíveis com valores somente reais do tempo t_1 , como é assumido na definição habitual da transformada de Laplace. Devido a estas observações, no presente trabalho não aplicamos o método da transformada de Laplace para resolver as Eqs. (2.57) e (2.58).

Pode ser observado também que aprendemos recentemente acerca de uma definição mais ampla da transformada de Laplace do que a definição tradicional. Esta transformada, na forma que é definida tradicionalmente¹¹, é chamada no livro de Colombo¹² de transformada de Laplace - Abel unilateral, sendo esta considerada um caso particular da transformada geral de Laplace. De acordo com a Ref. 12, a transformada geral de Laplace de uma função $F(t_1)$ é definida através de uma integração sobre um contorno no plano da variável complexa t_1 . Esta definição mais geral da transformada de Laplace abre uma nova possibilidade de utilizar esta transformada para obter uma solução exata das Eqs. (2.57) e (2.58) para valores complexos do tempo t_1 . Porém, no momento não exploramos esta possibilidade.

Embora possamos utilizar o método da transformada de Laplace para obter uma solução exata das Eqs. (2.57) e (2.58), podemos notar ainda um inconveniente neste procedimento. Como pode ser visto na Eq. (40) da Ref. 2, para inverter a transformada da Laplace $\tilde{X}(s)$ da trajetória $X(t_1)$ precisamos conhecer primeiro a função de densidade espectral $J(\omega)$ do banho de osciladores. Desse modo, os resultados obtidos a partir desse ponto são válidos somente para cada tipo de banho de osciladores assim especificado.

2.4 Campo elétrico fraco e interação fraca da partícula com o banho de osciladores

Neste trabalho não resolvemos de maneira exata as Eqs. (2.57) e (2.58), mas consideramos uma solução aproximada destas equações no caso de um campo elétrico fraco e uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores. Este procedimento permite obter expressões aproximadas para as trajetórias $X(t_1)$ e $Y(t_1)$ que são válidas para um banho de osciladores com uma função de densidade espectral $J(\omega)$ arbitrária. Em consequência, resultados também aproximados mas com a mesma validade geral podem ser obtidos para os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira, o expoente de tunelamento $\mathcal{S}_{E,E}(t)$ na Eq. (2.47) e o espectro de transmissão da partícula dado pela Eq. (2.38).

A consideração do caso de um campo elétrico fraco e uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores é aparentemente necessária ainda no caso que pudéssemos contar primeiro com uma solução exata das Eqs. (2.57) e (2.58). Isto é devido à dificuldade que existe em determinar os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira. Estes tempos de travessia são determinados a partir das soluções das Eqs. (2.57) e (2.58) utilizando as condições $X(T_X) = d$ e $Y(T_Y) = d$. Essas soluções dependem inevitavelmente das funções $a_\omega(t)$ e $b_\omega(t)$ dadas pelas Eqs. (2.53) e (2.54). Estas funções dependem dos próprios tempos de travessia T_X e T_Y que queremos determinar, o que dificulta o cálculo destes parâmetros.

No trabalho de Ueda² também foi considerado o caso de um campo elétrico fraco e uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores. Porém, isto foi feito separadamente para cada um dos dois tipos de banho de osciladores estudados, aproximando a trajetória exata $X(t_1)$ obtida em cada caso após utilizar a transformada de Laplace. Assim, no caso considerado na Ref. 2 de um campo elétrico fraco e uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores, não foram obtidos resultados válidos para um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária.

Podemos obter uma solução aproximada das Eqs. (2.57) e (2.58) no caso de um campo elétrico fraco e uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores utilizando as soluções dessas equações no caso em que não há campo elétrico ($U_1 = 0$ e portanto, $u_1 = 0$ (Eqs. (2.52))) nem interação da partícula com o banho de osciladores ($C_\alpha = 0$ e portanto, $J(\omega) = 0$ (Eq. (1.30))). Chamaremos essas soluções de $\frac{X^{(0)}(t_1)}{d}$ e $\frac{Y^{(0)}(t_1)}{d}$. Segundo as Eqs. (2.57) e (2.58) temos

$$\frac{X^{(0)}(t_1)}{d} = i \frac{t_1}{T_0}, \quad (2.59)$$

e

$$\frac{Y^{(0)}(t_1)}{d} = -i \frac{t_1}{T_0}, \quad (2.60)$$

o que também está de acordo com os resultados $X(t_1) = (id/T_0)t_1$ e $Y(t_1) = (-id/T_0)t_1$ obtidos no mesmo caso no final da subseção 2.3.2.

No caso de um campo elétrico fraco ($u_1 \approx 0$) e uma interação fraca da partícula com o banho de

osciladores ($J(\omega) \approx 0$) consideramos as soluções das Eqs. (2.57) e (2.58) até primeira ordem em u_1 e $J(\omega)$, dadas por

$$\begin{aligned} \frac{X(t_1)}{d} &= i \frac{t_1}{T_0} + \frac{u_1}{2} t_1^2 - \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} \int_0^{t_1} dt_2 \sin \omega (t_1 - t_2) \frac{X^{(0)}(t_2)}{d} \\ &\quad - \frac{1}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left(e^{i\omega t_1} - i\omega t_1 - 1 \right) a_\omega^{(0)}(t), \end{aligned} \quad (2.61)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{Y(t_1)}{d} &= -i \frac{t_1}{T_0} + \frac{u_1}{2} t_1^2 - \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} \int_0^{t_1} dt_2 \sin \omega (t_1 - t_2) \frac{Y^{(0)}(t_2)}{d} \\ &\quad - \frac{1}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left(e^{-i\omega t_1} + i\omega t_1 - 1 \right) b_\omega^{(0)}(t), \end{aligned} \quad (2.62)$$

onde $\frac{X^{(0)}(t_2)}{d}$ e $\frac{Y^{(0)}(t_2)}{d}$ são dadas pelas Eqs. (2.59) e (2.60). Nas expressões (2.61) e (2.62), $a_\omega^{(0)}(t)$ e $b_\omega^{(0)}(t)$ correspondem às funções $a_\omega(t)$ e $b_\omega(t)$ na ausência de campo elétrico e interação da partícula com o banho de osciladores. De acordo com as Eqs. (2.53) e (2.54) temos

$$\begin{aligned} a_\omega^{(0)}(t) &= i\omega \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 e^{-i\omega t_1} \frac{X^{(0)}(t_1)}{d} - i\omega \int_0^{T_Y^{(0)}} dt_1 e^{-i\omega (t_1 + t + T_X^{(0)} - T_Y^{(0)})} \frac{Y^{(0)}(t_1)}{d} \\ &\quad + \left(1 - e^{-i\omega t} \right) e^{-i\omega T_X^{(0)}}, \end{aligned} \quad (2.63)$$

e

$$\begin{aligned} b_\omega^{(0)}(t) &= -i\omega \int_0^{T_Y^{(0)}} dt_1 e^{i\omega t_1} \frac{Y^{(0)}(t_1)}{d} + i\omega \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 e^{i\omega (t_1 - t - T_X^{(0)} + T_Y^{(0)})} \frac{X^{(0)}(t_1)}{d} \\ &\quad + \left(1 - e^{-i\omega t} \right) e^{i\omega T_Y^{(0)}}, \end{aligned} \quad (2.64)$$

onde $T_X^{(0)}$ e $T_Y^{(0)}$ são os tempos de travessia através da barreira no caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico. Estes tempos de travessia foram obtidos logo depois da Eq. (2.47), sendo dados por

$$T_X^{(0)} = -iT_0, \quad (2.65)$$

e

$$T_Y^{(0)} = iT_0, \quad (2.66)$$

e podendo ser obtidos também a partir das Eqs. (2.59) e (2.60) utilizando as condições $X^{(0)}(T_X^{(0)}) = d$ e $Y^{(0)}(T_Y^{(0)}) = d$.

As Eqs. (2.59), (2.60), (2.65) e (2.66) permitem relacionar as funções $a_\omega^{(0)}(t)$ e $b_\omega^{(0)}(t)$ e em consequência, as trajetórias $X(t_1)$ e $Y(t_1)$. De acordo com essas equações temos

$$Y^{(0)}(t_1) = X^{(0)}(-t_1), \quad (2.67)$$

e

$$T_Y^{(0)} = -T_X^{(0)}, \quad (2.68)$$

de onde podemos relacionar as Eqs. (2.63) e (2.64) na forma

$$b_\omega^{(0)}(t) = a_\omega^{(0)}(t), \quad (2.69)$$

e utilizando esta relação e a Eq. (2.67) podemos relacionar também as expressões (2.61) e (2.62) na forma

$$\frac{Y(t_1)}{d} = \frac{X(-t_1)}{d}. \quad (2.70)$$

Assim, no presente trabalho verificamos na Eq. (2.69) a validade da condição $a_\omega(t) = b_\omega(t)$ até ordem zero no campo elétrico e na interação da partícula com o banho de osciladores, ou seja, $u_1 = 0$ e $J(\omega) = 0$. Também, na Eq. (2.70) verificamos a validade da condição $X(t_1) = Y(-t_1)$ até primeira ordem em u_1 e $J(\omega)$. Como indicamos no final da subseção 2.3.2, as condições $a_\omega(t) = b_\omega(t)$ e $X(t_1) = Y(-t_1)$ fazem parte das Eqs. (39) da Ref. 2 como propriedades gerais das trajetórias $X(t')$ e $Y(t')$.

De acordo com as expressões (2.69) e (2.70), precisamos determinar somente uma das funções $a_\omega^{(0)}(t)$ e $b_\omega^{(0)}(t)$ e uma das trajetórias $X(t_1)$ e $Y(t_1)$. Substituindo as Eqs. (2.59), (2.60), (2.65) e (2.66) na expressão (2.63) podemos obter

$$a_\omega^{(0)}(t) = \frac{1}{\omega T_0} \left(1 - e^{-\omega T_0}\right) \left(1 - e^{-\omega T_0} e^{-i\omega t}\right), \quad (2.71)$$

e substituindo esta equação e a (2.59) na expressão (2.61) para a trajetória $X(t_1)$ obtemos

$$\begin{aligned} \frac{X(t_1)}{d} = & i \frac{t_1}{T_0} + \frac{u_1}{2} t_1^2 - i \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left[\frac{t_1}{T_0} - \frac{\sin \omega t_1}{\omega T_0} - \frac{i}{2} \left(e^{i\omega t_1} - i\omega t_1 - 1 \right) \right. \\ & \left. \times \frac{1 - e^{-\omega T_0}}{\omega T_0} \left(1 - e^{-\omega T_0} e^{-i\omega t} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.72)$$

A expressão (2.71) corresponde à Eq. (52) da Ref. 2, obtida no caso de um banho de osciladores com uma única frequência, e também à Eq. (71) dessa referência, obtida no caso de um banho ôhmico. A expressão (2.71) pode ser obtida simplificando a Eq. (52) da Ref. 2. A Eq. (71) dessa referência deve

ser corrigida dado que ela representa a função $a_\omega^{(0)}(t)$ e portanto, corresponde ao caso em que não há campo elétrico nem interação da partícula com o banho de osciladores. Assim, na Eq. (71) da Ref. 2, o tempo de travessia T_X através da barreira, chamado de T como indicado antes, deve ser substituído por $T_X^{(0)} = -iT_0$, obtendo-se então novamente a Eq. (2.71) do presente trabalho. A presença na Ref. 2 de duas expressões diferentes (Eqs. (52) e (71)) para a função $a_\omega^{(0)}(t)$, uma expressão para cada tipo de banho de osciladores, não é consistente do ponto de vista físico. A função $a_\omega^{(0)}(t)$ corresponde a uma interação nula da partícula com o banho de osciladores e portanto, não depende do tipo de banho de osciladores estudado. Assim, no presente trabalho expressamos a função $a_\omega^{(0)}(t)$ através de uma única equação dada pela expressão (2.71).

As trajetórias $X(t_1)$ e $Y(t_1)$ permitem determinar o expoente de tunelamento $\mathcal{S}_{E,E}(t)$ na Eq. (2.47) e calcular então o espectro de transmissão (2.38). Utilizando as Eqs. (2.67) e (2.68) podemos escrever a Eq. (2.47) até primeira ordem no campo elétrico e na interação da partícula na forma

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} = & \frac{\dot{X}(T_X^-) T_0}{4d} - \frac{\dot{Y}(T_Y^-) T_0}{4d} - \frac{T_X}{4T_0} + \frac{T_Y}{4T_0} + \frac{U_1}{\mathcal{S}_0} \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 \frac{X^{(0)}(t_1)}{d} \\ & + \frac{iT_0}{2m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} (1 - e^{-i\omega t}) \left[1 - i\omega \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 e^{i\omega(t_1 - T_X^{(0)})} \frac{X^{(0)}(t_1)}{d} \right], \end{aligned} \quad (2.73)$$

onde as velocidades $\dot{X}(T_X^-)$ e $\dot{Y}(T_Y^-)$ e os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira devem ser determinados até primeira ordem em u_1 e $J(\omega)$.

As velocidades $\dot{X}(T_X^-)$ e $\dot{Y}(T_Y^-)$ na Eq. (2.73) podem ser obtidas derivando as Eqs. (2.72) e (2.70), sendo que $\dot{X}(T_X^-) = \dot{X}(T_X)$ e $\dot{Y}(T_Y^-) = \dot{Y}(T_Y)$. Da Eq. (2.70) obtemos $\dot{Y}(t_1) = -\dot{X}(-t_1)$ e portanto, $\dot{Y}(T_Y) = -\dot{X}(-T_Y)$. Assim, as velocidades $\dot{X}(T_X^-)$ e $\dot{Y}(T_Y^-)$ podem ser obtidas através da Eq. (2.72) como $\dot{X}(T_X^-) = \dot{X}(T_X)$ e $\dot{Y}(T_Y^-) = -\dot{X}(-T_Y)$. Derivando a Eq. (2.72) podemos obter estas velocidades até primeira ordem em u_1 e $J(\omega)$ como $\dot{X}(T_X^-) = \dot{X}(T_X) = \dot{X}(T_X^{(0)})$ e $\dot{Y}(T_Y^-) = -\dot{X}(-T_Y) = -\dot{X}(-T_Y^{(0)}) = -\dot{X}(T_X^{(0)})$, onde na última igualdade utilizamos a Eq. (2.68). Assim, na Eq. (2.73) temos que $\dot{Y}(T_Y^-) = -\dot{X}(T_X^{(0)}) = -\dot{X}(T_X^-) = -\dot{X}(T_X)$ e portanto,

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} = & \frac{\dot{X}(T_X) T_0}{2d} - \frac{T_X}{4T_0} + \frac{T_Y}{4T_0} + \frac{U_1}{\mathcal{S}_0} \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 \frac{X^{(0)}(t_1)}{d} \\ & + \frac{iT_0}{2m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} (1 - e^{-i\omega t}) \left[1 - i\omega \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 e^{i\omega(t_1 - T_X^{(0)})} \frac{X^{(0)}(t_1)}{d} \right], \end{aligned} \quad (2.74)$$

onde, considerando as expressões (2.65) e (2.52), podemos obter a partir da Eq. (2.72)

$$\frac{\dot{X}(T_X) T_0}{d} = \frac{\dot{X}(T_X^{(0)}) T_0}{d} = i \left[1 - 2 \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{1}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} e^{-i\omega t} (1 - e^{-\omega T_0})^2 \right]. \quad (2.75)$$

Para $U_1 = 0$ e $J(\omega) = 0$, esta expressão reproduz o resultado $\dot{X}(T_X) = \dot{X}(T_X^-) = id/T_0$ obtido logo depois da Eq. (2.47).

2.4.1 Os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira e o método do tempo complexo

Os tempos de travessia T_X e T_Y na Eq. (2.74) podem ser determinados a partir das Eqs. (2.72) e (2.70) utilizando as condições $X(T_X) = d$ e $Y(T_Y) = d$. Da Eq. (2.70) temos que $Y(T_Y) = X(-T_Y)$ e portanto podemos determinar T_X e T_Y através da Eq. (2.72) utilizando as condições $X(T_X) = d$ e $X(-T_Y) = d$. Desse modo, considerando as expressões (2.65) e (2.52), podemos obter

$$\begin{aligned} \frac{T_X}{T_0} = -i \left\{ 1 + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left\{ 1 - \frac{1 - e^{-\omega T_0}}{2\omega T_0} \right. \right. \\ \left. \left. \times \left[2 + \omega T_0 + e^{-i\omega t} (1 - e^{-\omega T_0} - \omega T_0 e^{-\omega T_0}) \right] \right\} \right\}, \end{aligned} \quad (2.76)$$

e, considerando a Eq. (2.68), podemos ver que

$$T_Y = -T_X. \quad (2.77)$$

Para $U_1 = 0$ e $J(\omega) = 0$, as Eqs. (2.76) e (2.77) reproduzem as expressões (2.65) e (2.66). Na Eq. (2.77) verificamos a validade da condição $T_X = -T_Y$ até primeira ordem no campo elétrico e na interação da partícula com o banho de osciladores. Como indicamos no final da subseção 2.3.2, a condição $T_X = -T_Y$ faz parte das Eqs. (39) da Ref. 2 como propriedade geral das trajetórias $X(t')$ e $Y(t')$.

Segundo a Eq. (2.77) podemos escrever a expressão (2.74) na forma

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} = \frac{\dot{X}(T_X) T_0}{2d} - \frac{T_X}{2T_0} + \frac{U_1}{\mathcal{S}_0} \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 \frac{X^{(0)}(t_1)}{d} \\ + \frac{iT_0}{2m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^2} (1 - e^{-i\omega t}) \left[1 - i\omega \int_0^{T_X^{(0)}} dt_1 e^{i\omega(t_1 - T_X^{(0)})} \frac{X^{(0)}(t_1)}{d} \right]. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Esta equação corresponde à expressão (43) da Ref. 2 até primeira ordem no campo elétrico e na interação

da partícula com o banho de osciladores. Como indicamos no final da subseção 2.3.2, devemos considerar que nessa expressão da Ref. 2 o fator $1 - e^{-i\omega t}$ foi omitido na integral sobre ω .

Os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira nas Eqs. (2.76) e (2.77) tomam valores no plano complexo, fora do eixo real. Nessas expressões consideramos o caso de uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores ($J(\omega) \approx 0$) e portanto, a influência da integral sobre ω na Eq. (2.76) é relativamente pequena. Desse modo, T_X e T_Y nas Eqs. (2.76) e (2.77) tomam valores na metade inferior e superior, respectivamente, do plano complexo. De acordo com a expressão Eq. (2.77), T_X e T_Y estão relacionados entre si através de uma reflexão em relação à origem do plano complexo. Os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira foram introduzidos na expressão (2.35) na forma $T_X = t_d - t_0$ e $T_Y = \tilde{t}_d - \tilde{t}_0$ e portanto, de acordo com as Eqs. (2.29) e (2.30), os tempos de duração \bar{T}_1 e \bar{T}_2 também tomam valores na metade inferior e superior, respectivamente, do plano complexo.

Como indicamos na seção 2.2, os tempos \bar{T}_1 e \bar{T}_2 correspondem aos tempos de duração T_1 e T_2 das trajetórias $\bar{x}_c(t')$ e $\tilde{x}_c(t')$, respectivamente, para os quais a ação total da partícula (2.9) é estacionária. Valores de T_1 e T_2 fora do eixo real podem ser introduzidos no espectro de transmissão (1.22) deformando os contornos de integração para T_1 e T_2 sobre a parte positiva do eixo real e efetuando as integrações sobre T_1 e T_2 ao longo de contornos arbitrários onde as amplitudes de transição

$\prod_{\alpha} \langle x_{\alpha}^f | \langle X_f | e^{-\frac{i}{\hbar} H T_1} | X_i \rangle \prod_{\alpha} | x_{\alpha}^i \rangle$ e $\prod_{\alpha} \langle y_{\alpha}^i | \langle Y_i | e^{-\frac{i}{\hbar} H T_2} | Y_f \rangle \prod_{\alpha} | y_{\alpha}^f \rangle$, respectivamente, sejam analíticas. Como indicamos na subseção 1.4.1, no presente trabalho assumimos que no caso da primeira dessas amplitudes, o domínio de definição no tempo T_1 pode ser estendido a valores de T_1 na metade inferior do plano complexo e no caso da segunda dessas amplitudes, assumimos que o domínio de definição no tempo T_2 pode ser estendido a valores deste parâmetro na metade superior do plano complexo. Assim, valores do tempo de duração \bar{T}_1 e do tempo de travessia T_X na metade inferior do plano complexo são compatíveis com uma continuação analítica nessa região para a amplitude de transição $\prod_{\alpha} \langle x_{\alpha}^f | \langle X_f | e^{-\frac{i}{\hbar} H T_1} | X_i \rangle \prod_{\alpha} | x_{\alpha}^i \rangle$ e, similarmente, valores do tempo de duração \bar{T}_2 e do tempo de travessia T_Y na metade superior do plano complexo são compatíveis com uma continuação analítica nessa região para a amplitude de transição $\prod_{\alpha} \langle y_{\alpha}^i | \langle Y_i | e^{-\frac{i}{\hbar} H T_2} | Y_f \rangle \prod_{\alpha} | y_{\alpha}^f \rangle$.

Como indicamos na subseção 2.3.4, valores não reais para o tempo de travessia T_X através da barreira, chamado de T , são obtidos na Eq. (54) da Ref. 2 para um banho de osciladores com uma única frequência e na Eq. (72) dessa referência no caso de um banho ôhmico. Esses valores não reais são obtidos como consequência da condição de tunelamento $E < U_0$. Esta condição produz valores imaginários para as velocidades iniciais na região da barreira na expressão (35) da Ref. 2 e nas Eqs. (2.55) e (2.56) do presente trabalho. Porém, nenhum argumento é dado na Ref. 2 para justificar valores não reais do tempo de travessia T_X no formalismo apresentado de tempo real.

Os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira foram obtidos utilizando as condições $X(T_X) = d$ e $Y(T_Y) = d$. Assim, esses tempos foram determinados a partir dos valores dados da coordenada nesses

instantes. No trabalho de McLaughlin³, onde o método do tempo complexo descrito na seção 1.3 do presente trabalho é introduzido, o tunelamento da partícula é caracterizado através de uma trajetória clássica onde a coordenada toma valores somente reais, iguais às posições na região da barreira, e os instantes de tempo correspondentes são determinados a partir desses valores dados da coordenada. Seguindo o trabalho de McLaughlin³, consideramos que a coordenada nas trajetórias $X(t_1)$ e $Y(t_1)$ toma valores somente reais entre 0 e a largura d da barreira e, de maneira similar aos tempos de travessia T_X e T_Y , determinamos os instantes de tempo correspondentes t_1 a partir desses valores dados da coordenada.

Definindo p_X como o valor da coordenada na trajetória $X(t_1)$ em unidades da largura d da barreira, ou seja, $p_X = \frac{X(t_1)}{d}$, com $0 \leq p_X \leq 1$, determinamos os instantes de tempo correspondentes t_1 que chamamos neste caso de t_{1X} . Até primeira ordem no campo elétrico e na interação da partícula com o banho de osciladores, segundo a Eq. (2.72), temos

$$p_X = i \frac{t_{1X}}{T_0} + \frac{u_1}{2} t_{1X}^{(0)2} - i \frac{2}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left[\frac{t_{1X}^{(0)}}{T_0} - \frac{\sin \omega t_{1X}^{(0)}}{\omega T_0} - \frac{i}{2} \left(e^{i\omega t_{1X}^{(0)}} - i\omega t_{1X}^{(0)} - 1 \right) \times \frac{1 - e^{-\omega T_0}}{\omega T_0} \left(1 - e^{-\omega T_0} e^{-i\omega t} \right) \right], \quad (2.79)$$

onde $t_{1X}^{(0)}$ corresponde ao instante t_{1X} na ausência de campo elétrico e interação da partícula com o banho de osciladores. De acordo com a Eq. (2.59), e com a própria Eq. (2.79) para $u_1 = 0$ e $J(\omega) = 0$, temos

$$t_{1X}^{(0)} = -iT_0 p_X, \quad (2.80)$$

e portanto, através da Eq. (2.79) podemos expressar t_{1X} como uma função de p_X dada por

$$t_{1X}(p_X) = -iT_0 \left\{ p_X + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} p_X^2 + \frac{2}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left[p_X - \frac{\sinh \omega T_0 p_X}{\omega T_0} + \frac{1}{2} \left(e^{\omega T_0 p_X} - \omega T_0 p_X - 1 \right) \times \frac{1 - e^{-\omega T_0}}{\omega T_0} \left(1 - e^{-\omega T_0} e^{-i\omega t} \right) \right] \right\}, \quad (2.81)$$

onde utilizamos a expressão (2.52). Para $p_X = 0$ na Eq. (2.81) obtemos $t_{1X}(0) = 0$, o que corresponde à condição inicial $X(0) = 0$. Para $p_X = 1$ na mesma equação obtemos $t_{1X}(1) = T_X$, onde T_X é o tempo

de travessia através da barreira, obtido antes na Eq. (2.76). A expressão $t_{1X}(1) = T_X$ corresponde à condição $X(T_X) = d$.

No caso da trajetória $Y(t_1)$, definimos p_Y como o valor da coordenada nessa trajetória em unidades da largura d da barreira, ou seja, $p_Y = \frac{Y(t_1)}{d}$, com $0 \leq p_Y \leq 1$, e determinamos os instantes de tempo correspondentes t_1 que chamamos neste caso de t_{1Y} . Até primeira ordem no campo elétrico e na interação da partícula com o banho de osciladores, segundo a Eq. (2.70), temos

$$\frac{Y(t_{1Y})}{d} = p_Y = \frac{X(-t_{1Y})}{d},$$

onde vemos que $-t_{1Y}$ corresponde ao instante de tempo t_{1X} na trajetória $X(t_{1X})$ para o qual $p_X = \frac{X(t_{1X})}{d} = p_Y$. Assim, para um valor dado de p_Y temos que $-t_{1Y} = t_{1X}(p_Y)$ e portanto, podemos expressar t_{1Y} como uma função de p_Y dada por

$$t_{1Y}(p_Y) = -t_{1X}(p_Y), \quad (2.82)$$

onde $t_{1X}(p_Y)$ é dado pela função (2.81) substituindo p_X por p_Y . Para $p_Y = 0$ na Eq. (2.82) obtemos $t_{1Y}(0) = -t_{1X}(0) = 0$, o que corresponde à condição inicial $Y(0) = 0$. Para $p_Y = 1$ na mesma equação obtemos $t_{1Y}(1) = -t_{1X}(1) = -T_X$. Utilizando a Eq. (2.77) temos então $t_{1Y}(1) = -T_X = T_Y$, o que corresponde à condição $Y(T_Y) = d$.

Nas Eqs. (2.81) e (2.82), $p_X = \frac{X(t_{1X})}{d}$ e $p_Y = \frac{Y(t_{1Y})}{d}$ tomam valores somente reais desde 0 até 1. Assim, essas equações descrevem o tunelamento da partícula através de trajetórias clássicas reais $X(t_{1X})$ e $Y(t_{1Y})$ que evoluem nos tempos complexos t_{1X} e t_{1Y} . Na Eq. (2.81), assim como na expressão (2.76), a influência da integral sobre ω é relativamente pequena para $J(\omega) \approx 0$. Desse modo, a Eq. (2.81) define um contorno na metade inferior do plano complexo para o tempo t_{1X} e a Eq. (2.82) define um contorno na metade superior do plano complexo para o tempo t_{1Y} . De acordo com a Eq. (2.82), o contorno definido para o tempo t_{1Y} é uma reflexão em relação à origem do plano complexo, do contorno definido na Eq. (2.81) para o tempo t_{1X} .

O contorno na metade inferior do plano complexo definido na Eq. (2.81) para o tempo t_{1X} é uma extensão, até primeira ordem no campo elétrico e na interação da partícula com o banho de osciladores, do contorno definido por McLaughlin³ no caso em que não há interação da partícula com o ambiente nem campo elétrico. Como mencionamos na seção 1.3, o tunelamento da partícula é descrito no trabalho de McLaughlin³ através de uma trajetória real que evolui no tempo complexo, tomando estes valores ao longo de um contorno na metade inferior do plano complexo. Esse contorno tem também a característica de possuir parte imaginária não crescente quando percorrido desde 0. Como pode ser visto através do estudo da Ref. 3, o contorno definido por McLaughlin³ para uma barreira de potencial arbitrária pode ser escrito no caso de uma barreira de potencial de largura d e altura U_0 , na forma dada pela Eq. (2.80).

Utilizando as Eqs. (2.75), (2.76), (2.65) e (2.59) podemos escrever a expressão (2.78) na forma

$$\frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} = i \left\{ 1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left[\mathcal{J}(\omega T_0) - W(\omega T_0) e^{-i\omega t} \right] \right\}, \quad (2.83)$$

onde as funções $\mathcal{J}(x)$ e $W(x)$ são dadas por

$$\mathcal{J}(x) = 1 - \frac{1 - e^{-x}}{x}, \quad (2.84)$$

e

$$W(x) = \frac{(1 - e^{-x})^2}{2x}. \quad (2.85)$$

A Eq. (2.83) permite determinar o expoente de tunelamento $\mathcal{S}_{E,E}(t)$ e calcular o espectro de transmissão através da expressão (2.38).

2.4.2 A taxa total de tunelamento

O espectro de transmissão (2.38) pode ser expresso em relação à chamada taxa total de tunelamento, a qual representaremos por $\Gamma_0^{\text{total}}(E)$. Seguindo o trabalho de Ueda², definimos esta grandeza na forma

$$\Gamma_0^{\text{total}}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \Gamma_0(E, E'). \quad (2.86)$$

De acordo com esta expressão e a Eq. (1.15) para o espectro de transmissão da partícula, a taxa total de tunelamento $\Gamma_0^{\text{total}}(E)$ corresponde à probabilidade de transmissão da partícula por unidade de tempo através da barreira para uma energia inicial característica da partícula $E < U_0$ (Fig. 1.1). Substituindo a expressão (2.38) na Eq. (2.86), temos

$$\Gamma_0^{\text{total}}(E) = N \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar} E t} e^{\frac{i}{\hbar} E t} \mathcal{S}_{E,E}(t) \delta(t) = N e^{\frac{i}{\hbar} E t} \mathcal{S}_{E,E}(0), \quad (2.87)$$

onde vemos que a taxa total de tunelamento é determinada pelo valor do expoente de tunelamento para $t = 0$.

Para expressar o espectro de transmissão em relação à taxa total de tunelamento, podemos escrever a expressão (2.83) na forma

$$\frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} = \frac{\mathcal{S}_{E,E}(0)}{\mathcal{S}_0} + i \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0) \left(1 - e^{-i\omega t} \right), \quad (2.88)$$

de onde, considerando a expressão (2.87), podemos obter através da Eq. (2.38)

$$\Gamma_0(E, E') = \Gamma_0^{\text{total}}(E) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0) (1 - e^{-i\omega t})}. \quad (2.89)$$

Esta expressão relaciona o espectro de transmissão da partícula $\Gamma_0(E, E')$ com a taxa total de tunelamento $\Gamma_0^{\text{total}}(E)$ indicando a distribuição da mesma sobre as diferentes energias finais características E' . Integrando a expressão (2.89) sobre E' de $-\infty$ a ∞ obtemos $\Gamma_0^{\text{total}}(E)$, o que está de acordo com a Eq. (2.86).

Para obter a taxa total de tunelamento devemos determinar o expoente de tunelamento para $t = 0$. Da Eq. (2.83) temos

$$\frac{\mathcal{S}_{E,E}(0)}{\mathcal{S}_0} = i \left[1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} D(\omega T_0) \right], \quad (2.90)$$

onde a função $D(x)$ é dada pela diferença entre as funções (2.84) e (2.85), na forma

$$D(x) = \mathcal{J}(x) - W(x) = 1 - \frac{(1 - e^{-x})(3 - e^{-x})}{2x}. \quad (2.91)$$

Utilizando a expressão (2.90) para substituir $\mathcal{S}_{E,E}(0)$ na Eq. (2.87), obtemos

$$\Gamma_0^{\text{total}}(E) = N e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \left[1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} D(\omega T_0) \right]}. \quad (2.92)$$

De acordo com esta expressão, a taxa total de tunelamento para $U_1 = 0$ e $J(\omega) = 0$ é dada por $\Gamma_0^{\text{total}}(E) = N e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar}}$. Este resultado pode ser obtido também substituindo $\Gamma_0(E, E')$ na Eq. (2.86) pelo espectro de transmissão $\Gamma_0^{(0)}(E, E')$ dado pela Eq. (2.41) e considerando também a Eq. (2.43).

A expressão (2.92) corresponde à taxa total de tunelamento considerando o expoente de tunelamento na Eq. (2.90) até primeira ordem no campo elétrico e na interação da partícula com o banho de osciladores. Considerando $U_1 > 0$ (Fig. 1.1) e sendo T_0 positivo (Eq. (2.44)), vemos que a taxa total de tunelamento

aumenta na presença do campo elétrico num fator dado por $e^{\frac{U_1 T_0}{\hbar}}$. O fator $e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \left(1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} \right)}$ na

Eq. (2.92), de maneira similar ao fator $e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar}}$ na Eq. (2.41), é consistente com o valor aproximado do coeficiente de transmissão da partícula através de uma barreira relativamente alta e/ou larga. Neste caso, utilizando o método WKB, o coeficiente de transmissão pode ser estimado¹³ através do fator $e^{-2\gamma_{\text{WKB}}}$,

onde $\gamma_{\text{WKB}} = \int_0^d dx \kappa(x)$ com $\kappa(x) = \sqrt{2m[V(x) - E]}/\hbar$, sendo $V(x)$ o potencial (1.3) na região da barreira. Para isso, podemos expressar $\kappa(x)$ até primeira ordem em U_1 e utilizar a definição (2.43) para \mathcal{S}_0 e a Eq. (2.45) para escrever $U_0 - E$ em função de \mathcal{S}_0 e T_0 . O mesmo resultado pode ser obtido de maneira mais direta através do fator $e^{-2\kappa'd}$, onde κ' é constante e dado por $\kappa' = \sqrt{2m(U_0 - U_1/2 - E)}/\hbar$. Nesta expressão, $U_0 - U_1/2$ corresponde ao valor médio da altura da barreira. Assim, para $U_1 > 0$ (Fig. 1.1), o campo elétrico causa uma diminuição efetiva da altura U_0 da barreira numa quantidade $U_1/2$ produzindo assim um aumento na taxa total de tunelamento.

Para determinar o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento devemos determinar na Eq. (2.92) o sinal do termo da integral sobre ω . Substituindo neste termo a expressão (1.30) para a função de densidade espectral $J(\omega)$, temos

$$\frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} D(\omega T_0) = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^4} D(\omega_{\alpha} T_0), \quad (2.93)$$

onde, sendo as frequências ω_{α} dos osciladores do banho e o tempo T_0 variáveis positivas, devemos estudar o comportamento da função $D(x)$ para $x > 0$.

A função $D(x)$ na Eq. (2.91) pode ser escrita como $D(x) = 1 - f(x)/(2x)$ onde $f(x) = (1 - e^{-x})(3 - e^{-x})$. O valor e a inclinação de $f(x)$ para $x = 0$ são dados por $f(0) = 0$ e $f'(0) = 2$, coincidindo com os valores correspondentes para a função $2x$ (Fig. 2.1). Para $x > 0$, a segunda derivada de $f(x)$, dada por $f''(x) = -4e^{-x}(1 - e^{-x})$, é negativa e portanto, a inclinação de $f(x)$ diminui de maneira monótona. Desse modo, para $x > 0$, os valores da função $f(x)$ se tornam menores que os da função $2x$ e em consequência, a função $D(x) = 1 - f(x)/(2x)$ é positiva (Fig. 2.1).

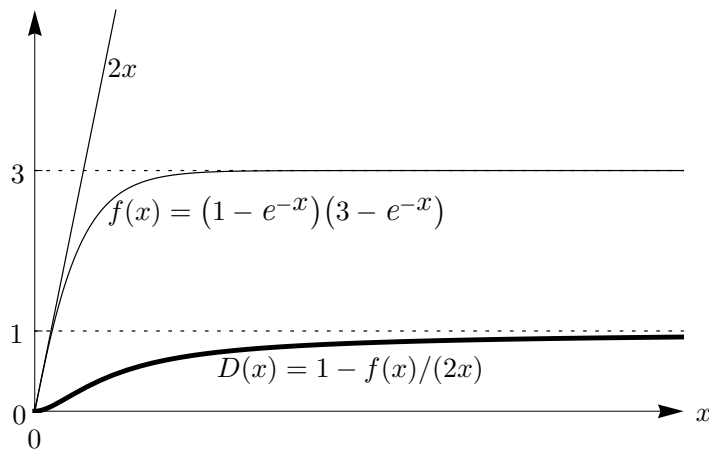


Fig. 2.1 Comportamento da função $D(x) = 1 - \frac{(1 - e^{-x})(3 - e^{-x})}{2x}$ para $x \geq 0$. Esta função determina a taxa total de tunelamento segundo a Eq. (2.92).

Sendo $D(x)$ uma função positiva para $x > 0$, temos que o termo $\frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} D(\omega T_0)$ na Eq. (2.93) corresponde a uma soma de termos positivos e portanto,

$$\frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} D(\omega T_0) = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^4} D(\omega_{\alpha} T_0) > 0. \quad (2.94)$$

Assim, da expressão (2.92) podemos concluir que a interação da partícula com o banho de osciladores diminui a taxa total de tunelamento. Este resultado foi obtido no trabalho de Ueda² nos casos de um banho de osciladores com uma única frequência e de um banho ôhmico, reproduzindo neste último caso o resultado obtido por Caldeira e Leggett¹⁴.

Como indicamos antes, um banho de osciladores com uma única frequência é descrito por uma função de densidade espectral $J(\omega') = \pi m \gamma \omega^3 \delta(\omega' - \omega)$ e um banho ôhmico de osciladores é caracterizado por uma função de densidade espectral $J(\omega) = m \eta \omega$. No presente trabalho derivamos a expressão (2.94) utilizando a expressão geral (1.30) para a função de densidade espectral $J(\omega)$, válida para qualquer tipo de banho de osciladores. Desse modo, das expressões (2.92) e (2.94) podemos concluir que a interação da partícula com um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária diminui a taxa total de tunelamento. Este resultado, considerando o expoente de tunelamento na Eq. (2.90) até primeira ordem na interação da partícula com o banho de osciladores, inclui os casos particulares de um banho de osciladores com uma única frequência e um banho ôhmico.

2.4.2.1 O tempo característico de travessia através da barreira

As funções $D(x)$ e $W(x)$ definidas nas Eqs. (2.91) e (2.85), respectivamente, foram utilizadas no trabalho de Ueda² para estudar somente o caso de um banho de osciladores com uma única frequência (Eqs. (56) e (57) da Ref. 2). Como vemos nas Eqs. (2.88) – (2.90) e (2.92) do presente trabalho, as funções $D(x)$ e $W(x)$ podem ser empregadas para expressar o expoente de tunelamento, o espectro de transmissão da partícula e a taxa total de tunelamento no caso de um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária. Utilizando as funções $D(x)$ e $W(x)$ podemos escrever também a Eq. (2.76) para o tempo de travessia T_X através da barreira na forma

$$T_X = -iT_0 \left\{ 1 + \frac{U_1 T_0}{S_0} + \frac{2}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left[D(\omega T_0) + W(\omega T_0) \left(1 - e^{-i\omega t} \right) - \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\omega T_0} \right) \right. \right. \\ \left. \left. \times \left(1 - e^{-\omega T_0} e^{-i\omega t} \right) \right] \right\}, \quad (2.95)$$

de onde o tempo de travessia T_Y pode ser obtido através da Eq. (2.77).

Para estudar o efeito do campo elétrico e da interação da partícula com o banho de osciladores no

tempo de travessia através da barreira consideramos a expressão (2.95) para $t = 0$. Este caso determina o expoente de tunelamento na Eq. (2.78) para $t = 0$ e portanto, de acordo com a expressão (2.87), determina também a taxa total de tunelamento. Para $t = 0$ nas Eqs. (2.95) e (2.77) escrevemos os tempos de travessia $T_X(0)$ e $T_Y(0)$ na forma

$$T_X(0) = -i\tilde{T}, \quad (2.96)$$

e

$$T_Y(0) = i\tilde{T}, \quad (2.97)$$

onde

$$\tilde{T} = T_0 \left\{ 1 + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left[D(\omega T_0) - \frac{1}{2} (1 - e^{-\omega T_0})^2 \right] \right\}. \quad (2.98)$$

Nas Eqs. (2.96) e (2.97), o tempo \tilde{T} caracteriza os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira para $t = 0$ na mesma forma que o tempo T_0 caracteriza os tempos de travessia $T_X^{(0)}$ e $T_Y^{(0)}$ nas Eqs. (2.65) e (2.66) no caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico. Desse modo, chamaremos \tilde{T} e T_0 de tempos característicos de travessia através da barreira.

Na Eq. (2.98), considerando $U_1 > 0$ (Fig. 1.1) e sendo \mathcal{S}_0 positivo (Eq. (2.43)), vemos que o campo elétrico aumenta o tempo característico de travessia em relação a T_0 numa quantidade $U_1 T_0^2 / \mathcal{S}_0$. Este resultado, de maneira similar ao efeito do campo elétrico na taxa total de tunelamento, pode ser obtido através da expressão¹⁵ $\int_0^d \frac{dx}{\hbar \kappa(x)/m}$, expandindo $\kappa(x) = \sqrt{2m[\mathbf{V}(x) - E]}/\hbar$ até primeira ordem em U_1 e utilizando a definição (2.44) para T_0 e a Eq. (2.45) para substituir $U_0 - E$. O mesmo resultado pode ser obtido de modo mais direto utilizando a expressão $\frac{d}{\hbar \kappa'/m}$ com $\kappa' = \sqrt{2m(U_0 - U_1/2 - E)}/\hbar$. A expressão $\frac{d}{\hbar \kappa'/m}$ é similar à definição (2.44) para T_0 , tendo sido substituído U_0 pelo valor médio da altura da barreira $U_0 - U_1/2$ na presença do campo elétrico. Assim, para $U_1 > 0$ (Fig. 1.1), a diminuição efetiva causada pelo campo elétrico na altura U_0 da barreira numa quantidade $U_1/2$, além de produzir um aumento da taxa total de tunelamento, produz também um aumento do tempo característico de travessia através da barreira.

Para estudar o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo característico de travessia devemos determinar na Eq. (2.98) o sinal do termo da integral sobre ω . Substituindo neste termo a expressão (1.30) para a função de densidade espectral $J(\omega)$, temos

$$\frac{2}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left[D(\omega T_0) - \frac{1}{2} (1 - e^{-\omega T_0})^2 \right] = \frac{1}{m} \sum_\alpha \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha^4} \left[D(\omega_\alpha T_0) - \frac{1}{2} (1 - e^{-\omega_\alpha T_0})^2 \right], \quad (2.99)$$

onde devemos analisar o comportamento da função $D(x) - (1 - e^{-x})^2/2$ para $x > 0$.

As funções $D(x)$ (Fig. 2.1) e $(1 - e^{-x})^2/2$ coincidem no valor 0 para $x = 0$ e ambas tomam valores positivos para $x > 0$. Para valores muito pequenos de x , a função $D(x) \approx x^2/3$ toma valores menores que a função $(1 - e^{-x})^2/2 \approx x^2/2$. Por outro lado, para valores muito grandes de x esse comportamento se inverte, sendo que a função $D(x) \approx 1 - 3/(2x)$ toma valores maiores que a função $(1 - e^{-x})^2/2 \approx 1/2 - e^{-x}$, tendendo aos valores assintóticos 1 e $1/2$, respectivamente (Fig. 2.2). As funções $D(x)$ e $(1 - e^{-x})^2/2$ se cruzam para um valor intermediário de x que pode ser obtido numericamente como $x = x_0 \approx 1.893 \approx 1.9$. Desse modo, para $x = x_0 \approx 1.9$, o valor da função

$$\Delta(x) = D(x) - \frac{1}{2}(1 - e^{-x})^2, \quad (2.100)$$

é 0, enquanto para $0 < x < x_0$, $\Delta(x)$ é uma função negativa e para $x > x_0$, $\Delta(x)$ é uma função positiva (Fig. 2.2).

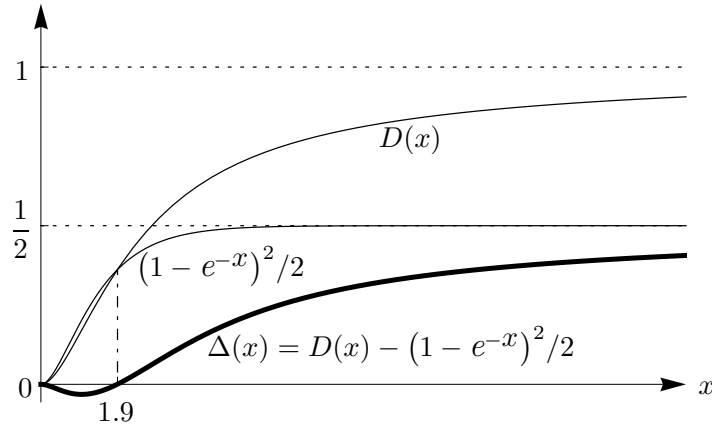


Fig. 2.2 Comportamento da função $\Delta(x) = D(x) - \frac{1}{2}(1 - e^{-x})^2$ para $x \geq 0$. Esta função determina o tempo característico de travessia através da barreira segundo a Eq. (2.98).

Da análise realizada vemos que para $\omega_c \approx 1.9 T_0^{-1}$, a Eq. (2.99) pode ser escrita na forma

$$\frac{2}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} \left[D(\omega T_0) - \frac{1}{2} (1 - e^{-\omega T_0})^2 \right] = \frac{1}{m} \underbrace{\sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^4} \Delta(\omega_{\alpha} T_0)}_{< 0} + \frac{1}{m} \underbrace{\sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^4} \Delta(\omega_{\alpha} T_0)}_{> 0},$$

onde a primeira soma é negativa, incluindo somente os osciladores do banho com frequências $\omega_{\alpha} < \omega_c$, e a segunda soma é positiva, incluindo somente os osciladores do banho com frequências $\omega_{\alpha} > \omega_c$. Assim, da expressão (2.98) podemos concluir que a interação da partícula com os osciladores do banho que têm frequências $\omega_{\alpha} < \omega_c$ ($\omega_{\alpha} > \omega_c$) diminui (aumenta) o tempo característico de travessia através da barreira. Os osciladores do banho com frequências $\omega_{\alpha} = \omega_c$ têm uma contribuição nula no termo da integral sobre ω na Eq. (2.98) e portanto, a interação da partícula com esses osciladores não afeta o

tempo característico de travessia através da barreira.

A dependência com as frequências dos osciladores do banho no caso do tempo característico de travessia através da barreira contrasta com o caso da taxa total de tunelamento. Na expressão (2.94) todos os termos da soma são positivos e portanto, a interação da partícula com os osciladores do banho diminui a taxa total de tunelamento (2.92) com independência do valor das frequências desses osciladores.

2.4.2.2 O expoente característico de tunelamento

De maneira análoga ao tempo característico de travessia através da barreira (Eqs. (2.96) – (2.98)), podemos definir também o expoente característico de tunelamento. Para isso, escrevemos a Eq. (2.90) na forma

$$\mathcal{S}_{E,E}(0) = i\tilde{\mathcal{S}}, \quad (2.101)$$

onde

$$\tilde{\mathcal{S}} = \mathcal{S}_0 \left[1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{1}{m} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} D(\omega T_0) \right]. \quad (2.102)$$

Na Eq. (2.101), $\tilde{\mathcal{S}}$ caracteriza o expoente de tunelamento para $t = 0$ na mesma forma que \mathcal{S}_0 caracteriza o expoente de tunelamento $\mathcal{S}_{E,E}^{(0)}$ na Eq. (2.42) no caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico. Desse modo, chamamos $\tilde{\mathcal{S}}$ e \mathcal{S}_0 de expoentes característicos de tunelamento.

O expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ dado pela Eq. (2.102) permite descrever a taxa total de tunelamento (2.92), sendo esta maior (menor) para valores menores (maiores) de $\tilde{\mathcal{S}}$. Como vemos na Eq. (2.102), o campo elétrico diminui o expoente característico de tunelamento em relação a \mathcal{S}_0 numa quantidade $U_1 T_0$, o que aumenta a taxa total de tunelamento. Também, segundo a expressão (2.94), a interação da partícula com o banho de osciladores aumenta o expoente característico de tunelamento (2.102) em relação a \mathcal{S}_0 , o que diminui a taxa total de tunelamento.

Capítulo 3

Casos de um Banho de Osciladores com uma Única Frequência e Banho Ôhmico

3.1 Banho de osciladores com uma única frequência

Como mencionamos no capítulo anterior, um banho de osciladores com uma única frequência é descrito por uma função de densidade espectral

$$J(\omega') = \pi m \gamma \omega^3 \delta(\omega' - \omega). \quad (3.1)$$

Mudando na Eq. (2.89) a variável de integração ω para ω' e substituindo nessa expressão a Eq. (3.1), obtemos para espectro de transmissão da partícula

$$\Gamma_0(E, E') = \Gamma_0^{\text{total}}(E) e^{-\gamma \frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} W(\omega T_0)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (E - E') t} e^{\gamma \frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} W(\omega T_0)} e^{-i\omega t}, \quad (3.2)$$

onde a taxa total de tunelamento $\Gamma_0^{\text{total}}(E)$ pode ser obtida através da Eq. (2.92) como

$$\Gamma_0^{\text{total}}(E) = N e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \left[1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \gamma D(\omega T_0) \right]}. \quad (3.3)$$

Para integrar sobre a variável t na Eq. (3.2) utilizamos a expressão

$$e^{\gamma \frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} W(\omega T_0)} e^{-i\omega t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left[\gamma \frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} W(\omega T_0) e^{-i\omega t} \right]^n}{n!},$$

e obtemos

$$\Gamma_0(E, E') = \Gamma_0^{\text{total}}(E) e^{-\gamma \frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} W(\omega T_0)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left[\gamma \frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} W(\omega T_0) \right]^n}{n!} \delta(E - E' - n\hbar\omega). \quad (3.4)$$

Esta expressão para o espectro de transmissão da partícula, com a taxa total de tunelamento $\Gamma_0^{\text{total}}(E)$ dada pela Eq. (3.3), reproduz a expressão (58) da Ref. 2 no caso de um banho de osciladores com uma única frequência. Como vimos, este resultado pode ser obtido a partir da expressão geral (2.89), válida para um banho de osciladores com uma função de densidade espectral $J(\omega)$ arbitrária. Como indicamos no início da seção 2.4, no caso considerado na Ref. 2 de um campo elétrico fraco e uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores, não foram obtidos resultados válidos para um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária.

3.1.1 Comportamento do expoente característico de tunelamento

Queremos estudar o comportamento do expoente característico de tunelamento em função da frequência ω do banho de osciladores. De acordo com a expressão (2.102) e utilizando a função de densidade espectral (3.1), temos

$$\tilde{\mathcal{S}} = \mathcal{S}_0 \left[1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \gamma D(\omega T_0) \right]. \quad (3.5)$$

Este expoente descreve a taxa total de tunelamento (3.3), sendo esta menor para valores maiores de $\tilde{\mathcal{S}}$. Sendo $\omega T_0 > 0$, temos que $D(\omega T_0) > 0$ (Fig. 2.1) e portanto, o termo $\gamma D(\omega T_0)$ na Eq. (3.5) é positivo. Desse modo, a interação da partícula com um banho de osciladores com uma única frequência ω aumenta o expoente característico de tunelamento em relação a \mathcal{S}_0 numa quantidade $\gamma D(\omega T_0) \mathcal{S}_0$, diminuindo a taxa total de tunelamento (3.3). Este resultado está de acordo com o resultado geral obtido na subseção 2.4.2 de que a interação da partícula com um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária diminui a taxa total de tunelamento.

Ao estudar o comportamento do expoente característico de tunelamento em função da frequência ω do banho de osciladores, devemos notar que este expoente depende de ω na Eq. (3.5) não somente através da função $D(\omega T_0)$ mas também através da constante γ . Esta constante define a função de densidade espectral do banho de osciladores na Eq. (3.1) e pode ser obtida como

$$\gamma = \frac{1}{\pi m \omega^3} \int_{\omega-0^+}^{\omega+0^+} d\omega' J(\omega'), \quad (3.6)$$

onde, de acordo com a expressão geral (1.30), podemos substituir $J(\omega')$ por

$$J(\omega') = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}} \delta(\omega' - \omega_{\alpha}). \quad (3.7)$$

A função de densidade espectral (3.1) é definida através de uma função delta de Dirac $\delta(\omega' - \omega)$, descrevendo assim o banho de osciladores com uma única frequência ω . Dessa forma devemos igualar na Eq. (3.7) as frequências ω_α dos osciladores do banho à frequência ω . Se existissem na Eq. (3.7) termos com uma frequência ω_α igual a um certo valor arbitrário $\bar{\omega} \neq \omega$, teríamos então, segundo a expressão (3.7), $\int_{\bar{\omega}-0^+}^{\bar{\omega}+0^+} d\omega' J(\omega') \neq 0$. Por outro lado, para $J(\omega')$ dada pela Eq. (3.1), temos $\int_{\bar{\omega}-0^+}^{\bar{\omega}+0^+} d\omega' J(\omega') = 0$, para $\bar{\omega} \neq \omega$. Assim, para um banho de osciladores com uma função de densidade espectral dada pela Eq. (3.1), temos

$$\omega_\alpha = \omega, \quad (3.8)$$

e portanto, podemos escrever a expressão (3.7) na forma

$$J(\omega') = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega} \delta(\omega' - \omega).$$

Substituindo a expressão anterior na Eq. (3.6) obtemos

$$\gamma = \frac{1}{2m\omega^4} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha}}. \quad (3.9)$$

Nesta expressão devemos considerar ainda a possibilidade da constante de acoplamento C_{α} entre a partícula e o oscilador α depender também da frequência $\omega_{\alpha} = \omega$. No caso de uma partícula livre ($V(x) = 0$ no hamiltoniano (1.1)) com uma interação com o banho de osciladores descrita por uma função $f_{\alpha}(x) = \frac{C_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} x$, uma dependência de C_{α} com a frequência ω_{α} da forma¹⁶ $C_{\alpha} = m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2$ garante a invariância translacional do hamiltoniano. No presente trabalho consideramos uma dependência de C_{α} com a frequência ω dada por

$$C_{\alpha} = \tilde{C}_{\alpha}(\omega T_0)^{\sigma}, \quad (3.10)$$

onde \tilde{C}_{α} não depende de ω e σ pode tomar valores arbitrários. O caso recém mencionado, $C_{\alpha} = m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2$, corresponde ao valor $\sigma = 2$ e $\tilde{C}_{\alpha} = m_{\alpha}T_0^{-2}$. De acordo com as Eqs. (3.9) e (3.10), podemos escrever γ como uma função de ωT_0 na forma

$$\gamma(\omega T_0) = \frac{\tilde{g}^2}{2(\omega T_0)^{2(2-\sigma)}}, \quad (3.11)$$

onde \tilde{g} é uma constante adimensional independente de ω , dada por

$$\tilde{g}^2 = \frac{T_0^4}{m} \sum_{\alpha} \frac{\tilde{C}_{\alpha}^2}{m_{\alpha}}. \quad (3.12)$$

A Eq. (3.11) no caso $\sigma = 1$ corresponde à expressão (61) da Ref. 2 onde no lugar de \tilde{g} aparece a constante g definida na Eq. (60) dessa referência.

Seguindo a definição de g na Eq. (60) da Ref. 2 não é possível verificar a equivalência entre essa constante e a constante \tilde{g} do presente trabalho. Porém, a definição de g na Ref. 2 também não permite obter a expressão (61) dessa referência e portanto, primeiramente tal definição deve ser corrigida. Essa definição está baseada no chamado contratermo H_{counter} , o qual é dado na expressão (59) da Ref. 2. O contratermo H_{counter} é dado pelo termo $\frac{1}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 f_{\alpha}^2(x)$ do potencial $\mathcal{V}(x)$ na Eq. (1.7) do presente trabalho, tomando o valor $g(x) = x$ na região da barreira (Eq. (1.5)) na Eq. (1.4) para $f_{\alpha}(x)$. Desse modo temos

$$H_{\text{counter}} = \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} x^2, \quad (3.13)$$

que coincide com a definição de H_{counter} na expressão (59) do trabalho de Ueda². Adicionalmente, utilizando a forma geral (3.7) para a função de densidade espectral $J(\omega')$, podemos escrever a Eq. (3.13) na forma

$$H_{\text{counter}} = \frac{x^2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega' \frac{J(\omega')}{\omega'}, \quad (3.14)$$

que corresponde também à expressão (59) da Ref. 2. De acordo com o procedimento seguido nessa referência, substituímos na expressão (3.14) a Eq. (3.1) para $J(\omega')$ e obtemos

$$H_{\text{counter}} = x^2 m \gamma \omega^2 = \gamma \omega^2 m d^2 \left(\frac{x}{d}\right)^2.$$

Nesta expressão, utilizando as Eqs. (2.45) e (2.46), ou somente a definição de T_0 na Eq. (2.44) (definição dada também na expressão (35) da Ref. 2), podemos substituir a quantidade md^2 por

$$md^2 = 2(U_0 - E)T_0^2, \quad (3.15)$$

e obter

$$H_{\text{counter}} = 2\gamma (\omega T_0)^2 (U_0 - E) \left(\frac{x}{d}\right)^2. \quad (3.16)$$

Desta expressão podemos ver que a definição da constante g na Eq. (60) da Ref. 2 na forma $g =$

$\left[\frac{H_{\text{counter}}}{U_0 \left(\frac{x}{d}\right)^2} \right]^{1/2}$, não permite obter a expressão (61) dessa referência dada por $g = \sqrt{2\gamma (\omega T_0)^2}$ ou $\gamma = \frac{g^2}{2(\omega T_0)^2}$. Como vemos na Eq. (3.16), para obter a expressão $g = \sqrt{2\gamma (\omega T_0)^2}$, devemos corrigir a definição de g na Ref. 2 substituindo a altura U_0 da barreira pela diferença $U_0 - E$. Corrigindo então essa definição de g , definimos de maneira similar

$$g' = \sqrt{\frac{H_{\text{counter}}}{(U_0 - E) \left(\frac{x}{d}\right)^2}}, \quad (3.17)$$

para a qual, utilizando a Eq. (3.16), podemos obter

$$g' = \sqrt{2\gamma(\omega T_0)^2}, \quad (3.18)$$

ou

$$\gamma = \frac{g'^2}{2(\omega T_0)^2}. \quad (3.19)$$

As duas últimas equações correspondem à expressão (61) da Ref. 2 onde g deve ser substituída por g' . A Eq. (3.19) tem a forma da Eq. (3.11) no caso $\sigma = 1$, sendo necessário verificar a equivalência entre g' e a constante \tilde{g} .

De acordo com as Eqs. (3.13) e (3.17), temos

$$g'^2 = \frac{\sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} d^2}{U_0 - E},$$

de onde, substituindo d^2 através da Eq. (3.15) e utilizando também a relação (3.8), obtemos

$$g'^2 = \frac{T_0^2}{m\omega^2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha}}. \quad (3.20)$$

Nesta expressão vemos que para g' ser como \tilde{g} , uma constante independente de ω , precisamos ter $C_{\alpha} \propto \omega$. Isso corresponde ao caso $\sigma = 1$ na Eq. (3.10), o que está de acordo com a semelhança observada nesse caso entre as Eqs. (3.11) e (3.19). Para $C_{\alpha} = \tilde{C}_{\alpha} \omega T_0$ na Eq. (3.20) temos

$$g'^2 = \frac{T_0^4}{m} \sum_{\alpha} \frac{\tilde{C}_{\alpha}^2}{m_{\alpha}},$$

que coincide com a expressão (3.12) para \tilde{g}^2 . Assim podemos concluir que as Eqs. (3.18) e (3.19), correspondentes à expressão (61) da Ref. 2, correspondem à Eq. (3.11) do presente trabalho no caso $\sigma = 1$

No procedimento seguido para verificar a equivalência entre g' e a constante \tilde{g} substituímos a definição (3.13) do contratermo H_{counter} na definição (3.17) de g' . Como vimos na Eq. (3.20), para g' ser uma constante independente da frequência ω do banho de osciladores, precisamos assumir que a constante de acoplamento C_{α} entre a partícula e o oscilador α é proporcional a ω . Na expressão (61) da Ref. 2 foi assumido que g é uma constante independente de ω . Porém, esta hipótese não foi estudada substituindo a definição do contratermo H_{counter} na expressão dada para g na Eq. (60) dessa referência. Assim, no trabalho de Ueda², não foi considerada explicitamente uma dependência da constante de acoplamento C_{α} com a frequência ω do banho de osciladores. No presente trabalho, como indicamos na Eq. (3.10), consideramos uma dependência da forma $C_{\alpha} = \tilde{C}_{\alpha}(\omega T_0)^{\sigma}$.

Sendo γ uma função de ωT_0 de acordo com a Eq. (3.11), escrevemos a expressão (3.5) na forma

$$\tilde{\mathcal{S}} = \mathcal{S}_0 \left[1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \gamma(\omega T_0) D(\omega T_0) \right], \quad (3.21)$$

onde para estudar o comportamento do expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ em função de ω , consideramos o caso em que não há campo elétrico, ou seja, $U_1 = 0$. Neste caso, o expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ é dado pela função $1 + \gamma(\omega T_0) D(\omega T_0)$ ou $1 + \gamma(x) D(x)$ onde $x = \omega T_0$. Esta função toma valores maiores que 1 devido ao termo positivo $\gamma(x) D(x)$. Valores maiores desta função correspondem a valores maiores do expoente característico de tunelamento e portanto, valores menores da taxa total de tunelamento.

Seguindo a Ref. 2, onde na Fig. 1 foram considerados os valores $g = 1, 0.5$ e 0.1 na expressão (61) dessa referência, consideramos esses valores para a constante \tilde{g} na Eq. (3.11) do presente trabalho, ou seja, consideramos os casos $\tilde{g} = 1, 0.5$ e 0.1 . De acordo com a Eq. (3.12), esta constante contém a influência das constantes de acoplamento da partícula com os osciladores do banho. Valores maiores da constante \tilde{g} podem ser obtidos aumentando os valores das constantes de acoplamento \tilde{C}_α entre a partícula e os osciladores do banho. De acordo com as Eqs. (3.11) e (3.21), o expoente característico de tunelamento cresce monotonicamente com \tilde{g} para valores de ωT_0 e σ pré-fixados, diminuindo a taxa total de tunelamento. Valores muito grandes de \tilde{g} , porém, não devem ser considerados quando assumimos uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores ($J(\omega) \approx 0$) e portanto, pequenos valores de γ nas Eqs. (3.1) e (3.11).

Os valores a serem considerados para a variável σ na Eq. (3.11) podem ser determinados a partir do comportamento da função $1 + \gamma(x) D(x)$ para valores muito pequenos e muito grandes de x . Para a função $D(x)$, dada na Eq. (2.91), temos que $D(x) \approx x^2/3 - x^3/4$ para $x \ll 1$ e $D(x) \approx 1 - 3/(2x)$ para $x \gg 1$. Assim, de acordo com a Eq. (3.11), temos

$$1 + \gamma(x) D(x) \approx 1 + \frac{\tilde{g}^2}{2x^{2(2-\sigma)}} \begin{cases} \frac{x^2}{3} - \frac{x^3}{4} & x \ll 1 \\ 1 - \frac{3}{2x} & x \gg 1 \end{cases} = 1 + \frac{\tilde{g}^2}{2} \begin{cases} \left(\frac{1}{3} - \frac{x}{4} \right) \frac{1}{x^{2(1-\sigma)}} & x \ll 1 \\ \left(1 - \frac{3}{2x} \right) \frac{1}{x^{2(2-\sigma)}} & x \gg 1 \end{cases}. \quad (3.22)$$

Nesta expressão podemos ver que para valores muito pequenos e crescentes de x , a função $1 + \gamma(x) D(x)$ decresce para $\sigma \leq 1$ e cresce para $\sigma > 1$. Adicionalmente, para valores muito grandes e crescentes de x , a função $1 + \gamma(x) D(x)$ decresce para $\sigma < 2$ e cresce para $\sigma \geq 2$. Desse modo, para estudar o comportamento do expoente característico de tunelamento em função da frequência ω do banho de osciladores, consideramos os casos $\sigma < 1$, $\sigma = 1$, $1 < \sigma < 2$, $\sigma = 2$ e $\sigma > 2$.

No caso $\sigma < 1$, consideramos na Fig. 3.1 os valores (a) $\sigma = -1$, (b) $\sigma = -0.5$, (c) $\sigma = 0$ e (d) $\sigma = 0.5$. A Fig. 3.1 mostra o expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ em função de ωT_0 para $U_1 = 0$ e os três valores de \tilde{g} mencionados, $\tilde{g} = 1, 0.5$ e 0.1 . Como foi indicado antes, o

expoente característico de tunelamento cresce monotonicamente com \tilde{g} para valores de ωT_0 e σ pré-fixados, diminuindo a taxa total de tunelamento. Este comportamento pode ser observado em todos os casos estudados nas Figs. 3.1 – 3.5.

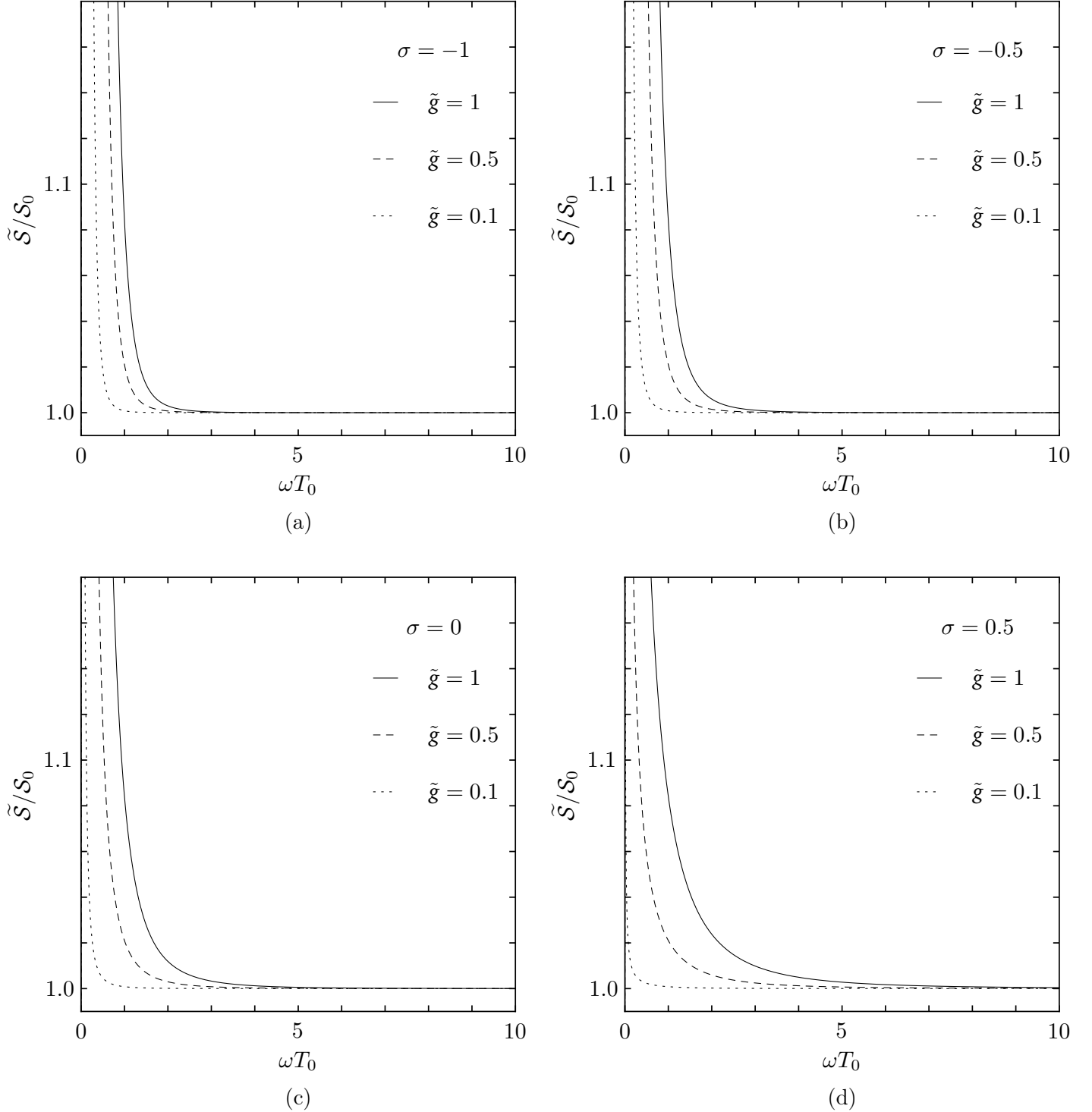


Fig. 3.1 Expoente característico de tunelamento normalizado \tilde{S}/S_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = -1$, (b) $\sigma = -0.5$, (c) $\sigma = 0$ e (d) $\sigma = 0.5$.

O comportamento qualitativo nos casos mostrados na Fig. 3.1 é similar. De acordo com a expressão (3.22), no caso $\sigma < 1$, a função $1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0)$ decresce para valores crescentes muito pequenos e muito grandes de ωT_0 , na forma

$$1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0) \approx 1 + \frac{\tilde{g}^2}{2} \begin{cases} \frac{1}{3(\omega T_0)^{2(1-\sigma)}} & \omega T_0 \ll 1 \\ \frac{1}{(\omega T_0)^{2(2-\sigma)}} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases}. \quad (3.23)$$

De acordo com esta expressão e também com a Fig. 3.1, para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ se aproxima do valor \mathcal{S}_0 que corresponde ao caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico. Assim, para $\omega T_0 \rightarrow \infty$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento é nulo. De acordo com a Fig. 3.1, ao diminuir ωT_0 o expoente característico de tunelamento aumenta, diminuindo a taxa total de tunelamento. Para $\omega T_0 \rightarrow 0$, de acordo com a expressão (3.23), o expoente característico de tunelamento é infinito e a taxa total de tunelamento é zero. Este resultado, porém, e os obtidos mais adiante para outros valores de $\sigma < 2$ no caso $\omega T_0 \rightarrow 0$, devem ser vistos com precaução. Valores muito pequenos de ωT_0 não são adequados quando assumimos pequenos valores de γ na Eq. (3.11) para $\sigma < 2$.

A Fig. 3.2 mostra o caso $\sigma = 1$. Neste caso, de maneira semelhante ao caso $\sigma < 1$, o expoente característico de tunelamento aumenta, diminuindo a taxa total de tunelamento, ao diminuir ωT_0 . Diferentemente do caso $\sigma < 1$, o expoente característico de tunelamento neste caso é finito para $\omega T_0 \rightarrow 0$.

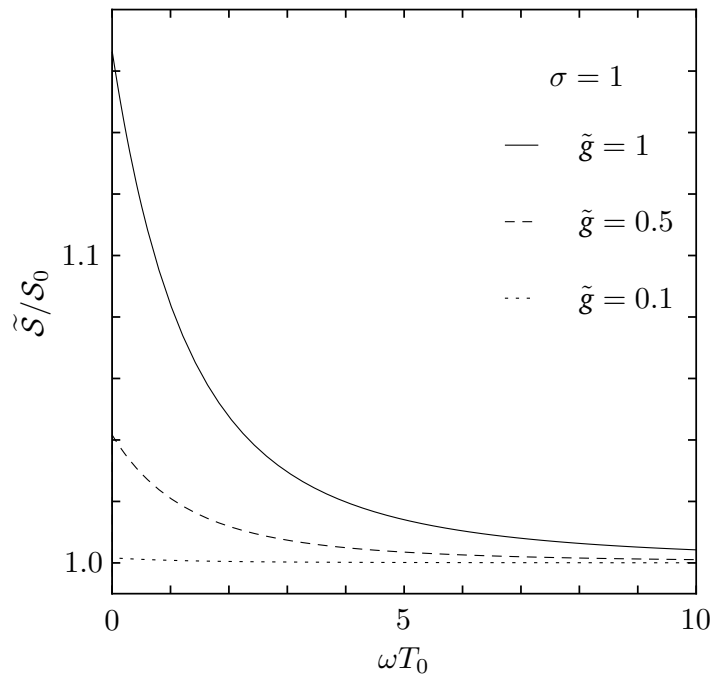


Fig. 3.2 Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) no caso $\sigma = 1$.

De acordo com a expressão (3.22), no caso $\sigma = 1$, a função $1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0)$ decresce para valores crescentes muito pequenos e muito grandes de ωT_0 , na forma

$$1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0) \approx 1 + \frac{\tilde{g}^2}{2} \begin{cases} \frac{1}{3} - \frac{\omega T_0}{4} & \omega T_0 \ll 1 \\ \frac{1}{(\omega T_0)^2} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases}. \quad (3.24)$$

De acordo com esta expressão, para $\omega T_0 \rightarrow 0$, o expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ toma o valor $1 + \tilde{g}^2/6$ (Fig. 3.2). Assim como no caso $\sigma < 1$, de acordo com a expressão (3.24) e também com a Fig. 3.2, para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ se aproxima do valor \mathcal{S}_0 , sendo nulo o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento para $\omega T_0 \rightarrow \infty$. A Fig. 3.2, que representa o caso $\sigma = 1$ no presente trabalho, corresponde à Fig. 1 da Ref. 2.

No caso $1 < \sigma < 2$, consideramos na Fig. 3.3 os valores (a) $\sigma = 1.25$, (b) $\sigma = 1.5$ e (c) $\sigma = 1.75$. Diferentemente do caso $\sigma \leq 1$ (Figs. 3.1 e 3.2), o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ neste caso aumenta, diminuindo a taxa total de tunelamento, ao diminuir ωT_0 até um certo valor onde $\tilde{\mathcal{S}}$ alcança um valor máximo. Para valores menores de ωT_0 , o expoente característico de tunelamento diminui, aumentando a taxa total de tunelamento. A região de ωT_0 para a qual o expoente de tunelamento diminui ao diminuir ωT_0 é maior para valores maiores de σ .

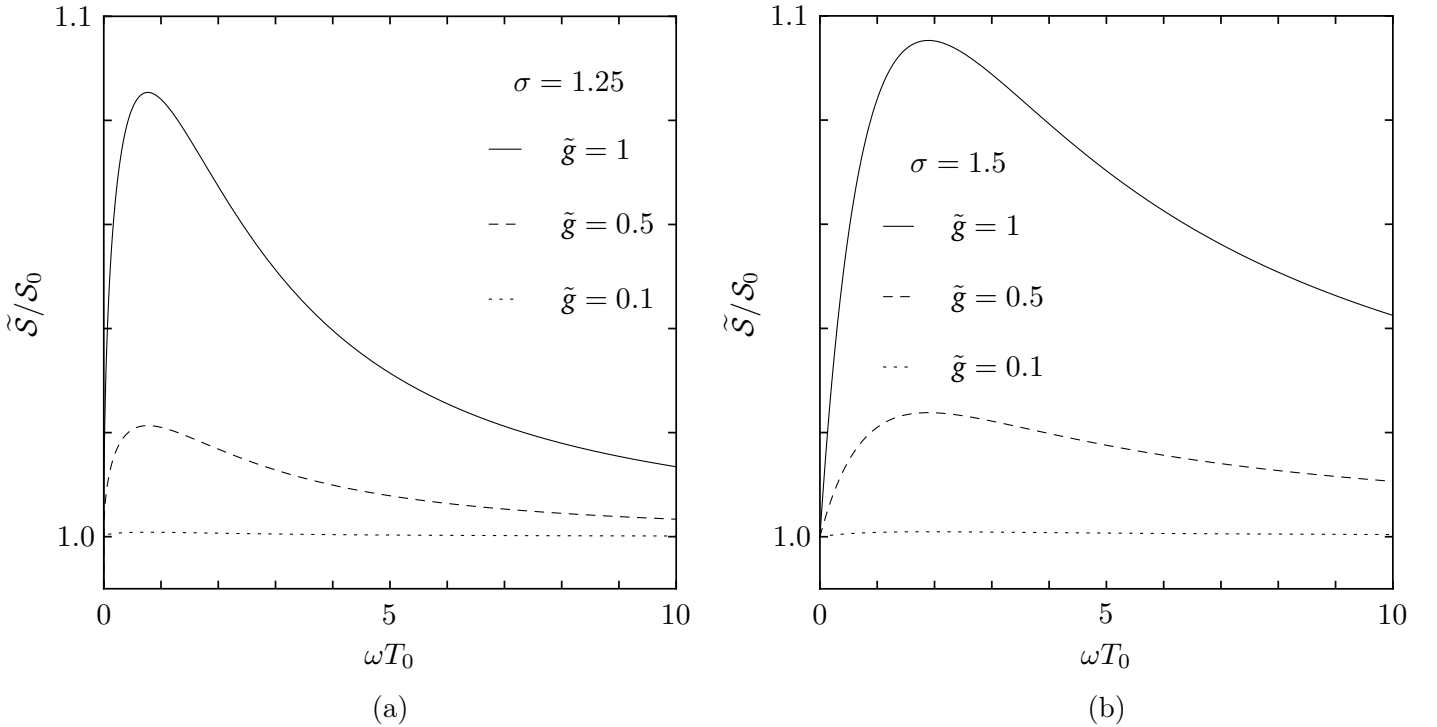


Fig. 3.3 Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = 1.25$ e (b) $\sigma = 1.5$.

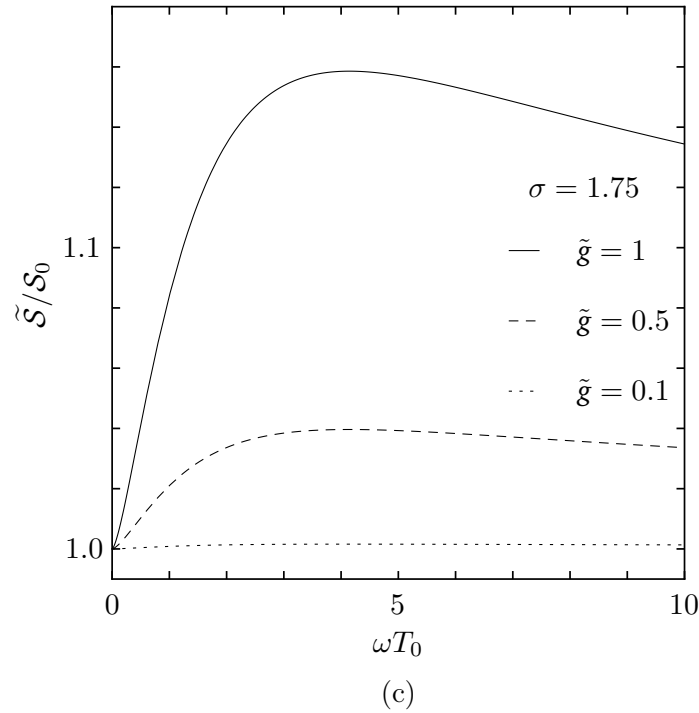


Fig. 3.3 (Cont.) Exponente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) no caso (c) $\sigma = 1.75$.

O comportamento qualitativo nos casos mostrados na Fig. 3.3 é similar. De acordo com a expressão (3.22), no caso $1 < \sigma < 2$, a função $1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0)$ cresce para valores crescentes muito pequenos de ωT_0 e decresce para valores crescentes muito grandes de ωT_0 , na forma

$$1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0) \approx 1 + \frac{\tilde{g}^2}{2} \begin{cases} \frac{1}{3}(\omega T_0)^{2(\sigma-1)} & \omega T_0 \ll 1 \\ \frac{1}{(\omega T_0)^{2(2-\sigma)}} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases}. \quad (3.25)$$

De acordo com esta expressão e também com a Fig. 3.3, assim como no caso $\sigma \leq 1$ (Figs. 3.1 e 3.2), para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ se aproxima do valor \mathcal{S}_0 , sendo nulo o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento para $\omega T_0 \rightarrow \infty$. Esta aproximação do valor \mathcal{S}_0 é mais lenta para valores maiores de σ . De acordo também com a expressão (3.25) e com a Fig. 3.3, diferentemente do caso $\sigma \leq 1$, para $1 < \sigma < 2$ temos que $\tilde{\mathcal{S}} \rightarrow \mathcal{S}_0$ para $\omega T_0 \rightarrow 0$. Assim, para $1 < \sigma < 2$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento é também nulo para $\omega T_0 \rightarrow 0$.

A Fig. 3.4 mostra o caso $\sigma = 2$. Neste caso, ao diminuir ωT_0 , o expoente característico de tunelamento diminui, aumentando a taxa total de tunelamento. Este comportamento é o oposto do comportamento observado para $\sigma < 1$ na Fig. 3.1 e $\sigma = 1$ na Fig. 3.2. Diferentemente do caso $1 < \sigma < 2$ mostrado na

Fig. 3.3, onde o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ também diminui ao diminuir ωT_0 a partir de um certo valor, $\tilde{\mathcal{S}}$ diminui no caso $\sigma = 2$ ao diminuir ωT_0 para todos os valores de ωT_0 . Adicionalmente, de acordo com a Fig. 3.4, diferentemente dos casos estudados anteriormente, o expoente característico de tunelamento no caso $\sigma = 2$ não se aproxima do valor \mathcal{S}_0 para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 .

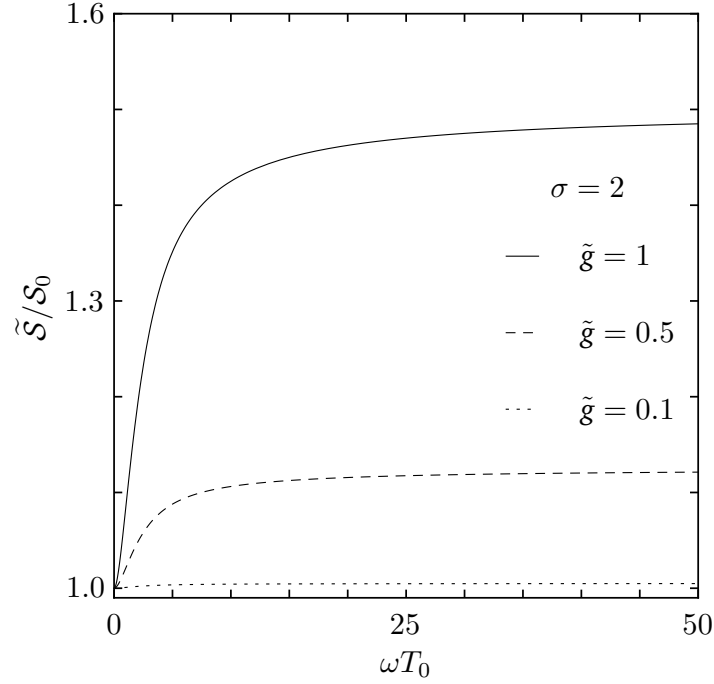


Fig. 3.4 Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) no caso $\sigma = 2$.

De acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11), para $\sigma = 2$, o comportamento de $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ em função de ωT_0 para $U_1 = 0$ e um valor dado de \tilde{g} é determinado unicamente pela função $D(\omega T_0)$ na forma $1 + (\tilde{g}^2/2) D(\omega T_0)$. Desse modo, o comportamento mostrado na Fig. 3.4 para um valor dado de \tilde{g} é similar ao comportamento da função $D(x)$ mostrado na Fig. 2.1. Dado que a função $D(x)$ se aproxima do valor 1 para valores crescentes e muito grandes de x , o expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ se aproxima então do valor $1 + \tilde{g}^2/2$ para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 (Fig. 3.4).

Desse modo, no caso $\sigma = 2$, diferentemente dos casos estudados anteriormente, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento não desaparece para $\omega T_0 \rightarrow \infty$. Este resultado contrasta com o argumento seguido na Ref. 2 de que devido à presença do contratérmo (3.13) no hamiltoniano (1.1), o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores deve desaparecer para $\omega T_0 \rightarrow \infty$. Na Ref. 2 foi considerado somente o caso que corresponde a $\sigma = 1$ no presente trabalho sendo que, como indicado antes, a Fig. 1 da Ref. 2 corresponde à Fig. 3.2 do presente trabalho. Como mencionamos antes, o valor $\sigma = 2$ corresponde ao caso $C_\alpha = m_\alpha \omega_\alpha^2$ indicado na Ref. 16, o qual garante a invariância translacional do hamiltoniano (1.1) para $f_\alpha(x) = \frac{C_\alpha}{m_\alpha \omega_\alpha^2} x$ no caso $V(x) = 0$.

De acordo com a expressão (3.22), no caso $\sigma = 2$, a função $1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0)$ cresce para valores crescentes muito pequenos e muito grandes de ωT_0 , na forma

$$1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0) \approx 1 + \frac{\tilde{g}^2}{2} \begin{cases} \frac{1}{3}(\omega T_0)^2 & \omega T_0 \ll 1 \\ 1 - \frac{3}{2\omega T_0} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases}. \quad (3.26)$$

De acordo com esta expressão, para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ se aproxima do valor $\mathcal{S}_0 (1 + \tilde{g}^2/2)$. Este resultado está de acordo com o obtido antes de maneira mais direta a partir do comportamento da função $D(x)$ para valores muito grandes de x . De acordo também com a expressão (3.26) e com a Fig. 3.4, assim como no caso $1 < \sigma < 2$, temos que $\tilde{\mathcal{S}} \rightarrow \mathcal{S}_0$ para $\omega T_0 \rightarrow 0$. Desse modo, para $\sigma = 2$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento é nulo para $\omega T_0 \rightarrow 0$.

No caso $\sigma > 2$, consideramos na Fig. 3.5 os valores (a) $\sigma = 2.5$ e (b) $\sigma = 3$. Neste caso, assim como no caso $\sigma = 2$, ao diminuir ωT_0 , para todos os valores de ωT_0 , o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ diminui, aumentando a taxa total de tunelamento. Segundo a Fig. 3.5, também como no caso $\sigma = 2$, $\tilde{\mathcal{S}}$ não se aproxima do valor \mathcal{S}_0 para valores crescentes de ωT_0 . No caso $\sigma > 2$, porém, diferentemente do caso $\sigma = 2$, $\tilde{\mathcal{S}}$ também não se aproxima de um outro valor constante para valores crescentes de ωT_0 .

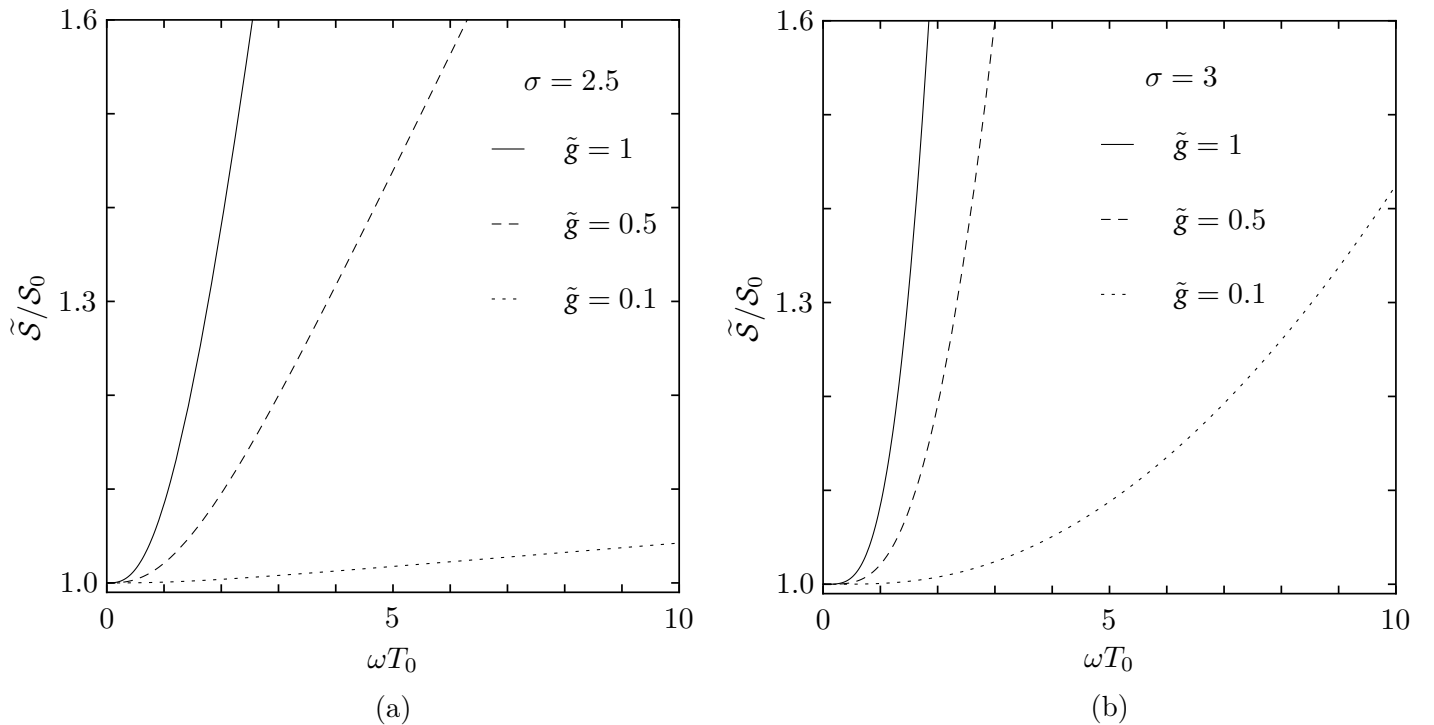


Fig. 3.5 Expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = 2.5$ e (b) $\sigma = 3$.

O comportamento qualitativo nos casos mostrados na Fig. 3.5 é similar. De acordo com a expressão (3.22), no caso $\sigma > 2$, a função $1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0)$ cresce para valores crescentes muito pequenos e muito grandes de ωT_0 , na forma

$$1 + \gamma(\omega T_0)D(\omega T_0) \approx 1 + \frac{\tilde{g}^2}{2} \begin{cases} \frac{1}{3}(\omega T_0)^{2(\sigma-1)} & \omega T_0 \ll 1 \\ (\omega T_0)^{2(\sigma-2)} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases}. \quad (3.27)$$

De acordo com esta expressão, para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ aumenta indefinidamente, diminuindo a taxa total de tunelamento a zero. Desse modo, para $\sigma > 2$, assim como no caso $\sigma = 2$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento não desaparece para $\omega T_0 \rightarrow \infty$. Este resultado, porém, deve ser tomado com precaução. Valores muito grandes de ωT_0 são inadequados para pequenos valores de γ na Eq. (3.11) com $\sigma > 2$. De acordo também com a expressão (3.27) e com a Fig. 3.5, assim como no caso $1 < \sigma \leq 2$ (Figs. 3.3 e 3.4), temos que $\tilde{\mathcal{S}} \rightarrow \mathcal{S}_0$ para $\omega T_0 \rightarrow 0$. Desse modo, para $\sigma > 2$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento é nulo para $\omega T_0 \rightarrow 0$.

A Fig. 3.6 reúne os comportamentos típicos observados nas Figs. 3.1 – 3.5 para $\sigma < 1$, $\sigma = 1$, $1 < \sigma < 2$, $\sigma = 2$ e $\sigma > 2$.

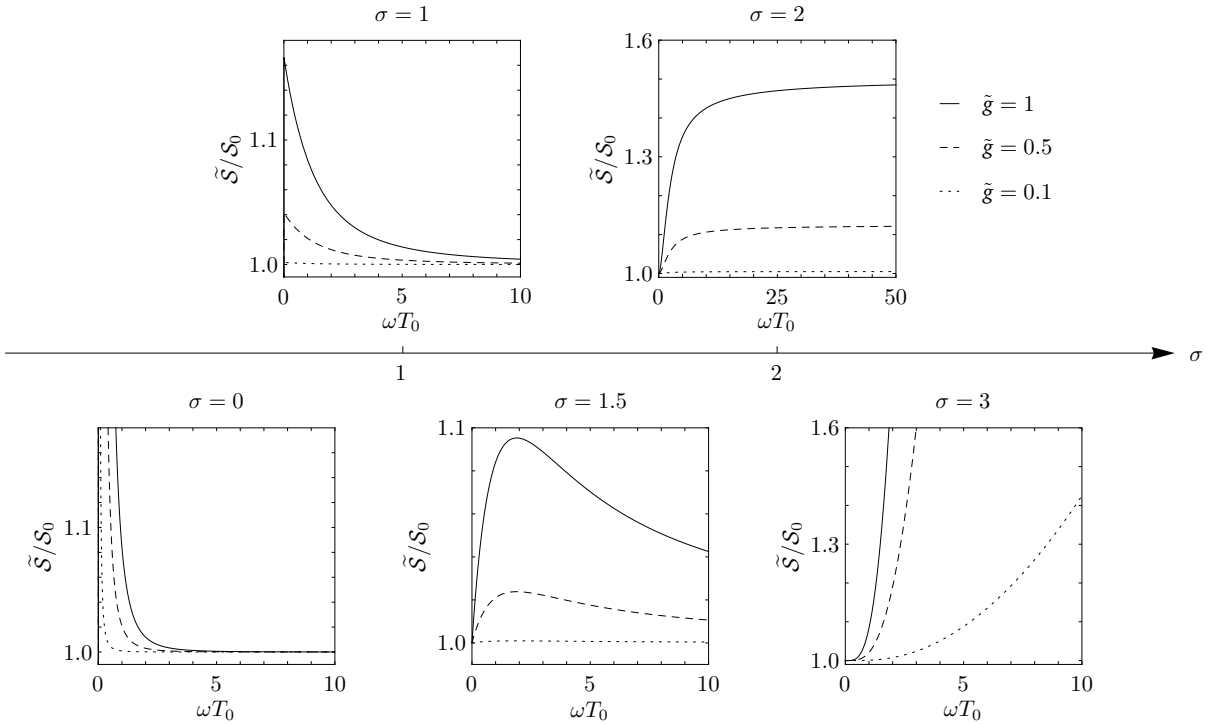


Fig. 3.6 Comportamentos típicos do expoente característico de tunelamento normalizado $\tilde{\mathcal{S}}/\mathcal{S}_0$ para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.21) e (3.11) nos casos $\sigma = 1$ e $\sigma = 2$ e nas regiões $\sigma < 1$ (caracterizada através do caso $\sigma = 0$), $1 < \sigma < 2$ (caracterizada através do caso $\sigma = 1.5$) e $\sigma > 2$ (caracterizada através do caso $\sigma = 3$).

Utilizando a Fig. 3.6 podemos observar as seguintes características gerais no comportamento do expoente característico de tunelamento em dependência dos valores de \tilde{g} , ωT_0 e σ . Como foi indicado antes, o expoente característico de tunelamento cresce monotonicamente com \tilde{g} para valores de ωT_0 e σ pré-fixados, diminuindo a taxa total de tunelamento. Adicionalmente, para um valor dado de \tilde{g} , o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ aumenta ao diminuir ωT_0 para $\sigma \leq 1$ e diminui para $\sigma \geq 2$. No caso $1 < \sigma < 2$, $\tilde{\mathcal{S}}$ aumenta ao diminuir ωT_0 até um certo valor a partir do qual, $\tilde{\mathcal{S}}$ diminui. Também, para $\omega T_0 \rightarrow \infty$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores na taxa total de tunelamento é nulo para $\sigma < 2$, não desaparecendo esse efeito, porém, para $\sigma \geq 2$. Para $\omega T_0 \rightarrow 0$, esse efeito não é nulo para $\sigma \leq 1$, sendo nulo, porém, para $\sigma > 1$.

Além do comportamento do expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$, estudaremos também o comportamento do tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira (Eq. (2.98)). Adicionalmente, obteremos os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira (Eqs. (2.95) e (2.77)). Como indicamos nas Eqs. (2.96) e (2.97), o tempo \tilde{T} caracteriza os tempos de travessia T_X e T_Y através da barreira para $t = 0$. Além dos tempos de travessia T_X e T_Y que correspondem às condições $X(T_X) = d$ e $Y(T_Y) = d$, obteremos também os instantes de tempo t_{1X} e t_{1Y} (Eqs. (2.81) e (2.82)) que correspondem a posições dadas na região da barreira.

3.1.2 Trajetórias clássicas reais e tempos complexos

Como indicamos anteriormente, o tunelamento da partícula pode ser descrito através de trajetórias clássicas reais $X(t_{1X})$ e $Y(t_{1Y})$ que evoluem nos tempos complexos t_{1X} e t_{1Y} , respectivamente. O valor da coordenada na trajetória $X(t_{1X})$ em unidades da largura d da barreira, ou seja, $p_X = \frac{X(t_{1X})}{d}$, com $0 \leq p_X \leq 1$, pode ser expresso em função dos valores de t_{1X} empregando a Eq. (2.79). Utilizando a função de densidade espectral (3.1) e a Eq. (2.71) para $a_\omega^{(0)}(t)$, temos

$$\begin{aligned} p_X &= i \frac{t_{1X}}{T_0} + \frac{u_1}{2} t_{1X}^{(0)2} - 2i\gamma \left[\frac{t_{1X}^{(0)}}{T_0} - \frac{\sin \omega t_{1X}^{(0)}}{\omega T_0} - \frac{i}{2} \left(e^{i\omega t_{1X}^{(0)}} - i\omega t_{1X}^{(0)} - 1 \right) a_\omega^{(0)}(t) \right] \\ &= \frac{i}{T_0} \left(t_{1X} - 2\gamma t_{1X}^{(0)} + 2\gamma \frac{\sin \omega t_{1X}^{(0)}}{\omega} \right) + \frac{u_1}{2} t_{1X}^{(0)2} + \gamma a_\omega^{(0)}(t) \left(1 - \cos \omega t_{1X}^{(0)} + i\omega t_{1X}^{(0)} \right. \\ &\quad \left. - i \sin \omega t_{1X}^{(0)} \right), \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde $t_{1X}^{(0)}$ é dado pela Eq. (2.80). A segunda igualdade da expressão (3.28) corresponde à Eq. (51) da Ref. 2. Porém, diferentemente dessa equação, t_{1X} e $t_{1X}^{(0)}$ na expressão (3.28) são diferenciados, sendo termos até primeira ordem e ordem zero, respectivamente, no campo elétrico e na interação da partícula com o banho de osciladores.

Os instantes de tempo t_{1X} que correspondem a posições dadas na região da barreira podem ser expressos em função de p_X utilizando a expressão (3.28) ou, de maneira mais direta, substituindo a função de

densidade espectral (3.1) na Eq. (2.81). Assim temos

$$t_{1X}(p_X) = -iT_0 \left\{ p_X + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} p_X^2 + 2\gamma \left[p_X - \frac{\sinh \omega T_0 p_X}{\omega T_0} + \frac{1}{2} \left(e^{\omega T_0 p_X} - \omega T_0 p_X - 1 \right) a_\omega^{(0)}(t) \right] \right\}. \quad (3.29)$$

Os instantes de tempo t_{1Y} podem ser obtidos empregando as Eqs. (3.29) e (2.82). Com $p_Y = \frac{Y(t_{1Y})}{d}$, $0 \leq p_Y \leq 1$, temos

$$t_{1Y}(p_Y) = -t_{1X}(p_Y), \quad (3.30)$$

onde $t_{1X}(p_Y)$ é dado pela expressão (3.29) substituindo p_X por p_Y .

As Eqs. (3.29) e (3.30) descrevem o tunelamento da partícula em interação com um banho de osciladores com uma única frequência ω através de trajetórias clássicas reais $X(t_{1X})$ e $Y(t_{1Y})$ que evoluem nos tempos complexos t_{1X} e t_{1Y} , respectivamente. Para $\gamma \approx 0$ na Eq. (3.29), t_{1X} toma valores ao longo de um contorno na metade inferior do plano complexo enquanto t_{1Y} na Eq. (3.30) toma valores ao longo de um contorno na metade superior do plano complexo.

O tempo de travessia T_X através da barreira pode ser obtido através da Eq. (3.29) utilizando a condição $t_{1X}(1) = T_X$ ou substituindo a função de densidade espectral (3.1) na Eq. (2.95). Desse modo temos

$$T_X = -iT_0 \left\{ 1 + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + 2\gamma \left[D(\omega T_0) + W(\omega T_0) \left(1 - e^{-i\omega t} \right) - \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\omega T_0} \right) \times \left(1 - e^{-\omega T_0} e^{-i\omega t} \right) \right] \right\}. \quad (3.31)$$

Esta expressão corresponde à Eq. (54) da Ref. 2, sendo que está última pode ser escrita na forma (3.31) empregando as definições das funções $D(x)$ e $W(x)$ (Eqs. (2.91) e (2.85), respectivamente, do presente trabalho ou Eqs. (56) e (57) da Ref. 2).

O tempo de travessia T_Y através da barreira pode ser obtido através da expressão (3.31) utilizando a Eq. (2.77). Assim temos

$$T_Y = -T_X,$$

onde T_X é dado pela expressão (3.31).

3.1.3 Comportamento do tempo característico de travessia através da barreira

De acordo com a Eq. (3.31) para $t = 0$ e a Eq. (2.96), o tempo característico de travessia através da barreira é dado por

$$\tilde{T} = T_0 \left[1 + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + 2\gamma \Delta(\omega T_0) \right], \quad (3.32)$$

onde a função $\Delta(x)$ é definida na Eq. (2.100). A expressão (3.32) pode ser obtida também substituindo a função de densidade espectral (3.1) na Eq. (2.98).

Para $\omega < \omega_c$ na Eq. (3.32), onde $\omega_c \approx 1.9T_0^{-1}$, temos que $\Delta(\omega T_0) < 0$, e para $\omega > \omega_c$ temos que $\Delta(\omega T_0) > 0$ (Fig. 2.2). Desse modo, a interação da partícula com um banho de osciladores com uma única frequência $\omega < \omega_c$ ($\omega > \omega_c$) diminui (aumenta) o tempo característico de travessia através da barreira em relação a T_0 numa quantidade $2\gamma\Delta(\omega T_0)T_0$. Para $\omega = \omega_c$ temos que $\Delta(\omega T_0) = 0$ e portanto, a interação da partícula com um banho de osciladores com uma única frequência $\omega = \omega_c$ não afeta o tempo característico de travessia através da barreira. Estes resultados estão de acordo com os resultados gerais obtidos na subsubseção 2.4.2.1 para um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária.

De maneira similar ao caso do expoente característico de tunelamento visto na subseção 3.1.1, ao estudar o comportamento do tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira em função da frequência ω do banho de osciladores, consideramos a dependência de \tilde{T} com ω na Eq. (3.32) não somente através da função $\Delta(\omega T_0)$ mas também através da constante γ . Sendo γ uma função de ωT_0 segundo a Eq. (3.11), escrevemos a expressão (3.32) na forma

$$\tilde{T} = T_0 \left[1 + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0) \right], \quad (3.33)$$

onde para estudar o comportamento de \tilde{T} em função de ω , consideramos também o caso em que não há campo elétrico, ou seja, $U_1 = 0$. Neste caso, o tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 é dado pela função $1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0)$ ou $1 + 2\gamma(x)\Delta(x)$ onde $x = \omega T_0$. Esta função pode tomar valores menores, iguais ou maiores que 1 dependendo dos valores da função $\Delta(x)$ (Fig. 2.2).

Assim como no caso do expoente característico de tunelamento, consideramos na Eq. (3.11) os valores $\tilde{g} = 1, 0.5$ e 0.1 . De acordo com as Eqs. (3.11) e (3.33), para valores de ωT_0 tais que $\omega < \omega_c$ ($\omega > \omega_c$), onde $\omega_c \approx 1.9T_0^{-1}$, o tempo característico de travessia através da barreira decresce (cresce) monotonicamente com \tilde{g} para valores de ωT_0 e σ pré-fixados.

No caso do tempo característico de travessia através da barreira, os valores a serem considerados para a variável σ na Eq. (3.11) podem ser determinados a partir do comportamento da função $1 + 2\gamma(x)\Delta(x)$ para valores muito pequenos e muito grandes de x . Para a função $\Delta(x)$, dada na Eq. (2.100), temos que $\Delta(x) \approx -x^2/6 + x^3/4$ para $x \ll 1$ e $\Delta(x) \approx 1/2 - 3/(2x)$ para $x \gg 1$. Assim, de acordo com a Eq. (3.11), temos

$$1 + 2\gamma(x)\Delta(x) \approx 1 + \frac{\tilde{g}^2}{x^{2(2-\sigma)}} \begin{cases} -\frac{x^2}{6} + \frac{x^3}{4} & x \ll 1 \\ \frac{1}{2} - \frac{3}{2x} & x \gg 1 \end{cases} = 1 + \tilde{g}^2 \begin{cases} \left(-\frac{1}{6} + \frac{x}{4}\right) \frac{1}{x^{2(1-\sigma)}} & x \ll 1 \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{3}{2x}\right) \frac{1}{x^{2(2-\sigma)}} & x \gg 1 \end{cases}. \quad (3.34)$$

Nesta expressão podemos ver que para valores muito pequenos e crescentes de x , a função $1 + 2\gamma(x)\Delta(x)$

crece para $\sigma \leq 1$ e decresce para $\sigma > 1$. Adicionalmente, para valores muito grandes e crescentes de x , a função $1 + 2\gamma(x)\Delta(x)$ decresce para $\sigma < 2$ e cresce para $\sigma \geq 2$. Desse modo, assim como no caso do expoente característico de tunelamento, para estudar o comportamento do tempo característico de travessia através da barreira em função da frequência ω do banho de osciladores, consideramos os casos $\sigma < 1$, $\sigma = 1$, $1 < \sigma < 2$, $\sigma = 2$ e $\sigma > 2$.

No caso $\sigma < 1$, consideramos na Fig. 3.7 os valores (a) $\sigma = -1$, (b) $\sigma = -0.5$, (c) $\sigma = 0$ e (d) $\sigma = 0.5$. A Fig. 3.7 mostra o tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 em função de ωT_0 para $U_1 = 0$ e os três valores de \tilde{g} mencionados, $\tilde{g} = 1, 0.5$ e 0.1 . Como foi indicado antes, para valores de ωT_0 tais que $\omega < \omega_c$ ($\omega > \omega_c$), onde $\omega_c \approx 1.9 T_0^{-1}$, o tempo característico de travessia através da barreira decresce (cresce) monotonicamente com \tilde{g} para valores de ωT_0 e σ pré-fixados. Este comportamento pode ser observado em todos os casos estudados nas Figs. 3.7 – 3.11.

O comportamento qualitativo nos casos mostrados na Fig. 3.7 é similar. De acordo com a expressão (3.34), no caso $\sigma < 1$, a função $1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0)$ cresce para valores crescentes muito pequenos de ωT_0 e decresce para valores crescentes muito grandes de ωT_0 , na forma

$$1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0) \approx 1 + \tilde{g}^2 \begin{cases} -\frac{1}{6(\omega T_0)^{2(1-\sigma)}} & \omega T_0 \ll 1 \\ \frac{1}{2(\omega T_0)^{2(2-\sigma)}} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases}. \quad (3.35)$$

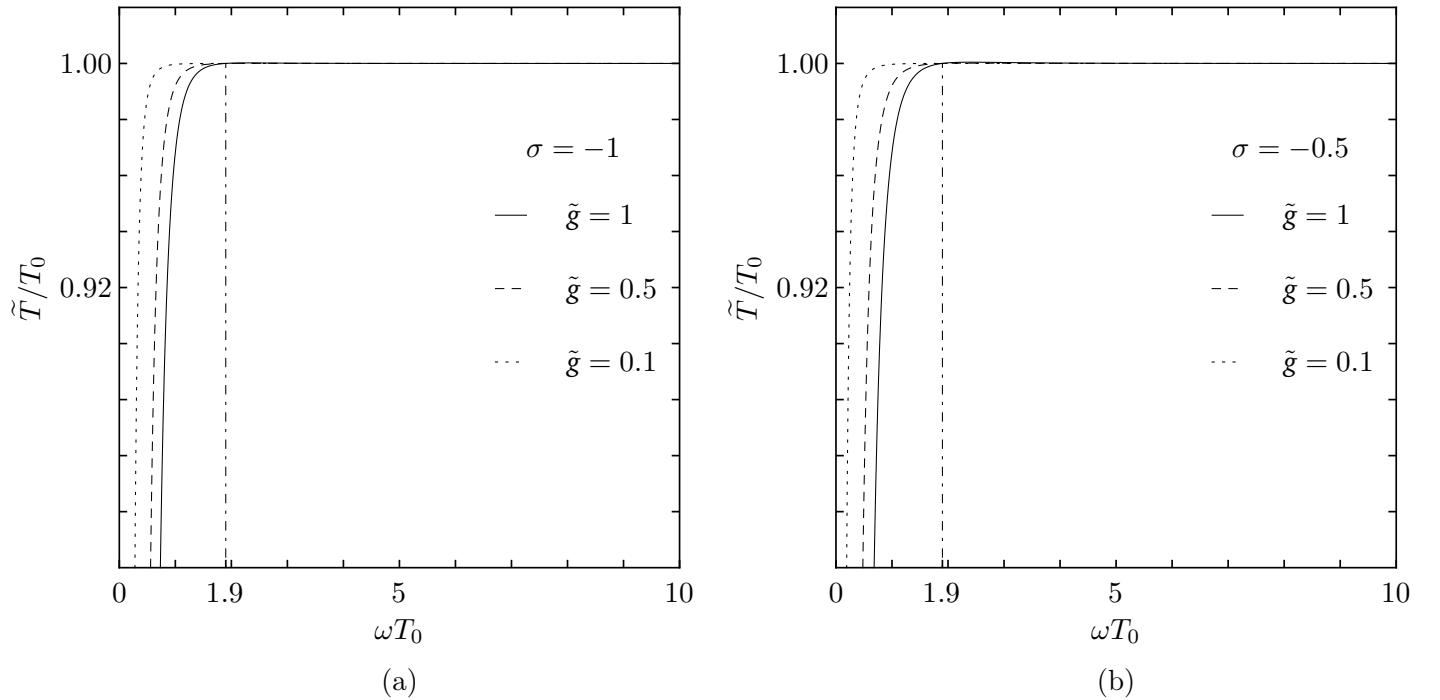


Fig. 3.7 Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = -1$ e (b) $\sigma = -0.5$.

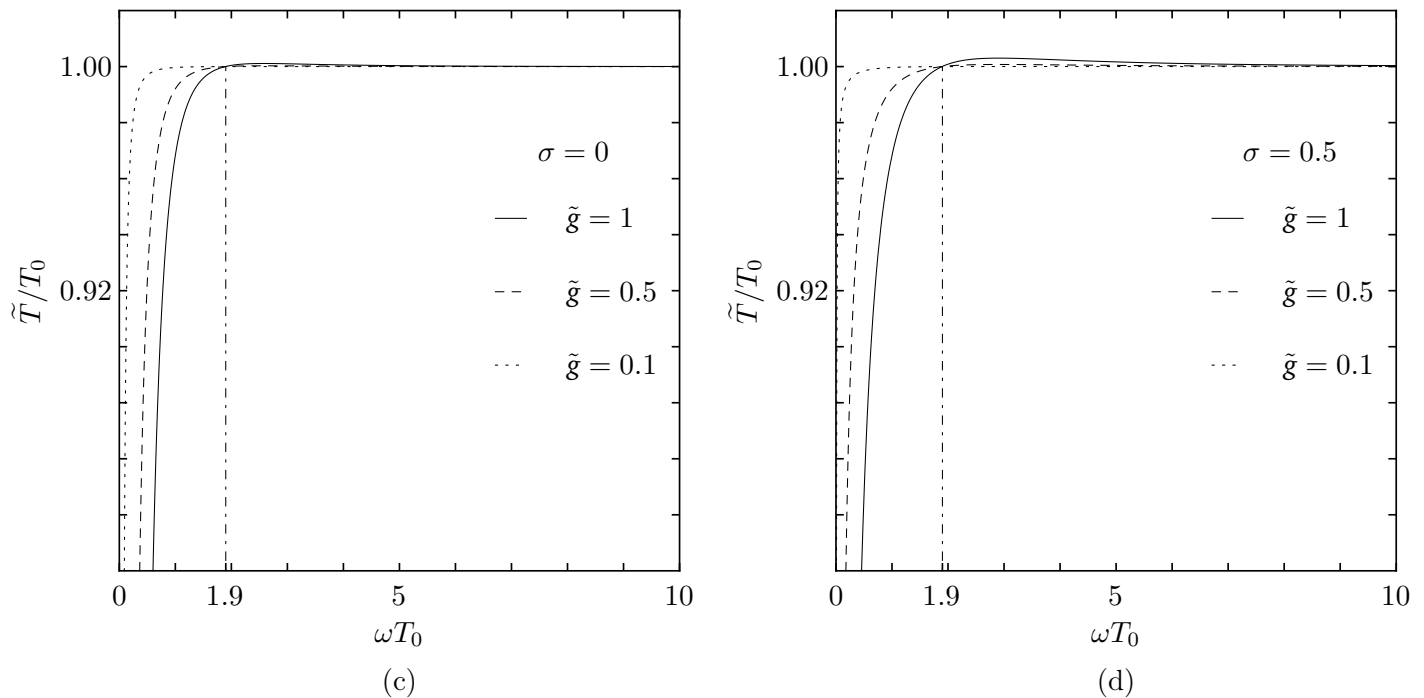


Fig. 3.7 (Cont.) Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos (c) $\sigma = 0$ e (d) $\sigma = 0.5$.

De acordo com a expressão (3.35) e também com a Fig. 3.7, para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira se aproxima do valor T_0 que corresponde ao caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico. Assim, para $\omega T_0 \rightarrow \infty$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo característico de travessia através da barreira é nulo. Nas Figs. 3.7 (b) – (d) podemos observar para $\tilde{g} = 1$ que o tempo característico de travessia \tilde{T} aumenta ao diminuir ωT_0 até um certo valor onde \tilde{T} alcança um valor máximo. Para valores menores de ωT_0 , \tilde{T} diminui passando pelo valor T_0 . Para $\omega T_0 \rightarrow 0$, de acordo com a expressão (3.35), o tempo característico de travessia através da barreira é infinito negativo. Este resultado, porém, e os obtidos mais adiante para outros valores de $\sigma < 2$ no caso $\omega T_0 \rightarrow 0$, devem ser tomados com precaução. Como indicamos ao estudar o expoente característico de tunelamento, e como pode ser visto na Eq. (3.11) para $\sigma < 2$, valores muito pequenos de ωT_0 implicam em valores muito grandes de γ o que contradiz a hipótese de uma interação fraca da partícula com o banho de osciladores. Como indicamos também no caso do expoente característico de tunelamento, a situação é a mesma no caso de valores muito grandes de ωT_0 na Eq. (3.11) para $\sigma > 2$ (Fig. 3.11).

A Fig. 3.8 mostra o caso $\sigma = 1$. Neste caso, de maneira semelhante ao caso $\sigma < 1$, o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira aumenta ao diminuir ωT_0 até um certo valor onde \tilde{T} alcança um valor máximo. Também, para valores menores de ωT_0 , o tempo característico de travessia \tilde{T} diminui passando pelo valor T_0 . Diferentemente do caso $\sigma < 1$, o tempo característico de travessia através da barreira neste caso é finito para $\omega T_0 \rightarrow 0$.

De acordo com a expressão (3.34), no caso $\sigma = 1$, a função $1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0)$ cresce para valores

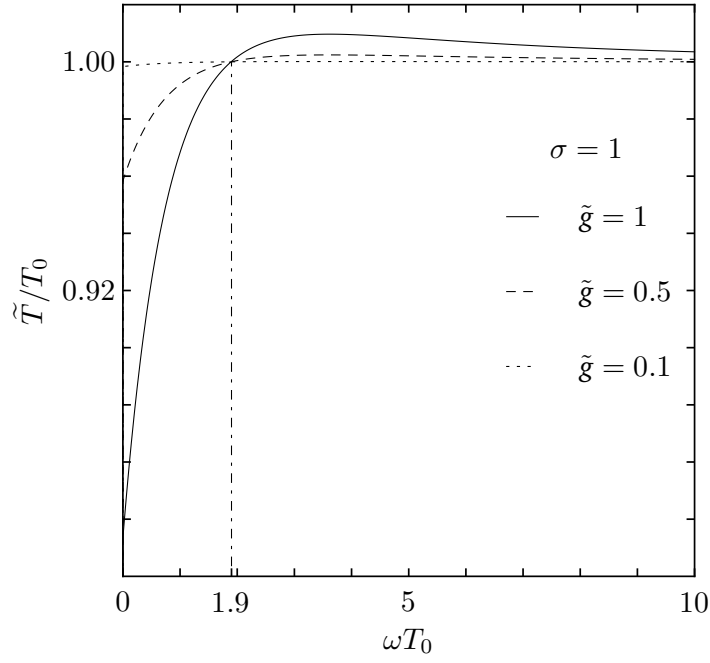


Fig. 3.8 Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) no caso $\sigma = 1$.

crescentes muito pequenos de ωT_0 e decresce para valores crescentes muito grandes de ωT_0 , na forma

$$1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0) \approx 1 + \tilde{g}^2 \begin{cases} -\frac{1}{6} + \frac{\omega T_0}{4} & \omega T_0 \ll 1 \\ \frac{1}{2(\omega T_0)^2} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases}. \quad (3.36)$$

De acordo com esta expressão, para $\omega T_0 \rightarrow 0$, o tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ toma o valor $1 - \tilde{g}^2/6$ (Fig. 3.8). Assim como no caso $\sigma < 1$, de acordo com a expressão (3.36) e também com a Fig. 3.8, para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira se aproxima do valor T_0 , sendo nulo o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo característico \tilde{T} para $\omega T_0 \rightarrow \infty$.

No caso $1 < \sigma < 2$, consideramos na Fig. 3.9 os valores (a) $\sigma = 1.25$, (b) $\sigma = 1.5$ e (c) $\sigma = 1.75$. Diferentemente do caso $\sigma \leq 1$ (Figs. 3.7 e 3.8), o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira neste caso, depois de alcançar seu valor máximo, diminui passando pelo valor T_0 ao diminuir ωT_0 até um certo valor menor que $\omega_c T_0$ ($\omega_c \approx 1.9 T_0^{-1}$), para o qual \tilde{T} alcança um valor mínimo. Este valor mínimo de \tilde{T} assim como o valor de ωT_0 para o qual ele é alcançado, são menores para valores menores de σ . Para valores menores de ωT_0 , o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira aumenta ao diminuir ωT_0 e retorna ao valor T_0 para $\omega T_0 \rightarrow 0$.

O comportamento qualitativo nos casos mostrados na Fig. 3.9 é similar. De acordo com a expressão (3.34), no caso $1 < \sigma < 2$, a função $1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0)$ decresce para valores crescentes muito pequenos

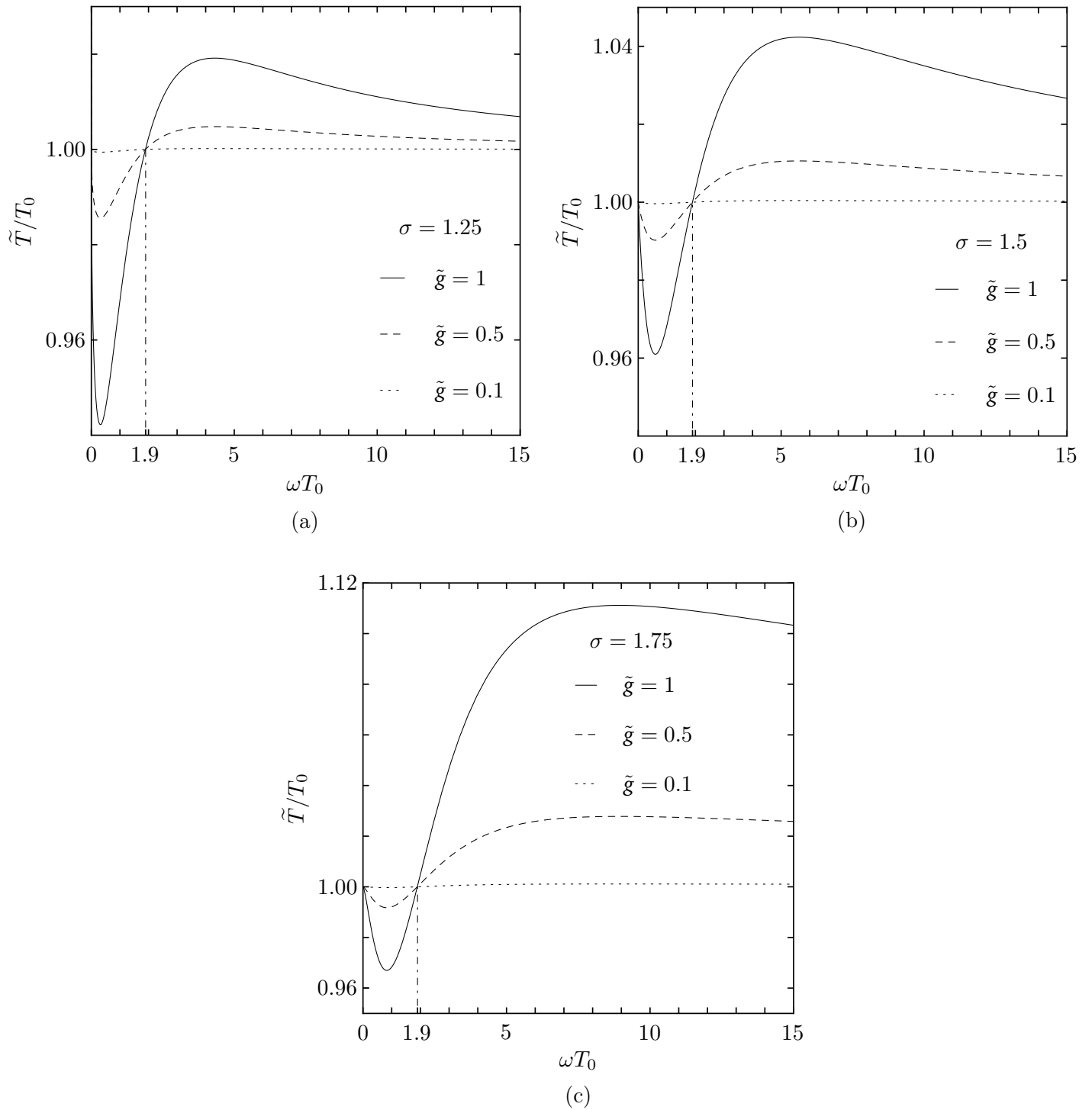


Fig. 3.9 Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = 1.25$, (b) $\sigma = 1.5$ e (c) $\sigma = 1.75$.

e muito grandes de ωT_0 , na forma dada pela expressão (3.37). De acordo com esta expressão e também com a Fig. 3.9, assim como no caso $\sigma \leq 1$ (Figs. 3.7 e 3.8), para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira se aproxima do valor T_0 , sendo nulo o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo característico \tilde{T} para $\omega T_0 \rightarrow \infty$. Esta

aproximação do valor T_0 é mais lenta para valores maiores de σ . De acordo também com a expressão (3.37) e com a Fig. 3.9, diferentemente do caso $\sigma \leq 1$, para $1 < \sigma < 2$ temos que $\tilde{T} \rightarrow T_0$ para $\omega T_0 \rightarrow 0$. Assim, para $1 < \sigma < 2$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo característico de travessia através da barreira é também nulo para $\omega T_0 \rightarrow 0$.

$$1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0) \approx 1 + \tilde{g}^2 \begin{cases} -\frac{1}{6}(\omega T_0)^{2(\sigma-1)} & \omega T_0 \ll 1 \\ \frac{1}{2(\omega T_0)^{2(2-\sigma)}} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases} . \quad (3.37)$$

A Fig. 3.10 mostra o caso $\sigma = 2$. Neste caso, ao diminuir ωT_0 para todos os valores de $\omega T_0 > \omega_c T_0$ ($\omega_c \approx 1.9 T_0^{-1}$), o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira diminui. Este comportamento é diferente do comportamento observado nos casos estudados anteriormente (Figs. 3.7 – 3.9), onde o tempo característico \tilde{T} diminui ao diminuir ωT_0 somente a partir de um certo valor de $\omega T_0 > \omega_c T_0$ onde \tilde{T} alcança um valor máximo. Adicionalmente, de acordo com a Fig. 3.10, diferentemente também dos casos estudados anteriormente, o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira no caso $\sigma = 2$ não se aproxima do valor T_0 para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 .

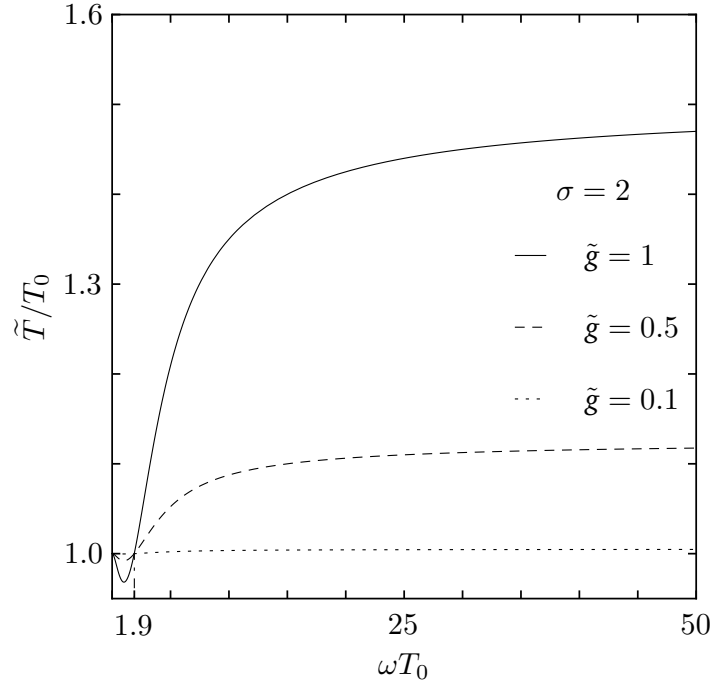


Fig. 3.10 Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) no caso $\sigma = 2$.

De acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11), para $\sigma = 2$, o comportamento de \tilde{T}/T_0 em função de ωT_0 para $U_1 = 0$ e um valor dado de \tilde{g} é determinado unicamente pela função $\Delta(\omega T_0)$ na forma $1 + \tilde{g}^2 \Delta(\omega T_0)$. Desse modo, o comportamento mostrado na Fig. 3.10 para um valor dado de \tilde{g} é similar ao comportamento

da função $\Delta(x)$ mostrado na Fig. 2.2. Dado que a função $\Delta(x)$ se aproxima do valor $1/2$ para valores crescentes e muito grandes de x , o tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ se aproxima então do valor $1 + \tilde{g}^2/2$ para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 (Fig. 3.10). Desse modo, no caso $\sigma = 2$, diferentemente dos casos estudados anteriormente, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo característico \tilde{T} não é nulo para $\omega T_0 \rightarrow \infty$.

De acordo com a expressão (3.34), no caso $\sigma = 2$, a função $1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0)$ decresce para valores crescentes muito pequenos de ωT_0 e cresce para valores crescentes muito grandes de ωT_0 , na forma

$$1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0) \approx 1 + \tilde{g}^2 \begin{cases} -\frac{1}{6}(\omega T_0)^2 & \omega T_0 \ll 1 \\ \frac{1}{2} - \frac{3}{2\omega T_0} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases}. \quad (3.38)$$

De acordo com esta expressão, para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira se aproxima do valor $T_0(1 + \tilde{g}^2/2)$. Este resultado está de acordo com o obtido antes de maneira mais direta a partir do comportamento da função $\Delta(x)$ para valores muito grandes de x . De acordo também com a expressão (3.38) e com a Fig. 3.10, assim como no caso $1 < \sigma < 2$, temos que $\tilde{T} \rightarrow T_0$ para $\omega T_0 \rightarrow 0$. Desse modo, para $\sigma = 2$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo característico de travessia através da barreira é nulo para $\omega T_0 \rightarrow 0$.

No caso $\sigma > 2$, consideramos na Fig. 3.11 os valores (a) $\sigma = 2.5$ e (b) $\sigma = 3$. Neste caso, assim como

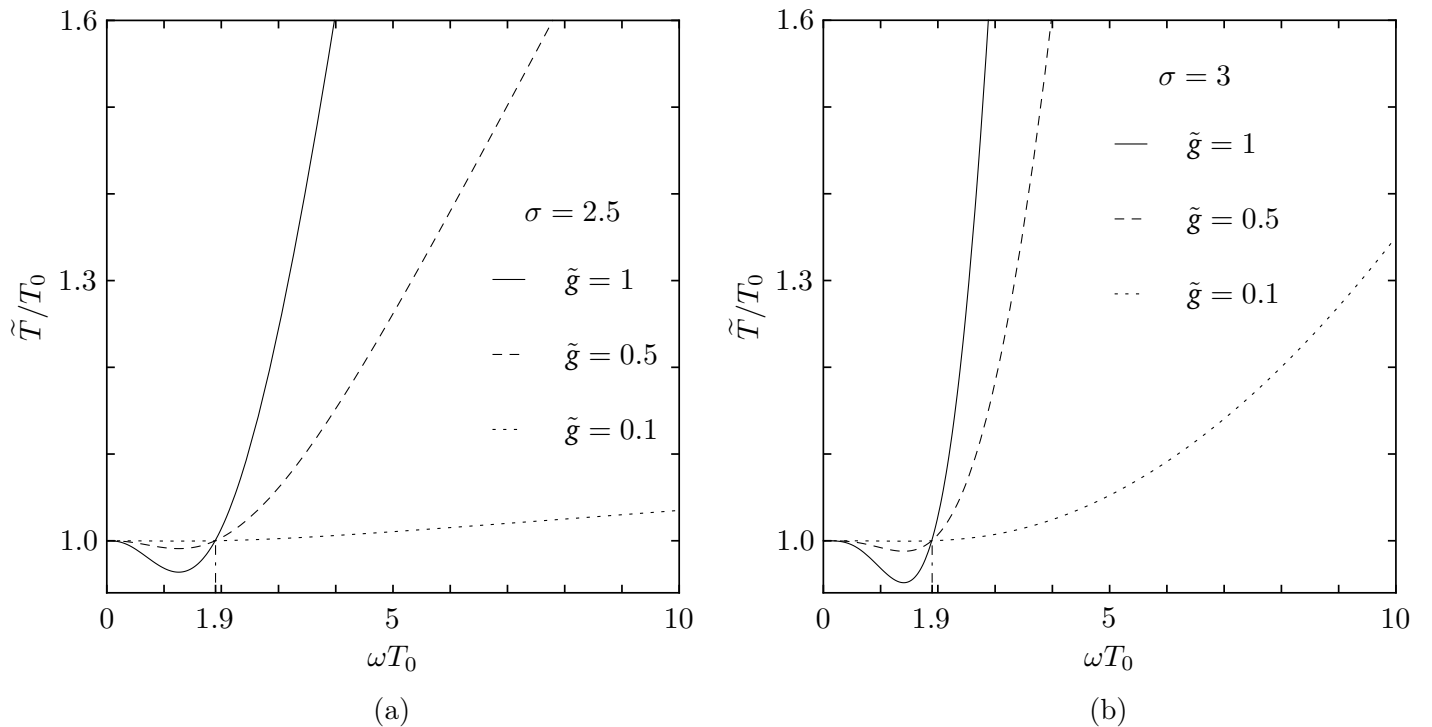


Fig. 3.11 Tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos (a) $\sigma = 2.5$ e (b) $\sigma = 3$.

no caso $\sigma = 2$, ao diminuir ωT_0 para todos os valores de $\omega T_0 > \omega_c T_0$ ($\omega_c \approx 1.9 T_0^{-1}$), o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira diminui. De acordo com a Fig. 3.11, também como no caso $\sigma = 2$, \tilde{T} não se aproxima do valor T_0 para valores crescentes de ωT_0 . No caso $\sigma > 2$, porém, diferentemente do caso $\sigma = 2$, \tilde{T} também não se aproxima de um outro valor constante para valores crescentes de ωT_0 .

De acordo com a expressão (3.34), no caso $\sigma > 2$, a função $1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0)$ decresce para valores crescentes muito pequenos de ωT_0 e cresce para valores crescentes muito grandes de ωT_0 , na forma

$$1 + 2\gamma(\omega T_0)\Delta(\omega T_0) \approx 1 + \tilde{g}^2 \begin{cases} -\frac{1}{6}(\omega T_0)^{2(\sigma-1)} & \omega T_0 \ll 1 \\ \frac{1}{2}(\omega T_0)^{2(\sigma-2)} & \omega T_0 \gg 1 \end{cases}. \quad (3.39)$$

Segundo esta expressão, para valores crescentes e muito grandes de ωT_0 , \tilde{T} aumenta indefinidamente. Desse modo, para $\sigma > 2$, assim como no caso $\sigma = 2$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo \tilde{T} não é nulo para $\omega T_0 \rightarrow \infty$. De acordo também com a expressão (3.39) e com a Fig. 3.11, assim como no caso $1 < \sigma \leq 2$ (Figs. 3.9 e 3.10), temos $\tilde{T} \rightarrow T_0$ para $\omega T_0 \rightarrow 0$. Assim, para $\sigma > 2$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo \tilde{T} é nulo para $\omega T_0 \rightarrow 0$.

A Fig. 3.12 reúne os comportamentos típicos vistos nas Figs. 3.7 – 3.11 para $\sigma < 1$, $\sigma = 1$, $1 < \sigma < 2$,

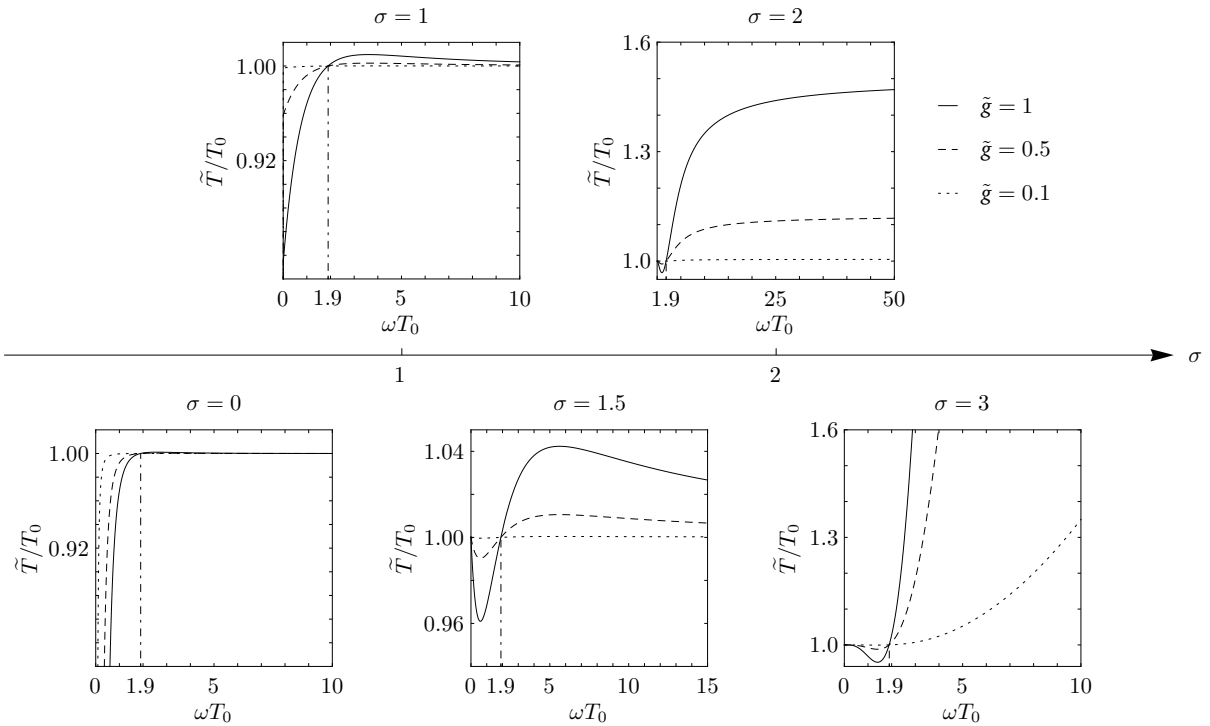


Fig. 3.12 Comportamentos típicos do tempo característico de travessia normalizado \tilde{T}/T_0 para $U_1 = 0$ e três valores de \tilde{g} de acordo com as Eqs. (3.33) e (3.11) nos casos $\sigma = 1$ e $\sigma = 2$ e nas regiões $\sigma < 1$ (caracterizada através do caso $\sigma = 0$), $1 < \sigma < 2$ (caracterizada através do caso $\sigma = 1.5$) e $\sigma > 2$ (caracterizada através do caso $\sigma = 3$).

$\sigma = 2$ e $\sigma > 2$. Utilizando a Fig. 3.12 podemos observar as seguintes características gerais no comportamento do tempo característico de travessia através da barreira em dependência dos valores de \tilde{g} , ωT_0 e σ . Como foi indicado antes, para valores de ωT_0 tais que $\omega < \omega_c$ ($\omega > \omega_c$), onde $\omega_c \approx 1.9 T_0^{-1}$, o tempo característico de travessia através da barreira decresce (cresce) monotonicamente com \tilde{g} para valores de ωT_0 e σ pré-fixados. Adicionalmente, para um valor dado de \tilde{g} , o tempo característico de travessia \tilde{T} através da barreira aumenta ao diminuir ωT_0 até um certo valor a partir do qual, \tilde{T} diminui passando pelo valor T_0 , no caso $\sigma \leq 1$. Para $\sigma > 1$, \tilde{T} diminui ao diminuir ωT_0 até um certo valor de $\omega T_0 < \omega_c T_0$ a partir do qual, \tilde{T} aumenta e retorna ao valor T_0 para $\omega T_0 \rightarrow 0$. Para $\sigma \geq 2$, \tilde{T} diminui ao diminuir ωT_0 para todos os valores de $\omega T_0 > \omega_c T_0$. Também, para $\omega T_0 \rightarrow \infty$, o efeito da interação da partícula com o banho de osciladores no tempo característico de travessia através da barreira é nulo para $\sigma < 2$, existindo esse efeito, porém, para $\sigma \geq 2$. Para $\omega T_0 \rightarrow 0$, esse efeito não é nulo para $\sigma \leq 1$, sendo nulo, porém, para $\sigma > 1$.

3.2 Banho ôhmico de osciladores

Como indicamos no capítulo anterior, um banho ôhmico de osciladores é caracterizado por uma função de densidade espectral

$$J(\omega) = m\eta\omega. \quad (3.40)$$

Neste caso, de maneira similar ao caso de um banho de osciladores com uma única frequência (seção 3.1), podemos obter o espectro de transmissão da partícula substituindo a Eq. (3.40) na expressão (2.89), onde devemos calcular também a taxa total de tunelamento $\Gamma_0^{\text{total}}(E)$ através da Eq. (2.92). Substituindo nesta última a função de densidade espectral (3.40) e a função $D(\omega T_0)$ segundo a Eq. (2.91), obtemos para o termo da integral sobre ω a expressão

$$\frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} D(\omega T_0) = \frac{\eta T_0}{\pi} \lim_{y \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{y} - \frac{3}{4y^2} + \frac{e^{-y}}{y^2} - \frac{e^{-y}}{y} + E_1(y) - \frac{e^{-2y}}{4y^2} + \frac{e^{-2y}}{2y} - E_1(2y) \right], \quad (3.41)$$

onde

$$E_1(z) = \int_z^{\infty} e^{i\delta} dz' \frac{e^{-z'}}{z'}, \quad (3.42)$$

é a chamada integral exponencial¹⁷, com $|\arg z| < \pi$ e $-\pi/2 \leq \delta \leq \pi/2$. Neste trabalho utilizamos a expressão (3.42) com $z = \alpha y$, onde $\alpha = |\alpha| e^{i\delta} \neq 0$ e $y > 0$. Substituindo na Eq. (3.41) o desenvolvimento em série da integral exponencial

$$E_1(z) = -\gamma - \ln z + z - \frac{z^2}{2 \cdot 2!} + \frac{z^3}{3 \cdot 3!} - \frac{z^4}{4 \cdot 4!} + \dots, \quad (3.43)$$

onde $\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 + 1/2 + 1/3 + \dots + 1/n - \ln n) \approx 0.577$ é a chamada constante de Euler¹⁸, obtemos

$$\frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} D(\omega T_0) = \frac{\eta T_0}{\pi} \ln 2. \quad (3.44)$$

Assim, de acordo com a Eq. (2.92), temos

$$\Gamma_0^{\text{total}}(E) = N e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \left(1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{\eta T_0}{\pi} \ln 2 \right)}. \quad (3.45)$$

Para obter o espectro de transmissão da partícula (2.89) devemos calcular também o termo da integral sobre ω dado por $\frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0) (1 - e^{-i\omega t})$. Este termo é igual a zero para $t = 0$. Para $t \neq 0$, empregando a função de densidade espectral (3.40) e a função $W(\omega T_0)$ segundo a Eq. (2.85), temos

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0) (1 - e^{-i\omega t}) \\ &= \frac{\eta T_0}{2\pi} \lim_{y \rightarrow 0^+} \left\{ \frac{1}{2y^2} - \frac{e^{-i\frac{t}{T_0}y}}{2y^2} + \frac{i\frac{t}{T_0} e^{-i\frac{t}{T_0}y}}{2y} - \frac{\left(i\frac{t}{T_0}\right)^2}{2} E_1\left(i\frac{t}{T_0}y\right) - \frac{e^{-y}}{y^2} + \frac{e^{-y}}{y} - E_1(y) \right. \\ & \quad + \frac{e^{-\left(1+i\frac{t}{T_0}\right)y}}{y^2} - \frac{\left(1+i\frac{t}{T_0}\right) e^{-\left(1+i\frac{t}{T_0}\right)y}}{y} \\ & \quad + \left(1+i\frac{t}{T_0}\right)^2 E_1\left[\left(1+i\frac{t}{T_0}\right)y\right] + \frac{e^{-2y}}{2y^2} - \frac{e^{-2y}}{y} + 2E_1(2y) \\ & \quad - \frac{e^{-\left(2+i\frac{t}{T_0}\right)y}}{2y^2} + \frac{\left(2+i\frac{t}{T_0}\right) e^{-\left(2+i\frac{t}{T_0}\right)y}}{2y} \\ & \quad \left. - \frac{\left(2+i\frac{t}{T_0}\right)^2}{2} E_1\left[\left(2+i\frac{t}{T_0}\right)y\right] \right\}, \quad (3.46) \end{aligned}$$

que é uma expressão similar à (3.41). Substituindo na Eq. (3.46) o desenvolvimento em série (3.43) da

integral exponencial, obtemos

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0) (1 - e^{-i\omega t}) \\
 &= -\frac{\eta T_0}{\pi} \ln 2 + \frac{\eta T_0}{4\pi} \left[\left(i \frac{t}{T_0} \right)^2 \ln \left(i \frac{t}{T_0} \right) - 2 \left(1 + i \frac{t}{T_0} \right)^2 \ln \left(1 + i \frac{t}{T_0} \right) \right. \\
 & \qquad \qquad \qquad \left. + \left(2 + i \frac{t}{T_0} \right)^2 \ln \left(2 + i \frac{t}{T_0} \right) \right], \tag{3.47}
 \end{aligned}$$

que reproduz o valor zero no limite $t \rightarrow 0$.

A Eq. (3.47) é uma expressão exata para valores de $t \neq 0$. Para calcular o espectro de transmissão da partícula (2.89) utilizamos uma expressão mais simples que pode ser obtida da Eq. (3.47) para valores de $|t| \gg T_0$. Neste caso temos

$$\frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0) (1 - e^{-i\omega t}) \approx -\frac{\eta T_0}{\pi} \ln 2 + \frac{\eta T_0}{4\pi} \left(3 + i\pi - 2 \ln \frac{T_0}{t} \right). \tag{3.48}$$

Para utilizar esta expressão dividimos a integral sobre t na Eq. (2.89) em três integrais nos intervalos de $-\infty$ a $-\tau$, de $-\tau$ a τ e de τ a ∞ . Considerando $\tau \gg T_0$, utilizamos então a expressão (3.48) nas integrais de $-\infty$ a $-\tau$ e de τ a ∞ , onde $|t| > \tau$, e estudamos mais adiante a integral que corresponde ao intervalo intermediário de $-\tau$ a τ . Desse modo temos

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{-\tau} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0) (1 - e^{-i\omega t})} \\
 & \qquad \qquad \qquad + \int_{\tau}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0) (1 - e^{-i\omega t})} \\
 &= e^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar \pi} \ln 2} e^{-\frac{\mathcal{S}_0 3\eta T_0}{\hbar 4\pi}} e^{-i \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{4}} \left[\int_{-\infty}^{-\tau} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} \left(\frac{T_0}{t} \right)^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}} \right. \\
 & \qquad \qquad \qquad \left. + \int_{\tau}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} \left(\frac{T_0}{t} \right)^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}} \right].
 \end{aligned}$$

Mudando nesta equação a variável de integração t para $(E - E')t/\hbar$ e considerando $E \neq E'$, podemos obter

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{-\tau} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0)} (1 - e^{-i\omega t}) \\
& + \int_{\tau}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E - E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0)} (1 - e^{-i\omega t}) \\
& = e^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar \pi} \ln 2} e^{-\frac{\mathcal{S}_0 3\eta T_0}{\hbar 4\pi}} \frac{1}{\pi |E - E'|} \left(\frac{|E - E'| T_0}{\hbar} \right)^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar 2\pi}} \\
& \quad \times \operatorname{Re} \left[e^{i \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar 4} \operatorname{sign}(E - E')} \int_{\frac{|E - E'| \tau}{\hbar}}^{\infty} dy y^{-\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar 2\pi}} e^{-iy} \right], \tag{3.49}
\end{aligned}$$

onde $\operatorname{Re}[\dots]$ representa a parte real de $[\dots]$ e $\operatorname{sign}(x)$ representa a função sinal dada por $\operatorname{sign}(x) = 1$ para $x > 0$ e $\operatorname{sign}(x) = -1$ para $x < 0$.

No cálculo do espectro de transmissão $\Gamma_0(E, E')$ na Eq. (2.89) trataremos o caso de uma interação muito fraca da partícula com o banho ôhmico de osciladores. Nesse caso consideramos uma diferença muito pequena entre as energias características E e E' dos estados inicial e final da partícula, tal que

$$\frac{|E - E'| \tau}{\hbar} \ll 1 \quad \text{ou} \quad |E - E'| \ll \frac{\hbar}{\tau}. \tag{3.50}$$

Assim, de acordo com a Ref. 19 (p. 12, Eq. (31)), aproximamos a integral sobre y na expressão (3.49), com $0 < 1 - \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar 2\pi} < 1$, na forma

$$\int_{\frac{|E - E'| \tau}{\hbar}}^{\infty} dy y^{-\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar 2\pi}} e^{-iy} \approx \int_0^{\infty} dy y^{-\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar 2\pi}} e^{-iy} = e^{-i \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar 2\pi} \right)} \Gamma \left(1 - \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar 2\pi} \right), \tag{3.51}$$

onde $\Gamma(z)$ representa a função Gamma dada por $\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dt t^{z-1} e^{-t}$, com $\operatorname{Re} z > 0$. Substituindo a

expressão (3.51) na Eq. (3.49), obtemos

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{-\tau} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0)} (1 - e^{-i\omega t}) \\
 & + \int_{\tau}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0)} (1 - e^{-i\omega t}) \\
 & = e^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \ln 2} e^{-\frac{\mathcal{S}_0 3\eta T_0}{\hbar} \frac{1}{4\pi}} \frac{1}{\pi |E-E'|} \left(\frac{|E-E'| T_0}{\hbar} \right)^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}} \Gamma\left(1 - \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}\right) \\
 & \quad \times \sin \left\{ \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{4} [1 + \text{sign}(E-E')] \right\} \\
 & = e^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \ln 2} e^{-\frac{\mathcal{S}_0 3\eta T_0}{\hbar} \frac{1}{4\pi}} \frac{\theta(E-E')}{\pi(E-E')} \left[\frac{(E-E') T_0}{\hbar} \right]^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}} \Gamma\left(1 - \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}\right) \sin \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2}.
 \end{aligned} \tag{3.52}$$

Adicionalmente, de acordo com a Ref. 19 (p. 3, Eq. (6)), temos

$$\Gamma\left(1 - \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}\right) \sin \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2} = \Gamma\left(1 - \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}\right) \sin \pi \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi} = \frac{\pi}{\Gamma\left(\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}\right)}.$$

Substituindo então esta expressão na (3.52) obtemos

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{-\tau} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0)} (1 - e^{-i\omega t}) \\
 & + \int_{\tau}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0)} (1 - e^{-i\omega t}) \\
 & = e^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \ln 2} e^{-\frac{\mathcal{S}_0 3\eta T_0}{\hbar} \frac{1}{4\pi}} \frac{1}{\Gamma\left(\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}\right)} \frac{1}{E-E'} \left[\frac{(E-E') T_0}{\hbar} \right]^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi}} \theta(E-E').
 \end{aligned} \tag{3.53}$$

No espectro de transmissão da partícula (2.89), além das integrais de $-\infty$ a $-\tau$ e de τ a ∞ da

Eq. (3.53), devemos considerar também a integral que corresponde ao intervalo intermediário de $-\tau$ a τ . Nesse caso temos

$$\begin{aligned} & \int_{-\tau}^{\tau} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0)} (1 - e^{-i\omega t}) \\ &= \frac{1}{2\pi(E-E')} \int_{-\frac{(E-E')\tau}{\hbar}}^{\frac{(E-E')\tau}{\hbar}} dy e^{iy} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0)} \left[1 - e^{-i\omega T_0 \frac{y}{(E-E')T_0 \hbar}} \right] \approx 0, \end{aligned}$$

sendo o intervalo de integração muito pequeno, de acordo com a condição (3.50). Assim, segundo a Eq. (3.53), consideramos na expressão (2.89) que

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{1}{m} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega^3} W(\omega T_0)} (1 - e^{-i\omega t}) \\ &= e^{\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{\eta T_0}{\pi} \ln 2} e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{3\eta T_0}{4\pi}} \frac{1}{\Gamma\left(\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{\eta T_0}{2\pi}\right)} \frac{1}{E-E'} \left[\frac{(E-E')T_0}{\hbar} \right]^{\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{\eta T_0}{2\pi}} \theta(E-E'). \end{aligned} \quad (3.54)$$

Para obter o espectro de transmissão da partícula substituímos na Eq. (2.89) a taxa total de tunelamento (3.45) e a expressão (3.54). Desse modo, para $E \neq E'$ e $E - E' \ll \hbar/\tau$, onde $\tau \gg T_0$, temos

$$\Gamma_0(E, E') = N \frac{e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \left(1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{3\eta T_0}{4\pi}\right)}}{\Gamma\left(\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{\eta T_0}{2\pi}\right)} \frac{1}{E-E'} \left[\frac{(E-E')T_0}{\hbar} \right]^{\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \frac{\eta T_0}{2\pi}} \theta(E-E'). \quad (3.55)$$

Esta expressão corresponde à Eq. (75) da Ref. 2, coincidindo com ela, porém, somente no caso $E' < E$. A partir da subseção 1.4.2 do presente trabalho e da seção III da Ref. 2 foi considerado o caso de um banho de osciladores a temperatura zero e portanto, no estado de mínima energia possível. Neste caso a partícula não pode absorver energia do banho de osciladores e seu espectro de transmissão deve ser zero para $E' > E$. Isto pode ser visto na Eq. (3.4) no caso de um banho de osciladores com uma única frequência e na definição (1.15) do espectro de transmissão da partícula para valores de $\epsilon_b^f > \epsilon_b^i$. No

caso de um banho ôhmico, porém, a Eq. (75) da Ref. 2 conduz a um resultado diferente de zero para $E' > E$, o que não é consistente do ponto de vista físico. Este resultado é corrigido na expressão (3.55) do presente trabalho através da função degrau $\theta(E - E')$ obtida na expressão (3.52).

A Eq. (75) da Ref. 2 foi obtida utilizando o expoente de tunelamento dado na expressão (74) dessa referência para valores muito grandes do parâmetro t . Porém, como veremos em seguida, essa expressão é válida somente para $t > 0$. Também, assim como no caso de um banho de osciladores com uma única frequência, obteremos o expoente característico de tunelamento que descreve o caso $t = 0$.

3.2.1 O expoente de tunelamento

Como pode ser visto da Eq. (3.45), no caso de um banho ôhmico de osciladores podemos descrever a taxa total de tunelamento através do expoente característico de tunelamento

$$\tilde{\mathcal{S}} = \mathcal{S}_0 \left(1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{\eta T_0}{\pi} \ln 2 \right). \quad (3.56)$$

Este pode ser obtido substituindo a Eq. (3.44) na expressão (2.102). Este expoente descreve a taxa total de tunelamento, sendo esta menor para valores maiores de $\tilde{\mathcal{S}}$. Dado que o termo $\frac{\eta T_0}{\pi} \ln 2$ é positivo, temos que a interação da partícula com um banho ôhmico de osciladores aumenta o expoente característico de tunelamento em relação a \mathcal{S}_0 numa quantidade $[(\eta T_0/\pi) \ln 2] \mathcal{S}_0$, diminuindo a taxa total de tunelamento (3.45). Este resultado, assim como no caso de um banho de osciladores com uma única frequência, está de acordo com o resultado geral obtido na subseção 2.4.2 de que a interação da partícula com um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária diminui a taxa total de tunelamento.

Como indicamos na Eq. (2.101), o expoente característico de tunelamento $\tilde{\mathcal{S}}$ corresponde ao expoente de tunelamento no caso $t = 0$. Substituindo nessa equação a expressão (3.56) temos

$$\mathcal{S}_{E,E}(0) = i\mathcal{S}_0 \left(1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{\eta T_0}{\pi} \ln 2 \right), \quad (3.57)$$

que corresponde à Eq. (73) da Ref. 2. No caso $t \neq 0$ podemos obter o expoente de tunelamento através da expressão (2.88). Utilizando as Eqs. (3.57) e (3.47) obtemos

$$\frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} = i \left\{ 1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{\eta T_0}{4\pi} \left[\left(i \frac{t}{T_0} \right)^2 \ln \left(i \frac{t}{T_0} \right) - 2 \left(1 + i \frac{t}{T_0} \right)^2 \ln \left(1 + i \frac{t}{T_0} \right) + \left(2 + i \frac{t}{T_0} \right)^2 \ln \left(2 + i \frac{t}{T_0} \right) \right] \right\}. \quad (3.58)$$

Esta expressão é exata para valores de $t \neq 0$ e reproduz a Eq. (3.57) no limite $t \rightarrow 0$. Como pode ser visto das expressões (3.47) e (3.48), a Eq. (3.58) pode ser aproximada no caso $|t| \gg T_0$ na forma

$$\frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} \approx i \left[1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{\eta T_0}{4\pi} \left(3 + i\pi - 2 \ln \frac{T_0}{t} \right) \right]. \quad (3.59)$$

Esta expressão é válida tanto para valores positivos como para valores negativos do parâmetro t . Segundo esta expressão, no caso $t > 0$ temos

$$\frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} \approx i \left[1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{\eta T_0}{4\pi} \left(3 + i\pi + 2 \ln \frac{t}{T_0} \right) \right], \quad (3.60)$$

e no caso $t < 0$ temos

$$\frac{\mathcal{S}_{E,E}(t)}{\mathcal{S}_0} \approx i \left[1 - \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{\eta T_0}{4\pi} \left(3 - i\pi + 2 \ln \frac{|t|}{T_0} \right) \right]. \quad (3.61)$$

A expressão (74) da Ref. 2 corresponde ao expoente de tunelamento até primeira ordem em η e deve ser corrigida substituindo o tempo T por T_0 . Desse modo, a expressão (74) da Ref. 2 corresponde à expressão (3.60) do presente trabalho e portanto, é válida somente para $t > 0$, com $t \gg T_0$. Uma expressão similar correspondente à expressão (3.61) deste trabalho, válida somente para $t < 0$, com $|t| \gg T_0$, não é dada na Ref. 2.

A expressão (74) para o expoente de tunelamento na Ref. 2 foi utilizada para obter o espectro de transmissão da partícula. Este pode ser calculado conhecendo o expoente de tunelamento tanto para valores positivos como para valores negativos do parâmetro t (Eq. (29) da Ref. 2 e Eq. (2.38) do presente trabalho). Como vimos, considerando $|t| \gg T_0$, a expressão (74) (corrigida) da Ref. 2 pode ser utilizada somente no caso $t > 0$. No caso $t < 0$ deve ser utilizada a expressão (3.61) do presente trabalho. Também pode ser utilizada, em ambos casos, a expressão (3.59) deste trabalho.

3.2.2 Trajetórias clássicas reais e tempos complexos

O tunelamento da partícula, assim como no caso de um banho de osciladores com uma única frequência, pode ser descrito através de trajetórias clássicas reais $X(t_{1X})$ e $Y(t_{1Y})$ que evoluem nos tempos complexos t_{1X} e t_{1Y} , respectivamente. O valor da coordenada na trajetória $X(t_{1X})$ em unidades da largura d da barreira, ou seja, $p_X = \frac{X(t_{1X})}{d}$, com $0 \leq p_X \leq 1$, pode ser expresso em função dos valores de t_{1X} empregando a Eq. (2.79). Utilizando a função de densidade espectral (3.40) e a Eq. (2.71) para $a_\omega^{(0)}(t)$, temos

$$p_X = i \frac{t_{1X}}{T_0} + \frac{u_1}{2} t_{1X}^{(0)2} - 2i\eta \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{1}{\omega^2} \left[\frac{t_{1X}^{(0)}}{T_0} - \frac{\sin \omega t_{1X}^{(0)}}{\omega T_0} - \frac{i}{2} \left(e^{i\omega t_{1X}^{(0)}} - i\omega t_{1X}^{(0)} - 1 \right) a_\omega^{(0)}(t) \right], \quad (3.62)$$

onde $t_{1X}^{(0)}$ é dado pela Eq. (2.80).

A Eq. (3.62), onde t_{1X} e $t_{1X}^{(0)}$ tomam valores fora do eixo real, substitui a expressão (70) da Ref. 2. O estudo desta última sugere que o tempo t_1 nessa expressão toma valores somente reais e positivos. A expressão (70) da Ref. 2 é a aproximação até primeira ordem em u_1 e η da Eq. (67) dessa referência. Como indicamos na subseção 2.3.4, a Eq. (67) da Ref. 2 foi obtida através da transformada

de Laplace e somente quando assumimos valores reais e positivos para t_1 nessa equação, conseguimos verificar que ela é solução da Eq. (2.57) do presente trabalho. Consistentemente, a expressão (70) da Ref. 2 pode ser obtida através da Eq. (3.62) do presente trabalho substituindo os tempos complexos t_{1X} e $t_{1X}^{(0)}$ por $t_1 > 0$. Também, de forma mais direta, a expressão (70) da Ref. 2 pode ser obtida substituindo as Eqs. (2.59) e (3.40) do presente trabalho na expressão (2.61) e utilizando o resultado $2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{\sin \omega (t_1 - t_2)}{\omega} = 1$, válido para $t_1 - t_2 > 0$. A condição $t_1 - t_2 > 0$ na Eq. (2.61) é aplicável no caso $t_1 > 0$.

Utilizando a Eq. (3.62), para $0 < p_X < 1$, obtemos

$$\begin{aligned}
 p_X = & i \frac{t_{1X}}{T_0} - \frac{u_1}{2} T_0^2 p_X^2 \\
 & + \frac{\eta T_0}{2\pi} \left[p_X^2 \ln p_X - (1 - p_X)^2 \ln (1 - p_X) + \left(1 - 2p_X + i \frac{t}{T_0}\right) \left(1 + i \frac{t}{T_0}\right) \ln \left(1 + i \frac{t}{T_0}\right) \right. \\
 & - \left(2 - 2p_X + i \frac{t}{T_0}\right) \left(2 + i \frac{t}{T_0}\right) \ln \left(2 + i \frac{t}{T_0}\right) \\
 & \left. - \left(1 - p_X + i \frac{t}{T_0}\right)^2 \ln \left(1 - p_X + i \frac{t}{T_0}\right) + \left(2 - p_X + i \frac{t}{T_0}\right)^2 \ln \left(2 - p_X + i \frac{t}{T_0}\right) \right]. \tag{3.63}
 \end{aligned}$$

Através desta expressão podemos obter também os casos $p_X = 0$ e $p_X = 1$ tomando os limites $p_X \rightarrow 0$ e $p_X \rightarrow 1$, respectivamente.

Os instantes de tempo t_{1X} que correspondem a posições dadas na região da barreira podem ser expressos em função de p_X utilizando a expressão (3.63) ou substituindo a função de densidade espectral (3.40) na Eq. (2.81). Segundo a Eq. (3.63), utilizando a expressão (2.52), temos

$$\begin{aligned}
 t_{1X}(p_X) = & -iT_0 \left\{ p_X + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} p_X^2 - \frac{\eta T_0}{2\pi} \left[p_X^2 \ln p_X - (1 - p_X)^2 \ln (1 - p_X) \right. \right. \\
 & + \left(1 - 2p_X + i \frac{t}{T_0}\right) \left(1 + i \frac{t}{T_0}\right) \ln \left(1 + i \frac{t}{T_0}\right) \\
 & - \left(2 - 2p_X + i \frac{t}{T_0}\right) \left(2 + i \frac{t}{T_0}\right) \ln \left(2 + i \frac{t}{T_0}\right) \\
 & - \left(1 - p_X + i \frac{t}{T_0}\right)^2 \ln \left(1 - p_X + i \frac{t}{T_0}\right) \\
 & \left. \left. + \left(2 - p_X + i \frac{t}{T_0}\right)^2 \ln \left(2 - p_X + i \frac{t}{T_0}\right) \right] \right\}. \tag{3.64}
 \end{aligned}$$

Os instantes de tempo t_{1Y} podem ser obtidos empregando as Eqs. (3.64) e (2.82). Com $p_Y = \frac{Y(t_{1Y})}{d}$, $0 < p_Y < 1$, temos

$$t_{1Y}(p_Y) = -t_{1X}(p_Y) , \quad (3.65)$$

onde $t_{1X}(p_Y)$ é dado pela expressão (3.64) substituindo p_X por p_Y . Através da Eq. (3.65) podem ser obtidos os casos $p_Y = 0$ e $p_Y = 1$ tomando os limites $p_Y \rightarrow 0$ e $p_Y \rightarrow 1$, respectivamente.

As Eqs. (3.64) e (3.65) descrevem o tunelamento da partícula em interação com um banho ôhmico de osciladores através de trajetórias clássicas reais $X(t_{1X})$ e $Y(t_{1Y})$ que evoluem nos tempos complexos t_{1X} e t_{1Y} , respectivamente. Para $\eta \approx 0$ na Eq. (3.64), t_{1X} toma valores ao longo de um contorno na metade inferior do plano complexo enquanto t_{1Y} na Eq. (3.65) toma valores ao longo de um contorno na metade superior do plano complexo.

O tempo de travessia T_X através da barreira pode ser obtido através da Eq. (3.64) utilizando a condição $\lim_{p_X \rightarrow 1} t_{1X}(p_X) = t_{1X}(1) = T_X$ ou substituindo a função de densidade espectral (3.40) na Eq. (2.95). Nesta última podemos empregar as expressões (3.44) e (3.47). Desse modo, para $t \neq 0$, obtemos

$$T_X = -iT_0 \left\{ 1 + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} + i \frac{\eta t}{2\pi} \left[i \frac{t}{T_0} \ln \left(i \frac{t}{T_0} \right) - 2 \left(1 + i \frac{t}{T_0} \right) \ln \left(1 + i \frac{t}{T_0} \right) + \left(2 + i \frac{t}{T_0} \right) \ln \left(2 + i \frac{t}{T_0} \right) \right] \right\} . \quad (3.66)$$

Através desta expressão podemos obter também o caso $t = 0$ tomando o limite $t \rightarrow 0$. Neste caso temos

$$\lim_{t \rightarrow 0} T_X = T_X(0) = -iT_0 \left(1 + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} \right) .$$

Nesta expressão, segundo a Eq. (2.96), podemos identificar o tempo característico de travessia através da barreira, dado por

$$\tilde{T} = T_0 \left(1 + \frac{U_1 T_0}{\mathcal{S}_0} \right) , \quad (3.67)$$

o qual não depende de η . Assim, diferentemente do caso de um banho de osciladores com uma única frequência, a interação da partícula com um banho ôhmico não afeta o tempo característico de travessia através da barreira até primeira ordem nessa interação. A expressão (3.67) pode ser obtida também substituindo a função de densidade espectral (3.40) na Eq. (2.98) onde podemos utilizar a expressão (3.44).

A Eq. (3.66) é uma expressão exata para valores de $t \neq 0$. Para calcular o espectro de transmissão da partícula e o expoente de tunelamento consideramos anteriormente o caso $|t| \gg T_0$. Neste caso o tempo

de travessia T_X através da barreira pode ser aproximado na forma

$$T_X \approx -iT_0 \left(1 + \frac{U_1 T_0}{S_0} + \frac{\eta T_0}{2\pi} \right).$$

A última expressão corresponde à Eq. (72) da Ref. 2. Diferentemente do caso de um banho de osciladores com uma única frequência, uma expressão geral para o tempo de travessia T_X através da barreira, correspondente à Eq. (3.66) do presente trabalho, não é dada na Ref. 2 no caso de um banho ôhmico.

O tempo de travessia T_Y através da barreira pode ser obtido através da expressão (3.66) utilizando a Eq. (2.77). Assim temos

$$T_Y = -T_X,$$

onde T_X é dado pela expressão (3.66).

3.2.3 A corrente de tunelamento

Podemos utilizar o espectro de transmissão de uma partícula para determinar a corrente de tunelamento devido ao fluxo de elétrons entre dois metais separados por uma barreira de material isolante. As vibrações dos átomos no isolante podem ser descritas através de um conjunto de osciladores harmônicos (fônons) os quais interagem com os elétrons que tunelam através da barreira.

O espectro de transmissão $\Gamma(E, E')$ caracteriza a probabilidade de transição de um elétron de um estado inicial com energia característica E para um estado final com energia característica E' . Esta transição é determinada pela probabilidade de ocupação $P(E)$ do estado inicial e de não ocupação, $\tilde{P}(E')$, do estado final. Para a probabilidade de ocupação do estado inicial temos $P(E) = f(E)$ onde

$$f(E) = \left[e^{\beta(E - \mu)} + 1 \right]^{-1}, \quad (3.68)$$

é a distribuição de Fermi-Dirac, sendo μ o potencial químico do metal onde o elétron se encontra no estado inicial. No caso da probabilidade de não ocupação do estado final, temos $\tilde{P}(E') = 1 - f'(E')$ onde

$$f'(E') = \left[e^{\beta(E' - \mu')} + 1 \right]^{-1}, \quad (3.69)$$

sendo μ' o potencial químico do metal onde o elétron se encontra no estado final. Os potenciais químicos μ e μ' , assim como as energias E e E' , podem ser medidos em relação a um valor de energia arbitrário. Tomamos este valor como a energia mínima da banda de condução do metal onde o elétron se encontra no estado inicial.

Para obter a corrente devido às transições dos elétrons entre os dois metais, somamos (integramos) sobre os estados nas bandas de condução desses metais. Para isso, empregamos a densidade de estados $\mathcal{D}(\varepsilon)$ que representa o número de estados por intervalo unitário de energia para cada metal, dada por²⁰

$$\mathcal{D}(\varepsilon) = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2} \frac{(2m)^{3/2}}{\hbar^3} \varepsilon^{1/2}, \quad (3.70)$$

onde \mathcal{V} é o volume do metal em questão e m é a massa efetiva do elétron na banda de condução desse metal. Na expressão (3.70), ε representa a diferença entre a energia de um certo estado na banda de condução de um metal e a energia mínima dessa banda. No caso de dois metais diferentes à esquerda e à direita da barreira utilizamos as densidades de estados $\mathcal{D}_e(\varepsilon)$ e $\mathcal{D}_d(\varepsilon)$, respectivamente, dependentes de ε na forma dada pela Eq. (3.70).

Consideramos o caso em que a energia potencial elétrica de um elétron diminui ao passar do lado esquerdo ao lado direito da barreira numa quantidade pequena U_1 (Fig. 1.1). Para a corrente devido ao fluxo dos elétrons do lado esquerdo para o lado direito da barreira, seguindo[†] a expressão (76) da Ref. 2, escrevemos

$$I_{\rightarrow} = e \int_0^{W_e} dE \int_{-U_1}^{W_d - U_1} dE' \Gamma(E, E') f(E) [1 - f'(E')] \mathcal{D}_e(E) \mathcal{D}_d(E' + U_1), \quad (3.71)$$

onde e é o módulo da carga elétrica do elétron e W_e (W_d) é a largura da banda de condução do metal à esquerda (direita) da barreira. No caso em que os potenciais químicos dos metais têm o mesmo valor μ quando medidos em relação ao fundo da banda de condução do metal correspondente, ou seja,

$$\mu = \mu' - (-U_1) \quad \Longrightarrow \quad \mu' = \mu - U_1,$$

temos, de acordo com as Eqs. (3.69) e (3.68),

$$f'(E') = f(E' + U_1),$$

e portanto,

$$I_{\rightarrow} = e \int_0^{W_e} dE \int_{-U_1}^{W_d - U_1} dE' \Gamma(E, E') f(E) [1 - f(E' + U_1)] \mathcal{D}_e(E) \mathcal{D}_d(E' + U_1). \quad (3.72)$$

De maneira similar, para a corrente devido ao fluxo dos elétrons do lado direito para o lado esquerdo da barreira, temos

$$I_{\leftarrow} = e \int_0^{W_d} dE \int_{U_1}^{W_e + U_1} dE' \Gamma(E, E') f(E) [1 - f(E' - U_1)] \mathcal{D}_d(E) \mathcal{D}_e(E' - U_1). \quad (3.73)$$

As correntes I_{\rightarrow} e I_{\leftarrow} permitem obter a corrente de tunelamento I devido ao fluxo neto dos elétrons entre os dois metais, na forma

$$I = I_{\rightarrow} - I_{\leftarrow}. \quad (3.74)$$

Esta expressão, com I_{\rightarrow} e I_{\leftarrow} dadas pelas Eqs. (3.72) e (3.73), corresponde à Eq. (76) da Ref. 2 no caso

[†]Pode ser observado, porém, que a grandeza I_{\rightarrow} , dada nas Eqs. (3.71) e (3.72), assim como I_{\leftarrow} e I , dadas nas Eqs. (3.73) e (3.74), não tem as dimensões usuais de corrente elétrica. De acordo com a expressão (1.15) para o espectro de transmissão $\Gamma(E, E')$, as dimensões de I_{\rightarrow} , I_{\leftarrow} e I são as de carga elétrica/(tempo \times energia).

$$U_1 = eV.$$

Para calcular a corrente de tunelamento a partir da Eq. (3.74) consideramos o caso $T = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$). Neste caso, a distribuição de Fermi-Dirac (3.68) toma o valor 1 para $E < \mu$, e 0 para $E > \mu$, sendo μ igual à energia de Fermi E_F . Este valor de energia, medido em relação ao fundo da banda de condução de cada metal, com $E_F < W_e$ e $E_F < W_d$, separa os estados ocupados dos estados vazios. Segundo as Eqs. (3.74), (3.72) e (3.73), chamando as correntes I , I_{\rightarrow} e I_{\leftarrow} a $T = 0$ de I_0 , $I_{0\rightarrow}$ e $I_{0\leftarrow}$, temos

$$I_0 = I_{0\rightarrow} - I_{0\leftarrow}, \quad (3.75)$$

onde

$$I_{0\rightarrow} = e \int_0^{E_F} dE \int_{E_F - U_1}^{W_d - U_1} dE' \Gamma_0(E, E') \mathcal{D}_e(E) \mathcal{D}_d(E' + U_1), \quad (3.76)$$

e

$$I_{0\leftarrow} = e \int_0^{E_F} dE \int_{E_F + U_1}^{W_e + U_1} dE' \Gamma_0(E, E') \mathcal{D}_d(E) \mathcal{D}_e(E' - U_1). \quad (3.77)$$

Assumindo valores pequenos de $E - E'$, utilizamos a expressão (3.55) para o espectro de transmissão a $T = 0$. Escrevendo-o na forma

$$\Gamma_0(E, E') = \tilde{\Gamma}_0(E - E') \theta(E - E'), \quad (3.78)$$

onde

$$\tilde{\Gamma}_0(E - E') = N \frac{e^{-\frac{S_0}{\hbar} \left(1 - \frac{U_1 T_0}{S_0} + \frac{3\eta T_0}{4\pi}\right)}}{\Gamma\left(\frac{S_0 \eta T_0}{\hbar 2\pi}\right)} \frac{1}{E - E'} \left[\frac{(E - E') T_0}{\hbar} \right]^{\frac{S_0 \eta T_0}{\hbar 2\pi}}, \quad (3.79)$$

temos, segundo as Eqs. (3.76) e (3.77),

$$I_{0\rightarrow} = e \int_{E_F - U_1}^{E_F} dE \int_{E_F - U_1}^E dE' \tilde{\Gamma}_0(E - E') \mathcal{D}_e(E) \mathcal{D}_d(E' + U_1), \quad (3.80)$$

e

$$I_{0\leftarrow} = e \int_0^{E_F} dE \int_{E_F + U_1}^{W_e + U_1} dE' \tilde{\Gamma}_0(E - E') \theta(E - E') \mathcal{D}_d(E) \mathcal{D}_e(E' - U_1) = 0. \quad (3.81)$$

De acordo com a última expressão, a corrente devido ao fluxo dos elétrons do lado direito para o lado esquerdo da barreira é zero para $T = 0$. Este resultado é consequência do fato do espectro de transmissão (3.78) ser zero para valores de $E' > E$. De acordo com a expressão (3.81), a $T = 0$ os elétrons no lado direito da barreira ocupam estados com energia $E < E_F$, sendo esta menor que a energia E' dos estados

vazios no lado esquerdo da barreira, com $E_F + U_1 < E' < W_e + U_1$. Assim, para passar do lado direito ao lado esquerdo da barreira, os elétrons precisam absorver energia do banho de osciladores ao interagir com ele na região da barreira. Porém, isto não é possível para $T = 0$, sendo que o banho de osciladores se encontra a essa temperatura no estado de mínima energia possível. Assim, como mostra a expressão (3.81), a corrente $I_{0\leftarrow}$ é zero. Desse modo, segundo as Eqs. (3.75) e (3.80), temos

$$I_0 = I_{0\rightarrow} = e \int_{E_F - U_1}^{E_F} dE \int_{E_F - U_1}^E dE' \tilde{\Gamma}_0(E - E') \mathcal{D}_e(E) \mathcal{D}_d(E' + U_1). \quad (3.82)$$

Esta expressão mostra que a corrente de tunelamento a $T = 0$ é dada somente pela passagem dos elétrons de estados com energia E no lado esquerdo da barreira, com $E_F - U_1 < E < E_F$, a estados vazios com energia E' no lado direito da barreira, com $E_F - U_1 < E' < E$.

Como pode ser visto na expressão (3.82), para valores pequenos de U_1 temos valores pequenos de $E - E'$, sendo $0 < E - E' < U_1$. Assim, o emprego da Eq. (3.55) para o espectro de transmissão assumindo valores pequenos de $E - E'$ é apropriado para pequenos valores de U_1 , sendo que a própria expressão (3.55) foi derivada também no caso de um campo elétrico fraco ($U_1 \approx 0$). Considerando $U_1 \ll E_F$, substituímos na Eq. (3.82) os valores das densidades de estados $\mathcal{D}_e(E)$ e $\mathcal{D}_d(E' + U_1)$ pelos valores constantes $\mathcal{D}_e(E_F)$ e $\mathcal{D}_d(E_F)$. Assim, para $U_1 \ll E_F$, mudando também na Eq. (3.82) a variável de integração E' para $E'' = E - E'$, temos

$$\begin{aligned} I_0 &= e \mathcal{D}_e(E_F) \mathcal{D}_d(E_F) \int_{E_F - U_1}^{E_F} dE \int_0^{U_1} dE'' \tilde{\Gamma}_0(E'') \theta[E - (E_F - U_1) - E''] \\ &= e \mathcal{D}_e(E_F) \mathcal{D}_d(E_F) \int_0^{U_1} dE'' \tilde{\Gamma}_0(E'') (U_1 - E''). \end{aligned} \quad (3.83)$$

Esta expressão corresponde à Eq. (77) da Ref. 2 no caso $U_1 = eV$. Pode ser observado, porém, que a expressão (3.83) foi obtida utilizando o resultado (3.81) que, como foi mencionado, é consequência do fato do espectro de transmissão (3.78) ser zero para valores de $E' > E$. Por outro lado, como indicado antes, o espectro de transmissão dado na Eq. (75) da Ref. 2 conduz a um resultado diferente de zero para $E' > E$. Desse modo podemos concluir, que a derivação da Eq. (77) na Ref. 2 para a corrente de tunelamento a $T = 0$ não é justificada pela Eq. (75) dessa referência para o espectro de transmissão.

De acordo com a seção 1.1, a diminuição U_1 na energia potencial elétrica de um elétron ao passar do lado esquerdo ao lado direito da barreira é dada por $U_1 = eE_l d$, onde E_l é um campo elétrico pequeno uniforme aplicado na região da barreira. Dada a diferença de potencial $V = E_l d$, temos $U_1 = eV$. Utilizando esta expressão para U_1 e substituindo a Eq. (3.79) na expressão (3.83), obtemos a corrente

de tunelamento I_0 em função de V na forma

$$I_0(V) = e^2 \mathcal{D}_e(E_F) \mathcal{D}_d(E_F) N \frac{e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \left(1 - \frac{eVT_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{3\eta T_0}{4\pi}\right)}}{\Gamma\left(\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi}\right)} V \frac{\left(\frac{eVT_0}{\hbar}\right) \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi}}{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi} \left(\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi} + 1\right)}.$$

A última expressão pode ser simplificada utilizando a identidade $z\Gamma(z) = \Gamma(1+z)$ (Ref. 19 (p. 3, Eq. (1))). Desse modo obtemos

$$I_0(V) = e^2 \mathcal{D}_e(E_F) \mathcal{D}_d(E_F) N \frac{e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \left(1 - \frac{eVT_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{3\eta T_0}{4\pi}\right)}}{\Gamma\left(2 + \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi}\right)} V \left(\frac{eVT_0}{\hbar}\right) \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi}, \quad (3.84)$$

que corresponde à Eq. (78) da Ref. 2.

Seguindo a Ref. 2, escrevemos a corrente (3.84) utilizando a resistência diferencial de tunelamento R_t no caso limite de um campo elétrico nulo ($V \rightarrow 0$) e interação da partícula com o banho de osciladores também nula ($\eta \rightarrow 0$). Definimos R_t através da condutância diferencial correspondente, dada por

$$\frac{1}{R_t} = \lim_{V \rightarrow 0} \lim_{\eta \rightarrow 0} I'_0(V), \quad (3.85)$$

onde $I'_0(V) = \frac{dI_0(V)}{dV}$. A expressão (3.85) corresponde à Eq. (79) da Ref. 2. Utilizando a expressão (3.84) obtemos

$$I'_0(V) = e^2 \mathcal{D}_e(E_F) \mathcal{D}_d(E_F) N \frac{e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar} \left(1 - \frac{eVT_0}{\mathcal{S}_0} + \frac{3\eta T_0}{4\pi}\right)}}{\Gamma\left(2 + \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi}\right)} \left(\frac{eVT_0}{\hbar}\right) \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi} \left(\frac{eVT_0}{\hbar} + 1 + \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi}\right), \quad (3.86)$$

e portanto, segundo a Eq. (3.85), temos

$$\frac{1}{R_t} = e^2 \mathcal{D}_e(E_F) \mathcal{D}_d(E_F) N e^{-\frac{\mathcal{S}_0}{\hbar}}.$$

Substituindo esta expressão na Eq. (3.84) obtemos

$$I_0(V) = \frac{e \frac{1}{\hbar} \left(eVT_0 - \frac{3\eta T_0 \mathcal{S}_0}{4\pi}\right)}{\Gamma\left(2 + \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi}\right)} \frac{V}{R_t} \left(\frac{eVT_0}{\hbar}\right) \frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{\hbar} \frac{2\pi}{2\pi},$$

que corresponde à Eq. (80) da Ref. 2.

A Eq. (3.86) representa a condutância diferencial de tunelamento $I'_0(V)$. Para pequenos valores de V , retendo nessa equação somente os termos de ordem dominante em $\frac{eVT_0}{\hbar}$, temos que a condutância diferencial segue uma lei de potência da forma $I'_0(V) \sim \left(\frac{eVT_0}{\hbar}\right)^{\frac{\mathcal{S}_0 \eta T_0}{2\pi}}$, como indicado na Ref. 2.

Conclusões

Neste trabalho, baseando-nos no método do tempo complexo apresentado nos trabalhos de McLaughlin³ e Holstein e Swift⁴ no caso do tunelamento de uma partícula sem interação com o ambiente, propusemos uma ampliação do formalismo de tempo real utilizado no trabalho de Ueda² para uma introdução mais natural de valores complexos do tempo na descrição do tunelamento de uma partícula em interação com o ambiente. Representando este último através de um banho de osciladores harmônicos e assumindo uma continuação analítica da amplitude de transição do sistema partícula - banho de osciladores na metade inferior do plano do tempo complexo, descrevemos o tunelamento da partícula através de trajetórias clássicas reais que evoluem no tempo complexo.

Do procedimento seguido podemos ver que o método do tempo complexo oferece um marco apropriado para, num primeiro problema variacional, considerar trajetórias com tempos fixos de duração e posições iniciais e finais dadas. Um segundo problema variacional nos tempos de duração e nas posições iniciais e finais das trajetórias clássicas é também considerado. Como resultado deste procedimento obtemos o fator de acoplamento apropriado entre as duas trajetórias que descrevem a ação efetiva da partícula, podendo assim substituir o procedimento de tipo *ad hoc* utilizado com este fim na Ref. 2. Obtém-se também o termo da diferença entre a ação efetiva da partícula e o expoente de tunelamento, sendo que estas grandezas são tratadas como iguais no trabalho de Ueda².

Evitando a aplicação do método da transformada de Laplace e considerando uma solução aproximada das equações de movimento até primeira ordem num campo elétrico externo e na interação da partícula com o banho de osciladores, obtemos expressões gerais para o expoente de tunelamento, o espectro de transmissão, a taxa total de tunelamento e o tempo de travessia da partícula através da barreira, válidas para um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária. Desse modo obtemos que a interação da partícula com um banho de osciladores com uma função de densidade espectral arbitrária diminui a taxa total de tunelamento. Adicionalmente temos que a interação da partícula com os osciladores do banho com frequências $\omega_\alpha = \omega_c \approx 1.9 T_0^{-1}$, onde T_0 é o tempo característico de travessia através da barreira no caso em que não há interação da partícula com o banho de osciladores nem campo elétrico, não afeta o tempo característico de travessia através da barreira enquanto a interação da partícula com os osciladores do banho que têm frequências $\omega_\alpha < \omega_c$ ($\omega_\alpha > \omega_c$) diminui (aumenta) o tempo característico de travessia através da barreira.

Ao estudar o caso de um banho de osciladores com uma única frequência ω e uma constante de acoplamento com a partícula dada por $C_\alpha = \tilde{C}_\alpha(\omega T_0)^\sigma$, podemos identificar cinco comportamentos

diferentes em função de ω para o expoente característico de tunelamento e o tempo característico de travessia através da barreira. Estes comportamentos correspondem aos valores de $\sigma < 1$, $\sigma = 1$, $1 < \sigma < 2$, $\sigma = 2$ e $\sigma > 2$. No trabalho de Ueda² foi considerado somente o expoente característico de tunelamento no caso $\sigma = 1$.

No caso de um banho ôhmico de osciladores a temperatura zero, assim como no caso de um banho de osciladores com uma única frequência, obtemos que o espectro de transmissão da partícula é zero para uma energia final característica da partícula maior que sua energia inicial. Este resultado permite obter de um modo coerente a corrente de tunelamento entre dois metais separados por um material isolante a temperatura zero. Adicionalmente obtemos que a interação da partícula com um banho ôhmico de osciladores não afeta o tempo característico de travessia através da barreira até primeira ordem nessa interação.

Referências

- ¹ L. Capriotti, A. Cuccoli, A. Fubini, V. Tognetti e R. Vaia, *Simulating Quantum Dissipation in Many-Body Systems*, Europhys. Lett. **58**, 155 (2002).
- ² M. Ueda, *Transmission Spectrum of a Tunneling Particle Interacting with Dynamical Fields: Real-Time Functional-Integral Approach*, Phys. Rev. B **54**, 8676 (1996).
- ³ D. W. McLaughlin, *Complex Time, Contour Independent Path Integrals, and Barrier Penetration*, J. Math. Phys. **13**, 1099 (1972).
- ⁴ B. R. Holstein e A. R. Swift, *Barrier Penetration via Path Integrals*, Am. J. Phys. **50**, 833 (1982).
- ⁵ D. G. Babbitt, *A Summation Procedure for Certain Feynman Integrals*, J. Math. Phys. **4**, 36 (1963).
- ⁶ J. Feldman, *On the Schrödinger and Heat Equations for Nonnegative Potentials*, Trans. Amer. Math. Soc. **108**, 251 (1963).
- ⁷ R. P. Feynman e A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).
- ⁸ L. A. Beauregard, *Propagators in Nonrelativistic Quantum Mechanics*, Am. J. Phys. **34**, 324 (1966).
- ⁹ A. Das, *Field Theory: A Path Integral Approach* (World Scientific, Singapore, 1993), Cap. 3.
- ¹⁰ G. B. Arfken e H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Elsevier Academic Press, Amsterdam, 2005).
- ¹¹ M. Abramowitz e I. A. Stegun, eds., *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Dover, New York, 1972), p. 1020.
- ¹² S. Colombo, *Les Transformations de Mellin et de Hankel: Applications à la Physique Mathématique* (Centre National de la Recherche Scientifique, Paris, 1959), pp. 11 e 25.
- ¹³ D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2005), seq. 8.2.
- ¹⁴ A. O. Caldeira e A. J. Leggett, *Quantum Tunnelling in a Dissipative System*, Ann. Phys. (N.Y.) **149**, 374 (1983).

- ¹⁵ M. Büttiker e R. Landauer, *Traversal Time for Tunneling*, Phys. Rev. Lett. **49**, 1739 (1982).
- ¹⁶ T. Dittrich, P. Hänggi, G.-L. Ingold, B. Kramer, G. Schön e W. Zwerger, *Quantum Transport and Dissipation* (Wiley-VCH, Weinheim, 1998), p. 215.
- ¹⁷ Y. L. Luke, *The Special Functions and Their Approximations*, Vol. I (Academic Press, New York, 1969), p. 221.
- ¹⁸ H. Jeffreys e B. S. Jeffreys, *Methods of Mathematical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1972), seq. 15·09 e subseq. 9·082.
- ¹⁹ A. Erdélyi, ed., *Higher Transcendental Functions*, Vol. I (McGraw-Hill, New York, 1953).
- ²⁰ C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, New York, 2005), Cap. 6.