



UFAM

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

DISSIPACÃO QUÂNTICA EM SISTEMAS ABERTOS FINITOS

Carlos Fábio de Oliveira Mendes

Manaus

2014

Carlos Fábio de Oliveira Mendes

DISSIPACÃO QUÂNTICA EM SISTEMAS ABERTOS FINITOS

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Departamento de Física da Universidade Federal do Amazonas para obtenção do título de Mestre em Física.

Prof. Dr. Mircea Daniel Galiceanu
Orientador

Manaus
2014

Ficha Catalográfica

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

M538d	Mendes, Carlos Fábio de Oliveira Dissipação quântica em sistemas abertos finitos / Carlos Fábio de Oliveira Mendes. 2014 60 f.: 31 cm. Orientador: Mircea Daniel Galiceanu Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Amazonas. 1. banhos discretos. 2. dissipação quântica. 3. potencial harmônico. 4. potencial de catraca. I. Galiceanu, Mircea Daniel II. Universidade Federal do Amazonas III. Título
-------	---

Mendes, Carlos Fábio de Oliveira

DISSIPACÃO QUÂNTICA EM SISTEMAS ABERTOS FINITOS

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Departamento de Física da Universidade Federal do Amazonas para obtenção do título de Mestre em Física.

Comissão Julgadora:

Prof. Dr.
Marcus Werner Beims

Prof. Dr.
Hidembergue Ordozgoith da Frota

Prof. Dr.
Mircea Daniel Galiceanu

Dedicatória

À minha querida esposa Cíntia e ao meu amado filho Felipe

Agradecimentos

- Agradeço primeiramente a Deus, por sempre estar ao meu lado e por ser o auxílio, força e proteção que sempre precisei em minha vida, e por ter me proporcionado a maior alegria da minha vida, o meu filho Fellipe Gabriel.
- Agradeço aos meus pais, Carlos e Salete, por cuidarem de mim com muito amor e carinho em todos os momentos da minha vida e sem medir esforços, me proporcionaram uma boa educação que servirá de alicerce para o resto da minha vida.
- À minha esposa Cíntia que sempre me apoiou em todas as minhas decisões, e que com muito amor e carinho sempre esteve ao meu lado, mesmo em momentos difíceis, sempre me encorajando e sendo o meu suporte nas horas de fraqueza.
- Ao meu orientador Prof. Dr. Mircea Galiceanu, a quem devo um grande respeito e uma gratidão que não existe palavras para descreve-la.
- A todos os professores do Departamento de Física da UFAM.
- Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq, pelo apoio financeiro.
- A UFAM por me dar a oportunidade de estudar, pesquisar e crescer pessoal e profissionalmente.

Você não compreende realmente alguma coisa
a menos que possa explicá-la para sua avó

-Albert Einstein (1879-1955)

Resumo

Neste trabalho consideramos o aspecto dinâmico de sistemas quânticos abertos onde uma partícula fica sujeita a trocas de energia com o ambiente. O ambiente (banho) é composto de um número finito N de osciladores harmônicos (HOs), caracterizando um banho estruturado, para o qual um comportamento não-Markoviano é esperado. Determinamos a solução numérica da equação de Schrödinger estocástica para uma partícula acoplada ao banho. Estudamos duas situações distintas para o sistema de partícula: o potencial harmônico e o potencial de catraca. No limite $N \rightarrow \infty$ o banho é assumido ter um espectro de densidade ôhmico, sub-ôhmico e super-ôhmico. No caso do potencial harmônico, para baixos valores de N observamos uma troca de energia entre sistema e banho indefinidamente no tempo, enquanto que para valores intermediários de N observa-se decaimento em dois regimes de tempo: exponencial para baixos valores de tempo e lei de potência para valores mais altos de tempo. No caso do potencial de catraca, observamos que a energia volta para o sistema até para valores intermediários de N . Pacotes de ondas são usadas para determinar a evolução da partícula nos potenciais do sistema.

Palavras-chave: banhos discretos, dissipação quântica, potencial harmônico, potencial de catraca.

Abstract

In this work we consider the dynamical aspect of open quantum systems where a particle is subject to energy exchange with the environment. The environment (bath) consists of a finite number N of harmonic oscillators (HOs), characterizing a structured bath, for which a non-Markovian behavior is expected. We determine the numerical solution of the stochastic Schrödinger equation for a particle coupled to the bath. We study two different situations for the system's particle: the harmonic potential and the ratchet potential. In the limit $N \rightarrow \infty$ the bath is assumed to have an ohmic, sub-ohmic, and super-ohmic spectral density. In the case of the harmonic potential, for low values of N we observe an energy exchange between system and bath indefinitely in time, while for intermediate values of N is observed a decay in two time regimes: exponential for short times and power law for larger times. In the case of the ratchet potential, we observe that the energy returns to the system even for intermediate values of N . Wave packets are used to determine the evolution of the particle in the system potential.

Key-words: discret baths, quantum dissipation, harmonic potential, ratchet potential.

Lista de Figuras

1.1	Sistema acoplado linearmente com N HOs.	12
2.1	Densidade de probabilidade de um pacote de ondas gaussiano.	26
2.2	Espectro de energias para o potencial do oscilador harmônico.	29
4.1	A média da energia do sistema, Eq.(3.30), para um oscilador no banho, acoplado com a constante de acoplamento ao sistema $g = 0.01\sqrt{N}$ e a posição média correspondente, Eq.(3.31)	41
4.2	A evolução temporal das probabilidades $ c_n ^2$ dos 10 estados do sistema acoplado com um HO do banho.	42
4.3	O decaimento da energia média, Eq.(3.30), para um banho com 10 HOs e a média da posição, Eq.(3.31). Exibimos os melhores ajustes com símbolos.	43
4.4	A evolução temporal das probabilidades $ c_n ^2$ dos 10 estados do sistema acoplado para um banho contendo $N = 10$ HOs.	44
4.5	O decaimento da energia média, para um banho com 50 HOs acoplados no sistema e a média da posição.	45
4.6	A evolução temporal das probabilidades $ c_n ^2$ para um banho contendo com $N = 50$ HOs.	46
4.7	O decaimento da energia média para um banho com $N = 1, 10, 20, 50$ e 100 HOs.	47
4.8	A pureza para um banho com $N = 1, 10, 20, 50$ e 100 HOs.	48
4.9	Dinâmica no espaço de fases para $N = 1, 10, 20, 50$ e 100 HOs (da esquerda para a direita e de cima para baixo.	49
4.10	Ajustes exponenciais, α , do decaimento de energia em regiões de baixos valores de tempo, para banhos ôhmicos, sub-ôhmicos e super-ôhmicos como uma função de N	50

4.11	Ajustes da lei de potência, β , do decaimento de energia em regiões de altos valores de tempo, para banhos ôhmicos, sub-ôhmicos e super-ôhmicos como uma função de N	51
4.12	Os níveis de energia do potencial de catraca de uma partícula.	52
4.13	A energia média do sistema, Eq.(3.30), para um sistema acoplado a um HO com $g_\lambda = 0.01\sqrt{N}$. É mostrado também a média da posição correspondente.	52
4.14	A evolução temporal das probabilidades $ c_n ^2$ dos 9 estados do sistema acoplado com um HO do banho.	53
4.15	A energia média e posição do sistema para $N = 10$ HOs.	53
4.16	A evolução temporal das probabilidades $ c_n ^2$ dos 9 estados centrais do pacote onda para um sistema acoplado com $N = 10$ HOs.	54
4.17	O decaimento de energia para o potencial de catraca, com números de HOs no banho sendo: $N = 1, 10$ e 50	54

Sumário

Resumo	4
Abstract	5
Lista de Figuras	6
1 Introdução	10
1.1 Sistemas quânticos abertos	10
1.2 Dinâmica não-Markoviana	11
1.3 Equação estocástica de Schrödinger não-Markoviana	12
2 Conceitos fundamentais	14
2.1 Álgebra dos operadores	14
2.1.1 Kets de base	14
2.1.2 Medidas e Observáveis	17
2.1.3 Posição	21
2.1.4 Funções de onda no espaço de posição e momento	22
2.2 Dinâmica quântica	26
2.2.1 Evolução temporal da equação de Schrödinger	26
2.2.2 O oscilador harmônico simples	28
2.2.3 Representação de interação	30
2.2.4 Decoerência quântica	31

3	Estado quântico de difusão linear não-Markoviano	32
3.1	Modelo para sistema e ambiente	32
3.2	Na temperatura zero	33
3.3	Equação estocástica de Schrödinger	37
4	Resultados	40
4.1	Potencial harmônico	40
4.1.1	A energia do sistema	41
4.1.2	Pureza	45
4.1.3	Dinâmica no espaço de fases	45
4.1.4	Banhos ôhmicos, sub-ôhmicos e super-ôhmicos	47
4.2	Potencial de catraca	48
5	Conclusões	55
A	Método de Numerov	57

Capítulo 1

Introdução

1.1 Sistemas quânticos abertos

Em física é apenas idealização a questão de sistemas que são isolados de seus arredores, na verdade eles são abertos, ou seja, interagem com suas vizinhanças. A compreensão da dinâmica de tais sistemas abertos é de fundamental importância em muitas áreas da física, tanto no nível clássico como no quântico [1]. A interação do sistema aberto com os graus de liberdade do ambiente induz atrito e flutuações. No nível quântico, devido ao emaranhamento, encontra-se um fenômeno adicional em dinâmicas de sistemas abertos, conhecido como ruído quântico. Mesmo na temperatura do zero absoluto, a interação do sistema com o ambiente leva à uma perda de pureza do estado do sistema, uma vez que sistema e ambiente podem tornar-se emaranhados.

Uma boa descrição teórica para dissipação é o conceito de um sistema aberto que interage com seu ambiente por processos de colisão ou através de outros meios que possam ocorrer trocas de energia. O problema conjunto (sistema + ambiente + interação) é conservativo mas, devido as trocas de energia entre sistema e ambiente, o sistema pode ser interpretado como um sistema aberto com dissipação. Tais modelos teóricos microscópicos têm sido propostos para descrever dissipação em sistemas clássicos [2, 3, 4] e quânticos [1, 4, 5], e podem ser aplicados também no contexto da equação estocástica de Schrödinger [6, 7, 8]. Um exemplo interessante da aplicação de modelos de sistemas abertos é a descrição de carga e energia transferida em sistemas moleculares quânticos [9].

Ferramentas teóricas para estudar a dinâmica de sistemas abertos são bem desenvolvidas. No domínio clássico, equações de movimento podem ser suplementadas por termos de atritos e forças flutuantes [10]. Um sistema clássico isolado é descrito por equações de movimento de Hamilton para posição e momento (q, p) . Irreversibilidade induzida por interação com seu ambiente resulta em atritos adicionais e termos flutuantes [11]. Entretanto, no nível

quântico esta questão não é tão simples. Um sistema quântico isolado é descrito por um vetor de estado ψ que evolui obedecendo a equação de Schrödinger. A transição para um sistema quântico aberto é radicalmente diferente da correspondente transição no caso clássico: enquanto neste é ainda significativo falar a respeito de coordenadas de espaço de fase (q, p) , um sistema quântico aberto torna-se emaranhado com seu ambiente e deixa de ser descrito por um único estado puro. O estado de um sistema quântico aberto é caracterizado por seu operador de densidade reduzido ρ_t .

Equação de Schrödinger estocástica determina o estado do sistema $\psi_t(z^*)$, tal que o operador de densidade reduzido ρ_t do sistema aberto é recuperado como a média $M(\dots)$ sobre as muitas realizações do ruído z_t^* . A relação $\rho_t = M(|\psi_t(z^*)\rangle\langle\psi_t(z^*)|)$ é o análogo quântico da solução clássica da equação de Fokker-Planck [6, 10, 12]. As soluções $\psi_t(z^*)$ são frequentemente referidas como *trajetórias quânticas* [13].

Poderosos métodos estocásticos para descrever sistemas quânticos abertos têm sido desenvolvidos, restritos para uma classe especial de sistemas dinâmicos quânticos abertos. Eles são aplicados somente onde o operador de densidade reduzido é governado por uma equação mestra Markoviana do tipo Lindblad [14]. Na aplicação em óptica quântica, a partir do modelo microscópico do sistema, resulta que a evolução do operador de densidade reduzido é bem descrito por uma equação de Lindblad [13, 15, 16].

1.2 Dinâmica não-Markoviana

Modelos de probabilidade para processos que evoluem no tempo de maneira probabilística são denominados **Processos Estocásticos**. Um processo estocástico é dito ser um Processo Markoviano se a probabilidade condicional de qualquer evento futuro, dado qualquer evento passado e o estado presente, é independente do evento passado e depende somente do estado presente. E para processos estocásticos não-Markovianos, o evento futuro é independente do evento passado e do estado presente. Existem vários tipos de processos estocásticos, porém, será considerado apenas o caso não-Markoviano.

Efeitos não-Markovianos são relevantes a baixas temperaturas em muitos problemas de física do estado sólido, como nos fenômenos de tunelamento [1]. Em óptica quântica, um enorme interesse em efeitos não-Markovianos tem recentemente emergido de estudos de decaimento de radiatividade dentro de ambientes estruturados [17, 18, 19, 20, 21]. Efeitos não-Markovianos também surgem na dinâmica de átomos de laser de condensados de Bose-Einstein [22, 23, 24]. Se o feixe de átomos ("ambiente") é extraído de um condensado de Bose-Einstein ("sistema") através da gravidade, o tempo de memória relevante do ambiente é da ordem do tempo que leva um átomo a deixar livremente a região do condensado [25].

Efeitos não-Markovianos são relevantes para controle quântico de realimentação [26,

27], devido a um tempo natural de atraso entre registro de medição e controle subsequente [28, 29, 30]. Tais teorias estão intimamente relacionadas para uma descrição dinâmica de sistemas abertos não-Markovianos em termos da equação de Schrödinger estocástica. Neste trabalho baseamos a derivação da equação de Schrödinger estocástica sobre a solução do modelo microscópico, sistema e ambiente. Destacamos sua importância para a dinâmica de sistemas abertos, e sua relevância para as propriedades quânticas emergentes de sistemas abertos [31].

1.3 Equação estocástica de Schrödinger não-Markoviana

Este trabalho está concentrado na generalização não-Markoviana da equação de Schrödinger estocástica linear. O objetivo é o estudo teórico da dissipação quântica em banhos discretos, que são utilizados para modelar sistemas físicos realísticos. Primeiramente, determinamos a solução numérica da equação de Schrödinger estocástica para uma partícula acoplada a um banho com um número finito N de osciladores harmônicos (HOs) (ver Fig.1.1).

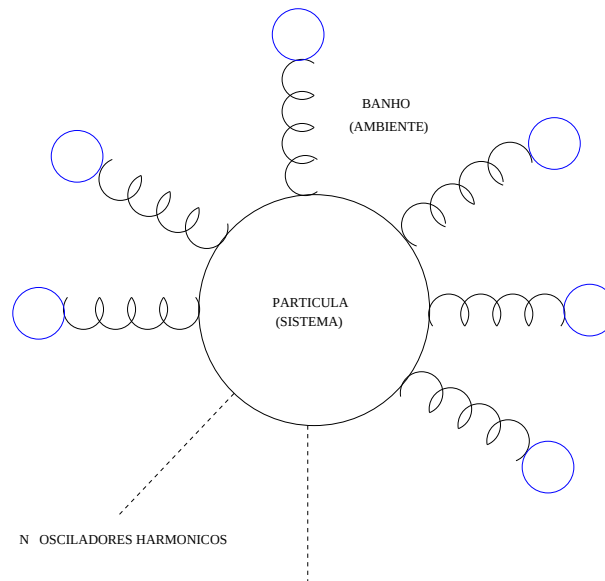


Figura 1.1: Sistema acoplado linearmente com N HOs.

Posteriormente determinamos os níveis de energias, utilizando o algoritmo numérico *Numerov* [32] e as funções de estado que solucionam a equação de Schrödinger para uma partícula com os potenciais, simétrico e assimétrico. Para o caso simétrico temos o potencial harmônico e para o caso assimétrico, o potencial de catraca.¹ Por fim, determinamos numericamente o decaimento do valor esperado da energia para estes potenciais em relação ao número N de HOs do banho.

¹Em inglês é conhecido originalmente como: *Ratchet Potential*.

Basicamente, este trabalho se divide da seguinte forma: No capítulo 2 são mostrados os principais fundamentos de mecânica quântica básica através da álgebra de operadores. No capítulo 3 é mostrado o modelo padrão para sistemas abertos e seu ambiente, para o caso do sistema na temperatura zero. No capítulo 4 os resultados para ambos os potenciais, e posteriormente, conclusões e referências bibliográficas.

Capítulo 2

Conceitos fundamentais

Nos dias atuais, a mecânica quântica (MQ) é o alicerce sobre o qual nos apoiamos para compreender o mundo quântico e nos fornece previsões quantitativas para muitas situações físicas. A MQ descreve uma grande variedade de fenômenos a partir de pouquíssimas premissas, e parte de um arcabouço bastante diferente das equações diferenciais da física clássica. Este capítulo contém os principais conceitos, os principais fundamentos de MQ que deverão ser entendidos, para que posteriormente seja compreendido suas aplicações no nosso modelo.

2.1 Álgebra dos operadores

2.1.1 Kets de base

No tratamento elementar de MQ, é considerado o simbolismo introduzido por Dirac, que tem um significado matemático não-trivial, como uma notação [33]. Um vetor do espaço dos estados é descrito por um símbolo $|\rangle$, que se pronuncia *ket*. Um elemento do dual desse espaço é denotado por $\langle|$, e denominado *bra*. O produto escalar dos estados $|a\rangle$ e $|b\rangle$ é denotado por $\langle b|a\rangle$, e se trata de um bracket,² justificando os nomes.

Autovetores de um observável

Considera-se os autovetores e autovalores de um operador Hermitiano A . Em MQ, os operadores que representam algum observável físico quase sempre são os operadores hermitianos. Logo, começa-se com um importante teorema [34]:

²Em português é conhecida como parêntese ou colchete.

Teorema 2.1 *Os autovalores de um operador hermitiano A são reais; os autovetores de A , correspondentes aos diferentes autovalores, são ortogonais.*

E para comprovar este teorema, tem-se que

$$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle, \quad (2.1)$$

onde a_n e $|\phi_n\rangle$ são autovalores e autovetores de A , respectivamente. Uma vez que A é hermitiano, então

$$\langle\phi_m|A = a_m^*\langle\phi_m|, \quad (2.2)$$

Multiplicado-se ambos os lados de (2.1) à esquerda por $\langle\phi_m|$, e ambos os lados de (2.2) à direita por $|\phi_n\rangle$, e subtraindo-se uma pela outra, obtém-se

$$(a_n - a_m^*)\langle\phi_m|\phi_n\rangle = 0. \quad (2.3)$$

Pode-se assumir que a_n e a_m sejam iguais ou diferentes. Primeiramente, considerando-os como sendo iguais, a condição que os autovalores são reais (primeira metade do teorema) $a_n = a_m^*$ é deduzida, onde considera-se o fato de que $|\phi_n\rangle$ não seja um ket nulo. Supondo agora que a_n e a_m sejam diferentes devido à condição que acabou de ser demonstrada, o fato de que os autovalores sejam reais, a diferença $a_n - a_m^*$ que aparece em (2.3), por premissa, não pode ser zero. Portanto, o produto interno $\langle\phi_m|\phi_n\rangle$ deve ser zero, ou seja,

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle = 0 \quad \text{com} \quad (a_n \neq a_m), \quad (2.4)$$

o que prova suficientemente a ortogonalidade dos autovetores (segunda metade do teorema).

Então, pelo teorema que acabou de ser demonstrado acima, garante-se que os autovalores sejam reais sempre que o operador for hermitiano. É por este motivo que em mecânica quântica se fala à respeito de observáveis hermitianos. Convenciona-se normalizar $|\phi_n\rangle$ de tal modo que ele forme um conjunto **ortonormal** com a condição:

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn}. \quad (2.5)$$

Autovetores como kets de base

Os autovetores normalizados de A formam um conjunto completo. Assim, um ket arbitrário no espaço de kets pode ser expandido em termos dos autovetores de A . Os autovetores de A devem ser usados como kets de base de modo muito semelhante àquele pelo qual vetores unitários mutuamente ortogonais são usados como vetores de base em um espaço Euclidiano. Dado um ket arbitrário $|\psi\rangle$ no espaço gerado pelos autoestados de A , ele pode ser expandido da seguinte forma:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle. \quad (2.6)$$

De modo imediato pode-se determinar os coeficientes da expansão, multiplicando esta relação por $\langle \phi_m |$ à esquerda e usando a propriedade de ortonormalidade (2.5),

$$c_n = \langle \phi_n | \psi \rangle. \quad (2.7)$$

Em outras palavras, a expansão (2.6) é reescrita como

$$|\psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi \rangle, \quad (2.8)$$

em analogia com a expansão de um vetor $\mathbf{V}$ (real) no espaço Euclidiano

$$\mathbf{V} = \sum_i \hat{\mathbf{e}}_i (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{V}), \quad (2.9)$$

onde $\hat{\mathbf{e}}$ forma um conjunto ortonormal de vetores. O axioma da associatividade da multiplicação: $|\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi \rangle$ pode ser interpretado ou como um número $\langle \phi_n | \psi \rangle$ que multiplica $|\phi_n\rangle$ ou, o que é análogo, como o operador $|\phi_n\rangle \langle \phi_n |$ atuando sobre $|\psi\rangle$. Uma vez que $|\psi\rangle$ em (2.8) é um ket arbitrário, tem-se

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1, \quad (2.10)$$

expressão conhecida como **relação de completeza**.³

Dada uma cadeia de kets, operadores ou bras multiplicados em uma ordem correta, em qualquer lugar que seja conveniente, pode ser inserido o operador identidade escrito na forma (2.10). Considerando por exemplo, $\langle \psi | \psi \rangle$; inserindo o operador identidade entre $\langle \psi |$ e $|\psi\rangle$, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \langle \psi | \cdot \left(\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) \cdot |\psi\rangle \\ &= \sum_n |\langle \phi_n | \psi \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Isto mostra que se $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ (normalizado), então os coeficientes da expansão em (2.6) devem satisfazer

$$\sum_n |c_n|^2 = \sum_n |\langle \phi_n | \psi \rangle|^2 = 1. \quad (2.12)$$

Olhando agora para $|\phi_n\rangle \langle \phi_n|$, que aparece em (2.10), por tratar-se de um produto externo, ele deve ser um operador operando em $|\psi\rangle$:

$$(|\phi_n\rangle \langle \phi_n|) \cdot |\psi\rangle = |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi \rangle = c_n |\phi_n\rangle. \quad (2.13)$$

Operando sobre o ket $|\psi\rangle$, o operador $|\phi_n\rangle \langle \phi_n|$ seleciona a parcela de $|\psi\rangle$ que é paralela a $|\phi_n\rangle$, de tal modo que $|\phi_n\rangle \langle \phi_n|$ mostra ser, assim, um **operador de projeção** na direção do ket de base $|\phi_n\rangle$. Ele é representado pela notação Λ_n :

$$\Lambda_n \equiv |\phi_n\rangle \langle \phi_n|, \quad (2.14)$$

³Nesta relação, 1 deve ser entendido como o *operador* identidade.

a relação de completeza (2.10) pode ser escrita como [35]

$$\sum_n \Lambda_n = 1. \quad (2.15)$$

2.1.2 Medidas e Observáveis

Medidas

Tendo já desenvolvido a matemática de espaços de kets, encontramos-nos agora em condições de discutir a teoria quântica do processo de medida, e este assunto não é algo particularmente fácil. Antes que se faça uma medida de um observável A , supõe-se que o estado sistema seja representado por alguma combinação linear da forma

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \langle\phi_n|\psi\rangle. \quad (2.16)$$

Quando uma medida é realizada, o sistema colapsa para um dos autoestados $|\phi_n\rangle$ do observável A , ou seja,

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{medida de } A} |\phi_n\rangle. \quad (2.17)$$

Diz-se que o valor medido de A foi a_n quando a medição faz $|\psi\rangle$ mudar para $|\phi_n\rangle$. É neste sentido que o resultado de um processo de medida resulta em um dos autovalores do observável sendo medido.

Sendo (2.16) o ket de estado de um sistema físico antes da medida, não se sabe de antemão em qual dos vários $|\phi_n\rangle$ o sistema colapsará como resultado do processo de medida. No entanto, a probabilidade de colapsar em um estado $|\phi_n\rangle$ é dada por

$$|c_n|^2 = |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2, \quad (2.18)$$

desde que $|\psi\rangle$ seja normalizado. Embora tenha-se falado até aqui de um sistema físico único, para determinar (2.18) empiricamente deve ser considerado um grande número de medidas feitas sobre um *ensemble*,⁴ todos caracterizados pelo ket $|\psi\rangle$. Um *ensemble* deste tipo é conhecido como **ensemble puro**.

A interpretação probabilística (2.18) para o quadrado do produto interno $|\langle\phi_n|\psi\rangle|^2$ é um dos postulados fundamentais da mecânica quântica. Nota-se, porém, que em casos extremos ele faz bastante sentido. Supondo que o estado de um ket seja o próprio $|\phi_n\rangle$ antes mesmo que se faça a medida, então segundo (2.18), a probabilidade para se obter a_n como resultado do processo de medida, ou falando de modo mais preciso, para que haja um colapso em $|\phi_n\rangle$ é igual a 1. Se A for medido novamente, obtém-se apenas $|\phi_n\rangle$; de modo bastante geral, medidas de um observável repetidas sucessivamente dão o mesmo resultado.⁵ Se, por outro

⁴É definido como a coleção de sistemas físicos identicamente preparados.

⁵Aqui, quando se fala de medições sucessivas, estas devem ser executadas imediatamente uma após a outra.

lado, a probabilidade de um sistema inicialmente caracterizado por $|\phi_n\rangle$ ir para outro auto estado $|\phi_m\rangle$ para o qual $a_m \neq a_n$, por causa da ortogonalidade entre $|\phi_n\rangle$ e $|\phi_m\rangle$ obtém-se de (2.18) uma probabilidade zero.

Do ponto de vista da teoria de medida, kets ortogonais correspondem a alternativas mutuamente excludentes. De modo bastante geral, a probabilidade de qualquer coisa deve ser um número não negativo. Além disso, quando existem várias probabilidades alternativas, a soma total das probabilidades deve ser 1. O postulado de probabilidade (2.18) satisfaz estas duas condições. Então o **valor esperado** ⁶ de A em relação ao estado $|\psi\rangle$ é definido como [34]

$$\langle A \rangle \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle. \quad (2.19)$$

Para garantir que isto esteja referindo-se ao estado $|\psi\rangle$, a notação $\langle A \rangle_\psi$ é algumas vezes empregada. A equação (2.19) é uma definição que, no entanto, coincide com a noção intuitiva de *valor médio medido*, pois ela pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n \sum_m \langle \psi | \phi_m \rangle \langle \phi_m | A | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n a_n |\langle \phi_n | \psi \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde a_n corresponde ao valor medido e $|\langle \phi_n | \psi \rangle|^2$ a probabilidade de se obter a_n .

É introduzido a noção de **medição seletiva**, ou *filtragem*, para melhor esclarecer o significado de medidas em mecânica quântica. De uma maneira geral, imagina-se um processo de medida com um dispositivo que seleciona apenas um dos autokets de A , por exemplo $|\phi_n\rangle$, e rejeitando todos os outros. E é a isto que se refere quando se fala em medição seletiva, também chamada de filtragem, pois só um dos autoestados de A consegue passar pela rigorosa seleção. Do ponto de vista matemático, quantifica-se a medida seletiva, aplicando-se o operador de projeção Λ_n a $|\psi\rangle$:

$$\Lambda_n |\psi\rangle = |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi \rangle. \quad (2.21)$$

Observáveis compatíveis

Dois observáveis A e B são **compatíveis** quando os correspondentes operadores comutam entre si, ou seja,

$$[A, B] = 0, \quad (2.22)$$

e **incompatíveis** quando os operadores correspondentes não comutam entre si,

$$[A, B] \neq 0. \quad (2.23)$$

⁶O valor esperado é definido como a média dos valores possíveis, ponderados pela respectivas probabilidades de ocorrência.

No primeiro caso de observáveis A e B compatíveis, o espaço de kets é gerado pelos autovetores de A . Poderíamos também considerar o mesmo espaço como sendo gerado pelos autovetores de B .

Teorema 2.1 *Suponha que A e B sejam observáveis compatíveis, e os autovalores de A são não-degenerados. Então, os elementos de matriz $\langle \phi_m | B | \phi_n \rangle$ são todos diagonais.*

A prova deste teorema [34] é extremamente simples. Usando a definição (2.22) para observáveis compatíveis, observa-se que

$$\langle \phi_m | [A, B] | \phi_n \rangle = (a_m - a_n) \langle \phi_m | B | \phi_n \rangle = 0, \quad (2.24)$$

onde, $\langle \phi_m | B | \phi_n \rangle$ deve ser zero a menos que $a_n = a_m$, o que prova a asserção.

Na forma compacta, os elementos da matriz B podem ser escritos como sendo

$$\langle \phi_m | B | \phi_n \rangle = \delta_{nm} \langle \phi_n | B | \phi_n \rangle. \quad (2.25)$$

Assim, ambos A e B podem ser representados por matrizes diagonais por meio do mesmo conjunto de kets de base. Com o auxílio de (2.10) e (2.25), B pode ser escrito como

$$B = \sum_{m,m'} |\phi_m\rangle \langle \phi_m | B | \phi_{m'} \rangle \langle \phi_{m'}|. \quad (2.26)$$

Supondo que este operador atue sobre um autovetor de A :

$$B |\phi_n\rangle = \sum_{m,m'} |\phi_m\rangle \langle \phi_m | B | \phi_{m'} \rangle \langle \phi_{m'} | \phi_n \rangle = (\langle \phi_n | B | \phi_n \rangle) |\phi_n\rangle. \quad (2.27)$$

Contudo, esta relação não é nada mais que a equação de autovalores para um operador B , com autovalores

$$b_n \equiv \langle \phi_n | B | \phi_n \rangle. \quad (2.28)$$

O ket $|\phi_n\rangle$ é, portanto, um **autovetor simultâneo** de A e B , e também pode ser usado $|\phi_n, \theta_n\rangle$ para caracterizar o autovetor simultâneo, devido a essa imparcialidade $|\phi_n\rangle$ em relação a ambos os operadores.

Um autovetor simultâneo de A e B , denotado por $|\phi_n, \theta_n\rangle$, tem a propriedade

$$A |\phi_n, \theta_n\rangle = a_n |\phi_n, \theta_n\rangle, \quad (2.29a)$$

$$B |\phi_n, \theta_n\rangle = b_n |\phi_n, \theta_n\rangle. \quad (2.29b)$$

Nos casos em que não há degenerescência, esta notação é supérflua, pois de (2.28) fica claro que se for especificado a_n , necessariamente é conhecido b_n que aparece em $|\phi_n, \theta_n\rangle$. A notação $|\phi_n, \theta_n\rangle$ é muito mais poderosa quando existem degenerescências.

Geralmente, um **índice coletivo** K_n é usado para representar (a_n, b_n) , tal que

$$|K_n\rangle = |\phi_n, \theta_n\rangle. \quad (2.30)$$

Para a situação na qual há vários (mais que dois) observáveis mutuamente compatíveis, obviamente são generalizadas estas considerações, a saber

$$[A, B] = [B, C] = [A, C] = \dots = 0. \quad (2.31)$$

Supondo ter achado um conjunto **máximo** de observáveis que comutam, não poderá ser adicionado quaisquer outros observáveis à esta lista sem violar (2.31). Os autovalores dos operadores individuais $A, B, C, \dots$ podem apresentar degenerescências, mas se especificar uma combinação $(a_n, b_n, c_n, \dots)$, então os autovetores simultâneos de $A, B, C, \dots$ estarão univocamente determinados.

A relação de ortogonalidade para

$$|K_n\rangle = |\phi_n, \theta_n, \gamma_n, \dots\rangle \quad (2.32)$$

será

$$\langle K_m | K_n \rangle = \delta_{K_n K_m} = \delta_{nm(\phi)} \delta_{nm(\theta)} \delta_{nm(\gamma)} \dots, \quad (2.33)$$

enquanto que a relação de completeza, será escrita como

$$\sum_{K_n} |K_n\rangle \langle K_n| = \sum_{n(\phi)} \sum_{n(\theta)} \sum_{n(\gamma)} \dots |\phi_n, \theta_n, \gamma_n, \dots\rangle \langle \phi_n, \theta_n, \gamma_n, \dots| = 1. \quad (2.34)$$

Supomos agora medidas de A e B quando eles são observáveis compatíveis, primeiro medindo A e obtendo a_n e na sequência B para obter b_n , e finalmente A novamente. Segue-se deste formalismo que a terceira medida sempre dará a_n com certeza absoluta, isto é, a segunda medida (B) não destrói a informação prévia obtida da primeira medida (A). Isto é bastante óbvio quando os autovalores de A são não-degenerados:

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{Medida de } A} |\phi_n, \theta_n\rangle \xrightarrow{\text{Medida de } B} |\phi_n, \theta_n\rangle \xrightarrow{\text{Medida de } A} |\phi_n, \theta_n\rangle. \quad (2.35)$$

Quando existe degenerescência, o argumento é como segue: Após a primeira medida (A), que resulta em a_n , o sistema se encontra em alguma combinação linear do tipo

$$\sum_i^v c_n^{(i)} |\phi_n, \theta^{(i)}\rangle, \quad (2.36)$$

onde v é o grau de degenerescência e os kets $|\phi_n, \theta^{(i)}\rangle$ têm os mesmos autovalores a_n com relação ao operador A . A segunda medida (B) pode selecionar apenas um dos termos da combinação linear (2.36), por exemplo, o termo $|\phi_n, \theta^{(j)}\rangle$, mas uma terceira medida feita (A) ainda dará o resultado a_n . Tendo ou não degenerescência, as medidas de A e B não se interferem. O termo *compatível* é, de fato, apropriado.

Observáveis incompatíveis

Agora analisemos os observáveis incompatíveis, que são menos triviais. O primeiro ponto a ser enfatizado é que observáveis incompatíveis não possuem um conjunto completo de autovetores simultâneos. Para mostrar isso, suponha-se que a afirmação oposta seja verdadeira. Neste caso, haveria então um conjunto de autovetores simultâneos que obedeceriam (2.29). Logo

$$AB|\phi_n, \theta_n\rangle = Ab_n|\phi_n, \theta_n\rangle = a_nb_n|\phi_n, \theta_n\rangle, \quad (2.37)$$

do mesmo modo

$$BA|\phi_n, \theta_n\rangle = Ba_n|\phi_n, \theta_n\rangle = a_nb_n|\phi_n, \theta_n\rangle, \quad (2.38)$$

então

$$AB|\phi_n, \theta_n\rangle = BA|\phi_n, \theta_n\rangle, \quad (2.39)$$

e portanto $[A, B] = 0$, o que está em contradição com a hipótese de que os operadores são incompatíveis. Portanto, em geral, $|\phi_n, \theta_n\rangle$ não faz sentido para observáveis incompatíveis.

2.1.3 Posição

Autovetores de posição e medidas de posição

Já foi mostrado que uma medida em mecânica quântica é, essencialmente, um processo de filtragem. Para estender esta idéia à medição de observáveis que apresentam um espectro contínuo, é melhor se trabalhar com um exemplo específico. Para tanto, é considerado o operador posição (ou coordenada) em uma dimensão. É postulado que os autovetores $|\phi'_n\rangle$ do operador posição q satisfazem

$$q|\phi'_n\rangle = q_n|\phi'_n\rangle \quad (2.40)$$

e formam um conjunto completo. Nesta relação, q_n é simplesmente um número com dimensão de comprimento, enquanto que q é um operador. O ket de um estado físico arbitrário pode ser expandido em termos de $|\phi'_n\rangle$:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi'_n |\phi'_n\rangle \langle \phi'_n | \psi \rangle. \quad (2.41)$$

Considera-se agora uma medida seletiva altamente idealizada do observável posição. Supondo um detector muito pequeno que dispara um sinal somente quando a partícula está exatamente na posição q_n e em nenhum outro lugar. Imediatamente após o disparo do detector, pode-se dizer que o estado em questão é representado por $|\phi'_n\rangle$. Em outras palavras, quando o detector dispara, $|\psi\rangle$, "salta", abruptamente para o autoestado $|\phi'_n\rangle$. Na prática, o melhor que o detector pode fazer é localizar a partícula dentro de um pequeno intervalo, Δ , em torno de

q_n . Um detector realista dispararia quando a partícula se encontrasse dentro de uma região estreita ($q_n - \Delta/2, q_n + \Delta/2$). Quando se registra uma contagem em um detector deste tipo, o ket de estado muda abruptamente da seguinte maneira:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi'_m |\phi'_m\rangle \langle \phi'_m | \psi \rangle \xrightarrow{\text{Medida}} \int_{q_n - \Delta/2}^{q_n + \Delta/2} d\phi'_m |\phi'_m\rangle \langle \phi'_m | \psi \rangle. \quad (2.42)$$

Admitindo que $\langle \phi'_m | \psi \rangle$ não varie apreciavelmente dentro deste estreito intervalo, Δ , a probabilidade para um disparo do detector é dada por

$$|\langle \phi'_m | \psi \rangle|^2 d\phi'_m, \quad (2.43)$$

onde é usado $d\phi'_m$ para representar Δ . Esta expressão é o análoga a $|\langle \phi_n | \psi \rangle|^2$ para a probabilidade de $|\psi\rangle$ ser encontrada num autoestado $|\phi_n\rangle$ quando o observável por A for medido. A probabilidade de encontrar a partícula em algum lugar entre $-\infty$ e $+\infty$ é

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\phi'_n |\langle \phi'_n | \psi \rangle|^2, \quad (2.44)$$

que é normalizado em 1 se $|\psi\rangle$ for normalizado:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \implies \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi'_n \langle \psi | \phi'_n \rangle \langle \phi'_n | \psi \rangle = 1. \quad (2.45)$$

Já pode ser observado que $\langle \phi'_n | \psi \rangle$ é uma função de onda para um estado físico representado por $|\psi\rangle$.

2.1.4 Funções de onda no espaço de posição e momento

Função de onda no espaço de posição

Aqui, é apresentado um estudo sistemático das propriedades das funções do ondas ⁷ nos espaços de posição e momento. Por uma questão de simplicidade, é tratado o caso unidimensional. Os autovetores de base empregados são os kets de posição, que satisfazem

$$q |\phi'_n\rangle = q_n |\phi'_n\rangle, \quad (2.46)$$

e normalizada de tal maneira que a condição de ortogonalidade torna-se

$$\langle \phi'_m | \phi'_n \rangle = \delta(q_m - q_n). \quad (2.47)$$

Um ket representando um estado físico pode ser expandido em termos de $|\phi'_n\rangle$,

$$|\psi\rangle = \int d\phi'_n |\phi'_n\rangle \langle \phi'_n | \psi \rangle, \quad (2.48)$$

⁷Função de onda é uma ferramenta matemática que a física quântica usa para descrever um sistema físico qualquer.

e que o coeficiente da expansão $\langle \phi'_n | \psi \rangle$ é interpretado de tal maneira que

$$|\langle \phi'_n | \psi \rangle|^2 d\phi'_n \quad (2.49)$$

nos fornece a probabilidade da partícula ser encontrada num pequeno intervalo $d\phi'_n$ em torno de q_n .

Neste formalismo, o produto interno $\langle \phi'_n | \psi \rangle$ é aquilo ao qual usualmente se refere como sendo a **função de onda** $\varphi_\psi(q_n)$ para o estado $|\psi\rangle$. Ou seja

$$\langle \phi'_n | \psi \rangle = \varphi_\psi(q_n). \quad (2.50)$$

As interpretações probabilísticas para o coeficiente de expansão $c_n (= \langle \phi_n | \psi \rangle)$ e para a função de onda $\varphi_\psi(q_n) (= \langle \phi'_n | \psi \rangle)$ são frequentemente apresentados como postulados separados em mecânica quântica elementar. Uma das principais vantagens deste formalismo, que teve a sua origem em Dirac, é que os dois tipos de interpretação probabilística são unificados: $\varphi_\psi(q_n)$ é um coeficiente de expansão, da mesma maneira que c_n o é.

Seja o produto interno $\langle \psi' | \psi \rangle$. Usando a completeza de $|\phi'_n\rangle$, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \psi \rangle &= \int d\phi'_n \langle \psi' | \phi'_n \rangle \langle \phi'_n | \psi \rangle \\ &= \int d\phi'_n \varphi_{\psi'}^*(q_n) \varphi_\psi(q_n), \end{aligned} \quad (2.51)$$

tal que, $\langle \psi' | \psi \rangle$ caracteriza a sobreposição entre duas funções de onda, e é definida como sendo a integral de superposição. A interpretação mais geral para $\langle \psi' | \psi \rangle$, independente das representações, é que este produto representa a amplitude de probabilidade do estado $|\psi\rangle$ ser encontrado no estado $|\psi'\rangle$. Interpretamos agora a expansão

$$|\psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi \rangle \quad (2.52)$$

usando a linguagem de funções de onda. Para tanto, basta multiplicar ambos os lados de (2.52) pelo bra de posição $\langle \phi'_n |$ pela esquerda. Então, encontra-se

$$\langle \phi'_n | \psi \rangle = \sum_n \langle \phi'_n | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \psi \rangle, \quad (2.53)$$

onde, na notação usual da mecânica ondulatória, esta expressão é reconhecida como

$$\varphi_\psi(q_n) = \sum_n c_n u_n(q_n). \quad (2.54)$$

Aqui é introduzida uma **autofunção** do operador A com autovalor a_n , $u_n(q_n) = \langle \phi'_n | \phi_n \rangle$. É examinado agora como $\langle \psi' | A | \psi \rangle$ pode ser escrito usando as funções de onda para $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle$. Assim,

$$\begin{aligned} \langle \psi' | A | \psi \rangle &= \int d\phi'_n \int d\phi'_m \langle \psi' | \phi'_n \rangle \langle \phi'_n | A | \phi'_m \rangle \langle \phi'_m | \psi \rangle \\ &= \int d\phi'_n \int d\phi'_m \varphi_{\psi'}^*(q_n) \langle \phi'_n | A | \phi'_m \rangle \varphi_\psi(q_m). \end{aligned} \quad (2.55)$$

Logo, para calcular $\langle \psi' | A | \psi \rangle$, deve-se conhecer os elementos de matriz $\langle \phi'_n | A | \phi'_m \rangle$, que em geral é uma função de duas variáveis q_n e q_m .

Funções de onda no espaço de momento

Até aqui, continua-se no caso unidimensional por simplicidade. No entanto há, na verdade, uma completa simetria entre q e p que se pode inferir a partir das relações de comutação canônicas. Agora trabalha-se na representação de momento, ou seja, na base p . Os autovetores na base p dizem que

$$p|p'\rangle = p_n|p'\rangle \quad (2.56)$$

e

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p_n - p_m). \quad (2.57)$$

Os autovetores de momento $|p'\rangle$ geram o espaço de kets da mesma maneira que os autovetores de posição $|\phi'_n\rangle$. Um ket de estado arbitrário $|\psi\rangle$ pode ser expandido da seguinte forma:

$$|\psi\rangle = \int dp' |p'\rangle \langle p'|\psi\rangle. \quad (2.58)$$

É dado aos coeficientes de expansão $\langle p'|\psi\rangle$ uma interpretação em termos probabilísticos, isto é, a probabilidade de que uma medida de p resulte no autovalor p_n em um pequeno intervalo dp' é igual a $|\langle p'|\psi\rangle|^2 dp'$. Costuma-se chamar $\langle p'|\psi\rangle$ de **função de onda no espaço de momento**. A notação $\phi_\psi(p_n)$ é frequentemente usada:

$$\langle p'|\psi\rangle = \phi_\psi(p_n). \quad (2.59)$$

Se $|\psi\rangle$ for analisado, obtém-se

$$\int dp' \langle \psi|p'\rangle \langle p'|\psi\rangle = \int dp' |\phi_\psi(p_n)|^2 = 1. \quad (2.60)$$

Agora buscando a conexão entre a representação q e a representação p , recorda-se que no caso de espectros discretos, a mudança de base do conjunto antigo $|\phi_n\rangle$ para o novo conjunto $|\theta_n\rangle$ é caracterizada pela matriz de transformação. Da mesma forma, espera-se que a informação buscada esteja contida em $\langle \phi'_n|p'\rangle$, que é uma função de q_n e p_n , usualmente chamada de **função de transformação** da representação q para representação p . Para derivar a forma explícita de $\langle \phi'_n|p'\rangle$, usa-se $|\psi\rangle$ como o autovetor de momento $|p'\rangle$, obtém-se

$$\langle \phi'_n|p|p'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi'_n} \langle \phi'_n|p'\rangle \quad (2.61)$$

ou

$$p_n \langle \phi'_n|p'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi'_n} \langle \phi'_n|p'\rangle. \quad (2.62)$$

Como solução desta equação diferencial,

$$\langle \phi'_n|p'\rangle = N e^{(ipq_n/\hbar)}, \quad (2.63)$$

onde $\mathbf{N}$ é uma constante de normalização a ser determinada. O fato de a função de transformação ser uma função de duas variáveis, q_n e p_n , temporariamente podem ser consideradas como sendo uma função de q_n apenas, com p_n fixo, então pode ser vista como a amplitude de probabilidade de se encontrar, na posição q_n , um autovetor de momento especificado por p_n . Assim, a (2.61) simplesmente diz que a função de onda de um autoestado de momento é uma onda plana. Para a constante de normalização $\mathbf{N}$, considera-se primeiramente a relação

$$\langle \phi'_n | \phi'_m \rangle = \int dp' \langle \phi'_n | p' \rangle \langle p' | \phi'_m \rangle. \quad (2.64)$$

O lado esquerdo é simplesmente $\delta(q_n - q_m)$ (ortogonalidade), e o lado direito pode ser calculado com a forma explícita de $\langle \phi'_n | p' \rangle$ (onda plana). Ou seja

$$\begin{aligned} \delta(q_n - q_m) &= |\mathbf{N}|^2 \int dp' e^{\left[\frac{ip_n(q_n - q_m)}{\hbar} \right]} \\ &= 2\pi\hbar |\mathbf{N}|^2 \delta(q_n - q_m). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Convencionando $\mathbf{N}$ como sendo um real puro e positivo, finalmente chega-se a

$$\langle \phi'_n | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\left(\frac{ip_n q_n}{\hbar} \right)}. \quad (2.66)$$

Pode-se agora demonstrar como a função de onda no espaço de posição se relaciona com a função de onda no espaço de momento. Tudo o que resta é reescrever

$$\langle \phi'_n | \psi \rangle = \int dp' \langle \phi'_n | p' \rangle \langle p' | \psi \rangle \quad (2.67a)$$

$$\langle p' | \psi \rangle = \int dp' \langle \phi'_n | p' \rangle \langle p' | \phi_m \rangle \quad (2.67b)$$

como

$$\phi_\psi(q_n) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int dp' e^{\left(\frac{ip_n q_n}{\hbar} \right)} \phi_\psi(p_n) \quad (2.68a)$$

$$\phi_\psi(p_n) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int d\phi'_n e^{\left(\frac{-ip_n q_n}{\hbar} \right)} \phi_\psi(q_n). \quad (2.68b)$$

Pacotes de onda gaussianos

Para ilustrar o formalismo básico, é instrutivo analisar um exemplo físico. Considera-se aquilo que é conhecido por **pacote de onda gaussiano**,⁸ cuja função de onda no espaço q é dada por [34]

$$\langle \phi'_n | \psi \rangle = \left[\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{d}} \right] e^{\left[ikq_n - \frac{q_n^2}{2d^2} \right]}. \quad (2.69)$$

A probabilidade de observar a partícula cai rapidamente a zero para $|q_n| > d$. Mais especificamente, a densidade de probabilidade $|\langle \phi'_n | \psi \rangle|^2$ tem uma forma gaussiana com largura d , e pode ser vista na Fig.2.1.

⁸Trata-se de uma onda plana com um número de onda k modulado por um perfil gaussiano centrado na origem.

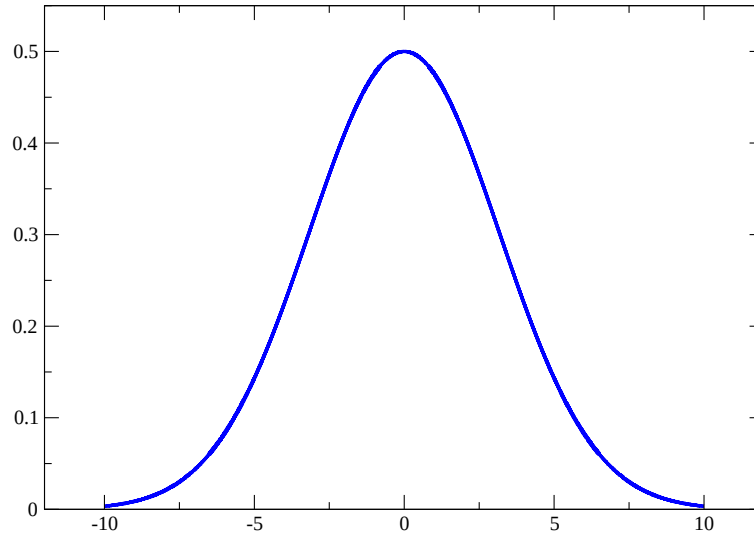


Figura 2.1: Densidade de probabilidade de um pacote de ondas gaussiano.

2.2 Dinâmica quântica

Até o presente momento não foi discutido a maneira segundo a qual sistemas físicos evoluem no tempo. Nesta parte, será tratado o estudo da evolução dinâmica de kets que representam um estado físico e/ou observáveis, ou seja, o análogo quântico das equações de movimento. Em mecânica quântica, o tempo não é considerado um operador, é simplesmente um parâmetro. Não faz sentido referir-se a um operador tempo do mesmo modo pelo qual se refere a um operador posição.

2.2.1 Evolução temporal da equação de Schrödinger

Operador de evolução temporal

Representa-se o ket correspondente ao estado em um tempo posterior por

$$|\psi, t_0; t\rangle, \quad (t > 0) \quad (2.70)$$

onde manteve-se ψ e t_0 para ser tomado como referência, no estado $|\psi\rangle$, em um tempo anterior. Tendo a idéia de que o tempo é um parâmetro contínuo, espera-se que

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\psi, t_0; t\rangle = |\psi\rangle, \quad (2.71)$$

ou usando-se uma notação abreviada,

$$|\psi, t_0; t_0\rangle = |\psi, t_0\rangle. \quad (2.72)$$

A tarefa a ser feita aqui é estudar a evolução temporal do estado ket:

$$|\psi, t_0\rangle = |\psi\rangle \xrightarrow{\text{Evolução temporal}} |\psi, t_0; t\rangle. \quad (2.73)$$

Em outras palavras, o interesse é saber como o estado ket evolui sob uma mudança $t_0 \rightarrow t$ no tempo. Os dois kets estão relacionados por um operador $U(t, t_0)$, chamado de **operador de evolução temporal**:

$$|\psi, t_0; t\rangle = U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle. \quad (2.74)$$

Uma das propriedades do operador U é a unitariedade $U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = 1$. Também é conveniente considerar um operador evolução temporal infinitesimal $U(t_0 + dt, t_0)$:

$$|\psi, t_0; t_0 + dt\rangle = U(t_0 + dt, t_0) |\psi, t_0\rangle. \quad (2.75)$$

A equação de Schrödinger

Na MQ, uma função de estado é uma combinação linear de valor próprio. Na representação de Schrödinger, o estado de um sistema evolui com o tempo, onde a evolução para um sistema quântico fechado é provocada por um operador unitário chamado de operador da evolução temporal. Com a dedução do operador de evolução temporal $U(t, t_0)$, é possível obter uma equação diferencial para este operador.

Explorando a propriedade da composição

$$U(t + dt, t_0) = U(t + dt, t) U(t, t_0) = \left(1 - \frac{iH dt}{\hbar}\right) U(t, t_0), \quad (2.76)$$

uma vez que

$$e^{\frac{iH}{\hbar} dt} \simeq 1 - \frac{iH}{\hbar} dt \dots, \quad (2.77)$$

e a diferença entre os tempos $t_1 - t_0$ não precisa ser infinitesimal.

Então,

$$U(t + dt, t_0) - U(t, t_0) = -i \left(\frac{H}{\hbar}\right) dt U(t, t_0), \quad (2.78)$$

que pode ser escrito na forma de uma equação diferencial:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0), \quad (2.79)$$

onde esta é chamada de **Equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal**. E tudo que é relacionado com a evolução temporal, deriva da equação fundamental.

Para se obter a equação de Schrödinger para um ket de um estado, deve-se multiplicar ambos os lados da equação por $|\psi, t_0\rangle$ à direita, onde obtém-se

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle = H U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle, \quad (2.80)$$

mas como $|\psi, t_0\rangle$ não depende de t , usando a relação (2.74), a Eq.(2.80) pode ser reescrita como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t_0; t\rangle = H |\psi, t_0; t\rangle. \quad (2.81)$$

2.2.2 O oscilador harmônico simples

Um dos problemas mais importantes em mecânica quântica é o oscilador harmônico simples. Além de possuir um grande valor prático, ilustra muitos métodos e conceitos básicos de mecânica quântica. Ele pode descrever fenômenos que vão de vibrações moleculares a estruturas nucleares. O Hamiltoniano básico do HO simples é [35]

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}, \quad (2.82)$$

onde ω é a frequência angular do oscilador, que está relacionado com a relação $\omega = \sqrt{k/m}$ (lei de Hooke), e k é a constante elástica da mola. Os operadores q e p são hermitianos, e também é conveniente definir dois operadores

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(q + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(q - \frac{ip}{m\omega} \right), \quad (2.83)$$

não hermitianos e conhecidos como **operador destruição** e **operador criação**,⁹ respectivamente.

Fazendo as relações de comutação canônicas, obtém-se imediatamente

$$[a, a^\dagger] = \left(\frac{1}{2\hbar} \right) (-i[q, p] + i[p, q]) = 1. \quad (2.84)$$

Pode ser definido também $N = a^\dagger a$, que é hermitiano e obtém-se de maneira direta

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right) \left(q^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2} \right) + \left(\frac{i}{2\hbar} \right) [q, p] \\ &= \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (2.85)$$

onde pode ser relacionado o operador número resultando:

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right). \quad (2.86)$$

Uma vez que H é uma função linear de N , N pode ser diagonalizado simultaneamente com H . Então, caracteriza-se um autovetor de energia N pelo seu autovalor n tal que

$$N |n\rangle = n |n\rangle. \quad (2.87)$$

⁹Em inglês são conhecidas como, *annihilation* e *creation operators*.

Logo, devido as equações (2.86) e (2.87) obtem-se também

$$H |n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega |n\rangle, \quad (2.88)$$

o que de forma imediata, são dados os autovalores de energia por

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad (2.89)$$

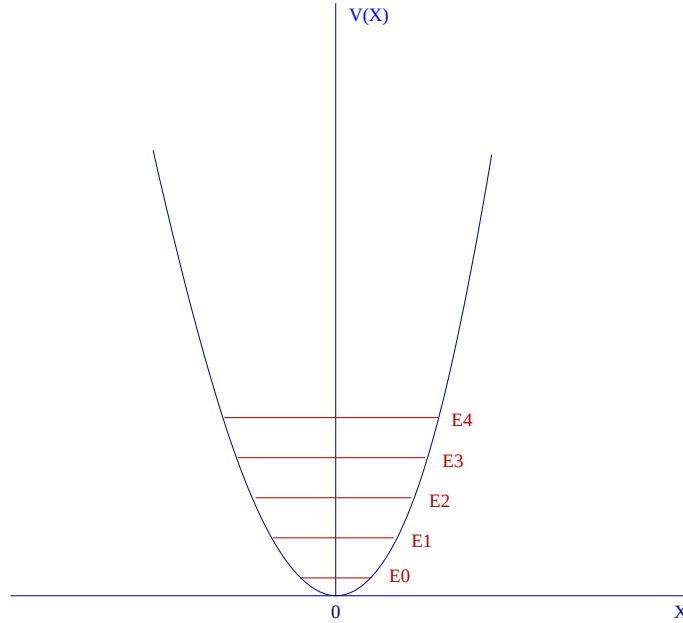


Figura 2.2: Espectro de energias para o potencial do oscilador harmônico.

No caso clássico, a energia pode ter qualquer valor, sendo determinada pelas condições iniciais do problema (velocidade e posição iniciais da massa). Já no caso quântico, o espectro de energias consiste em um número infinito de níveis discretos, como mostrado na Fig.2.2. Para todos os valores da energia, a partícula está ligada, e os níveis de energia estão igualmente espaçados, com separação $\hbar\omega$ entre eles, exatamente da mesma forma que Planck havia proposto quando formulou a teoria que explicava a radiação emitida por um corpo negro. Outra diferença com relação ao oscilador clássico é que o nível de menor energia corresponde a $n = 0$, é $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

Este valor finito da energia do estado fundamental, é chamado de energia de ponto zero, um fenômeno essencialmente quântico e que está relacionado ao Princípio da Incerteza. Na Mecânica Clássica a menor energia possível para o oscilador seria a correspondente à situação em que a partícula está em repouso na origem de coordenadas, ou seja, com energia igual a zero. No caso da MQ a relação de incerteza não permite esta situação de termos a partícula com momento zero em uma posição determinada, pois assim teria posição e momento simultaneamente bem definidos. Nota-se, finalmente, que, de acordo com a observação de que

os estados ligados dos sistemas em uma dimensão são não-degenerados, também no caso do HO quântico existe apenas uma função de onda associada a cada energia E_n .

2.2.3 Representação de interação

Na MQ a Representação de Dirac ou **Representação de Interação** é uma intermediação entre a Representação de Schrödinger e a Representação de Heisenberg. Considerando que nas duas representações ou o vetor do estado quântico ou o operador possuem dependência com o tempo, na representação de Dirac ambas possuem parte da dependência do tempo dos observáveis. Equações que incluem operadores agindo em tempos distintos, que são comportadas na representação de Dirac, não necessariamente serão comportados nas representações de Schrödinger e Heisenberg. Isto é porque transformações unitárias do tempo se relaciona com operadores de uma representação com o operador análogo da outra representação.

Operadores e vetores dos estados quânticos na representação de Dirac são relacionados pela mudança de base para aqueles operadores e vetores na representação de Schrödinger [36]. Para alternar na representação de Dirac, divide-se o hamiltoniano da representação de Schrödinger em duas partes, $H_S = H_{0,S} + H_{1,S}$. Qualquer escolha das partes dará uma representação de Dirac válida, mas para que seja útil na simplificação do problema, as partes são escolhidas de forma que $H_{0,S}$ será facilmente resolvido e $H_{1,S}$ conterá as partes mais difíceis de analisar deste sistema. Se o hamiltoniano for dependente do tempo, normalmente será vantajoso incluir explicitamente os termos dependentes do tempo com $H_{1,S}$, deixando o $H_{0,S}$ independente do tempo. Se existir um contexto em que isto faça sentido ter um $H_{0,S}$ dependente do tempo, então deve-se trocar $e^{\pm iH_{0,S}t/\hbar}$ pelo operador de evolução.

Vetor de estado quântico e operadores

O vetor de estado quântico na representação de Dirac é definido como

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{iH_{0,S}t/\hbar} |\psi_S(t)\rangle \quad (2.90)$$

onde

$$|\psi_S(t)\rangle \quad (2.91)$$

é o mesmo vetor da representação de Schrödinger.

Um operador na representação de Dirac é definido como

$$A_I(t) = e^{iH_{0,S}t/\hbar} A_S(t) e^{-iH_{0,S}t/\hbar}, \quad (2.92)$$

onde $A_S(t)$ não será dependente de t e poderá ser reescrita como A_S .

Operador hamiltoniano

Para o operador H_0 a representação de Dirac e Schrödinger são idênticas

$$H_{0,I}(t) = e^{iH_{0,S}t/\hbar} H_{0,S} e^{-iH_{0,S}t/\hbar} = H_{0,S}. \quad (2.93)$$

Isto pode ser comprovado usando o fato que os operadores sejam comutáveis com funções diferenciáveis. Este operador em particular também pode ser escrito na forma H_0 sem ambiguidade.

Para a perturbação hamiltoniana $H_{1,I}$,

$$H_{1,I}(t) = e^{iH_{0,S}t/\hbar} H_{1,S} e^{-iH_{0,S}t/\hbar} \quad (2.94)$$

onde a perturbação hamiltoniana da representação de Dirac se torna um hamiltoniano dependente do tempo (a não ser que $[H_{1,S}, H_{0,S}] = 0$). É possível de se obter a representação de Dirac para um hamiltoniano dependente do tempo $H_{0,S}(t)$, mas os exponenciais precisam ser substituídos pelo propagador unitário devido $H_{0,S}(t)$ ou explicitamente com uma integral exponencial ordenada pelo tempo.

2.2.4 Decoerência quântica

Na MQ, a decoerência quântica é a perda da coerência ou ordenamento de ângulos de fase entre componentes de um sistema numa sobreposição quântica [37]. Uma das consequências disto é a adição do comportamento clássico ao sistema. A decoerência quântica dá a aparência de colapso de função de onda (redução das possibilidades físicas numa única possibilidade como vista por um observador) e justifica o quadro e intuitividade da física clássica como uma aproximação aceitável. A decoerência é o mecanismo pelo qual o mecanismo clássico emerge do quântico e determina a localização da fronteira clássico-quântico e ocorre quando um sistema interage com o seu ambiente de uma maneira termodinamicamente irreversível. Isto previne que diferentes elementos na superposição quântica da função de onda ambiente mais sistema, interfiram entre si.

Decoerência pode ser vista como a perda de informação a partir de um sistema para o ambiente (frequentemente modelada como um banho térmico), uma vez que cada sistema é de baixo acoplamento com o estado energético do seu entorno. Considerado isoladamente, a dinâmica do sistema é não-unitária (embora o sistema combinado mais o ambiente evolua de uma forma unitária). Assim, a dinâmica do sistema por si só é irreversível. Como acontece com qualquer acoplamento, emaranhamentos são gerados entre o sistema e o ambiente. Estes têm o efeito de partilhar informação quântica com os arredores.

Capítulo 3

Estado quântico de difusão linear não-Markoviano

Utiliza-se a solução numérica da equação de Schrödinger estocástica entre sistema e ambiente, para obtenção de algumas particularidades quânticas relevantes, como por exemplo o comportamento da energia e da posição ao longo do tempo. Espera-se mostrar o desenvolvimento do modelo, para que posteriormente possamos observar suas características físicas. Ao que parece, entretanto, é possível determinar a dinâmica do sistema e ambiente, solucionando numericamente a equação de Schrödinger no espaço de Hilbert. A derivação desses resultados são baseados no modelo padrão de sistemas quânticos abertos como explanado neste capítulo.

3.1 Modelo para sistema e ambiente

Sistema e ambiente constituem um sistema fechado para o qual a equação de Schrödinger se aplica. O Hamiltoniano total para sistema e ambiente é dado por

$$H_{tot} = H + H_{int} + H_{banho}, \quad (3.1)$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema, H_{banho} o Hamiltoniano do ambiente ou "banho de calor" e H_{int} descreve a interação entre sistema e ambiente, e o ambiente consiste de infinitos graus de liberdade. A dinâmica de um sistema quântico aberto [1, 15, 38] consiste de um banho de osciladores linearmente acoplados ao sistema tal que o Hamiltoniano total é dado por

$$H_{tot} = H + H_{int} + H_{banho} = H + \sum_{\lambda} (g_{\lambda}^* L a_{\lambda}^{\dagger} + g_{\lambda} L^{\dagger} a_{\lambda}) + \hbar \sum_{\lambda} \omega_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}. \quad (3.2)$$

Por simplicidade escolhemos a constante de Planck $\hbar = 1$, o índice λ enumera os osciladores do banho, a_{λ} e $a_{\lambda}^{\dagger}$ são os usuais operadores destruição e criação, respectivamente,

com a propriedade $[a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda\lambda'}$. O sistema Hamiltoniano H e seu operador acoplamento L ao ambiente pode ser arbitrário tal como a constante de acoplamento ao oscilador g_λ e frequências ω_λ . Os somatórios estendem-se sobre todos os graus de liberdade do ambiente λ , e embora a teoria seja válida para qualquer um deles, a soma será em geral substituída por uma integral sobre um contínuo de osciladores ambientais. Em aplicações de óptica quântica, o ambiente é o campo de luz quantizado tal como um banho de osciladores harmônicos [15, 39].

A Eq.(3.2) também abrange o caso de um acoplamento auto adjunto, onde $L = L^\dagger$, onde $L = L^\dagger = q$, o operador posição. Entretanto, muda-se para uma representação de interação com respeito ao hamiltoniano do banho livre, que conduz a fases $e^{\pm i\omega_\lambda t}$, acompanhado no banho, operadores criação e destruição,

$$H_{tot}(t) = e^{iH_{banho}t} H_{tot} e^{-iH_{banho}t} = H + \sum_{\lambda} (g_{\lambda}^* L a_{\lambda}^{\dagger} e^{i\omega_{\lambda}t} + g_{\lambda} L^{\dagger} a_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda}t}). \quad (3.3)$$

O termo de estado inicial ambiental, permanece inalterado sob esta transformação. Além disso, assume-se um estado inicial não correlacionado do sistema e ambiente, do mesmo modo que, o operador densidade reduzido do sistema permanece inalterado devido a propriedade cíclica do traço sobre os graus de liberdade ambiental.

É instrutivo escrever o hamiltoniano acima (3.3) como

$$H_{tot}(t) = H + (LB^{\dagger}(t) + L^{\dagger}B(t)) \quad (3.4)$$

com o operador acoplamento do banho

$$B(t) = \sum_{\lambda} g_{\lambda} a_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda}t}. \quad (3.5)$$

Fazendo o papel de um operador "força", $B(t)$ codifica as propriedades do banho e sua influência na dinâmica do sistema. Para sua função correlação que é definida ser $\alpha(t-s) = \langle (B(t) + B^{\dagger}(t))(B(s) + B^{\dagger}(s)) \rangle$, encontra-se um termo de estado inicial do banho na temperatura T a expressão padrão [1, 38]

$$\alpha(t-s) = \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 \left(\cot \left(\frac{\hbar\omega_{\lambda}}{2k_B T} \right) \cos(\omega_{\lambda}(t-s)) - i \operatorname{sen}(\omega_{\lambda}(t-s)) \right) \quad (3.6)$$

que irá desempenhar o papel central para uma representação estocástica do sistema dinâmico. Na temperatura zero, temos

$$\alpha_{T=0}(t-s) = \langle (B(t)B^{\dagger}(s)) \rangle_{T=0} = \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 e^{-i\omega_{\lambda}(t-s)}. \quad (3.7)$$

3.2 Na temperatura zero

Por simplicidade, a primeira derivação da equação de Schrödinger estocástica para a dinâmica de sistemas abertos é baseada na temperatura zero do banho, assim o estado puro

inicial do sistema e ambiente é escolhido ser

$$|\Psi_0\rangle = |\psi_0\rangle |0_1\rangle |0_2\rangle |0_3\rangle \dots |0_\lambda\rangle \dots, \quad (3.8)$$

com um estado arbitrário do sistema $|\psi_0\rangle$ e todos osciladores do ambiente em seus estados fundamentais $|0_\lambda\rangle$.

Na temperatura zero, a estocasticidade no sistema é de origem quântica (ruído quântico), isto é, são flutuações devido ao princípio da incerteza de Heisenberg. Na temperatura finita, há ruído adicional "clássico", devido à incerteza (clássica) do estado inicial. O objetivo é a derivação de uma equação de Schrödinger estocástica no espaço de Hilbert do sistema, partindo da equação de Schrödinger

$$i\partial_t |\Psi_t\rangle = H_{tot}(t) |\Psi_t\rangle \quad (3.9)$$

no mais largo espaço de Hilbert do sistema e ambiente. Para este fim, usa-se uma base de estado coerente para os graus de liberdade do ambiente [39, 40, 41, 42].

Utiliza-se os estados coerentes de Bargmann não normalizadas [43] $|z_\lambda\rangle = e^{z_\lambda a_\lambda^\dagger} |0_\lambda\rangle$ tal que

$$\mathbf{1} = \int \frac{d^2 z_\lambda}{\pi} e^{-|z_\lambda|^2} |z_\lambda\rangle \langle z_\lambda|, \quad (3.10)$$

onde $d^2 z_\lambda = d(\text{Re} z_\lambda) d(\text{Im} z_\lambda)$. O estado total em (3.9) é expandido com

$$|\Psi_t\rangle = \int \frac{d^2 z_\lambda}{\pi} e^{-|z_\lambda|^2} |\psi_t(z^*)\rangle |z\rangle, \quad (3.11)$$

com a notação abreviada $|z\rangle = |z_1\rangle |z_2\rangle \dots |z_\lambda\rangle \dots$ para todos os osciladores do ambiente e, $d^2 z = d^2 z_1 d^2 z_2 \dots d^2 z_\lambda \dots$, e $|z|^2 = \sum_\lambda |z_\lambda|^2$.

Uma forma independente do tempo $|z\rangle$ para o banho implica que a parte correspondente do sistema $|\psi_t(z^*)\rangle$ em (3.11) transporta toda a dependência do tempo do estado total $|\Psi_t\rangle$. Isso é relatado para o fato que, como definido, mesmo embora o estado inicial $\psi_{t=0}(z^*) = \psi_0$ é normalizado, a norma dos estados do sistemas $\psi_t(z^*)$ em (3.11) não permanecem iguais a unidade sob evolução temporal. Estados coerentes não são ortogonais, mas satisfazem $\langle z|z'\rangle = e^{(z^* z')}$. Ainda, pode-se expressar os estados do sistema como $\psi_t(z^*) = \langle z|\Psi_t\rangle$ da (3.11), interagindo sobre os graus de liberdade do ambiente. Assim, $\psi_t(z^*)$ é analítico $z^* = (z_1^*, z_2^*, \dots, z_\lambda^*, \dots)$.

Com a expansão (3.11) para o estado total, a equação de Schrödinger (3.9) leva a evolução da equação para os estados do sistema $\psi_t(z^*)$ relativo ao estado coerente do ambiente $|z\rangle$, no qual são usadas as propriedades de (Bargmann) estados coerentes: $\langle z|a_\lambda^\dagger = z_\lambda^* \langle z|$ e $\langle z|a_\lambda = \frac{\partial}{\partial z_\lambda^*} \langle z|$. Podemos usar a relação $\psi_t(z^*) = \langle z|\Psi_t\rangle$ e substituir na equação de Schrödinger (3.9), para obter as relações do termo do lado direito da equação abaixo

$$\langle z|i\partial_t|\Psi_t\rangle = \langle z|H_{tot}|\Psi_t\rangle \quad (3.12)$$

$$\langle z | \left(H + \sum_{\lambda} \left(g_{\lambda}^* L a_{\lambda}^{\dagger} e^{i\omega_{\lambda} t} + g_{\lambda} L^{\dagger} a_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda} t} \right) \right) | \Psi_t \rangle,$$

onde agora devemos fazer as distribuições de $\langle z |$ e $| \Psi_t \rangle$ no termo do lado direito como,

$$\langle z | H | \Psi_t \rangle + \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* \langle z | L a_{\lambda}^{\dagger} e^{i\omega_{\lambda} t} | \Psi_t \rangle + \sum_{\lambda} g_{\lambda} \langle z | L^{\dagger} a_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda} t} | \Psi_t \rangle,$$

ou simplesmente

$$H \psi_t(z^*) + L \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* \langle z | a_{\lambda}^{\dagger} e^{i\omega_{\lambda} t} | \Psi_t \rangle + L^{\dagger} \sum_{\lambda} g_{\lambda} \langle z | a_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda} t} | \Psi_t \rangle,$$

e com isso usar as propriedades de estados coerentes, já mostrados anteriormente para simplificarmos o termo

$$\begin{aligned} H \psi_t(z^*) + L \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* z_{\lambda}^* \langle z | e^{i\omega_{\lambda} t} | \Psi_t \rangle + L^{\dagger} \sum_{\lambda} g_{\lambda} \frac{\partial}{\partial z_{\lambda}^*} \langle z | e^{-i\omega_{\lambda} t} | \Psi_t \rangle, \\ H \psi_t(z^*) + L \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* z_{\lambda}^* e^{i\omega_{\lambda} t} \langle z | \Psi_t \rangle + L^{\dagger} \sum_{\lambda} g_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda} t} \frac{\partial}{\partial z_{\lambda}^*} \langle z | \Psi_t \rangle, \\ H \psi_t(z^*) + L \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* z_{\lambda}^* e^{i\omega_{\lambda} t} \psi_t(z^*) + L^{\dagger} \sum_{\lambda} g_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda} t} \frac{\partial}{\partial z_{\lambda}^*} \psi_t(z^*). \end{aligned}$$

Como temos $i\partial_t \langle z | \Psi_t \rangle = i\partial_t \psi_t(z^*)$ que é o lado esquerdo da Eq.(3.12), então igualamos com o termo acima para reescrevermos como,

$$\partial_t \psi_t(z^*) = \frac{1}{i} H \psi_t(z^*) + \frac{1}{i} L \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* z_{\lambda}^* e^{i\omega_{\lambda} t} \psi_t(z^*) + \frac{1}{i} L^{\dagger} \sum_{\lambda} g_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda} t} \frac{\partial}{\partial z_{\lambda}^*} \psi_t(z^*),$$

onde agora multiplicamos ambos os membros da equação acima por i^2 para obtermos [44, 45]

$$\begin{aligned} i^2 \partial_t \psi_t(z^*) &= iH \psi_t(z^*) + iL \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* z_{\lambda}^* e^{i\omega_{\lambda} t} \psi_t(z^*) + iL^{\dagger} \sum_{\lambda} g_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda} t} \frac{\partial}{\partial z_{\lambda}^*} \psi_t(z^*), \\ \partial_t \psi_t(z^*) &= -iH \psi_t(z^*) - iL \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* z_{\lambda}^* e^{i\omega_{\lambda} t} \psi_t(z^*) - iL^{\dagger} \sum_{\lambda} g_{\lambda} e^{-i\omega_{\lambda} t} \frac{\partial}{\partial z_{\lambda}^*} \psi_t(z^*). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Na primeira das duas contribuições ambientais em (3.13), os rótulos de estados coerentes $z_{\lambda}^* = (x_{\lambda} + iy_{\lambda})/\sqrt{2}$, aparecem como combinação

$$z_t^* \equiv -i \sum_{\lambda} g_{\lambda}^* z_{\lambda}^* e^{i\omega_{\lambda} t}, \quad (3.14)$$

que é um número complexo (dependente do tempo), e $(x_{\lambda}, y_{\lambda})$ são números reais com distribuições gaussianas com média zero e desvio um. O número complexo z terá mais tarde, o papel de um processo clássico estocástico conduzindo à equação de Schrödinger estocástica. Assim, o primeiro termo ambiental em (3.13) descreve uma 'força' externa clássica

complexa, enquanto o termo adjunto introduz a derivada $\frac{\partial}{\partial z_\lambda^*}$ e descreverá dissipação. Além disso este termo é responsável pela influência do sistema na dinâmica ambiental.

Da derivação microscópica, é claro que o processo z_t^* depende do *complexo conjugado* de rótulos de estados coerentes z_λ^* . Isto é devido a soma sobre todos os osciladores do ambiente (3.14) como o complexo conjugado de um processo estocástico z_t . Seria mais cômodo definir (3.14) z_t como ele próprio, sem conjugação complexa, um ponto de vista que tem sido adotado em alguns dos artigos originais [46, 47, 48]. Portanto, para se manter em linha com o ponto de vista microscópico, chama-se (3.14) de o complexo conjugado de um processo z_t .

Para a derivada em (3.13), o próximo passo é mudar de z_λ^* do estado $\psi_t(z^*)$ para um z_t^* de (3.14) fazendo o uso de uma regra da cadeia funcional $\frac{\partial}{\partial z_\lambda^*} = \int ds \frac{\partial z_s^*}{\partial z_\lambda^*} \frac{\delta}{\delta z_s^*}$. Então fazendo a substituição da regra da cadeia, da relação (3.14) em (3.13), obtemos

$$\begin{aligned} \partial_t \psi_t(z^*) &= -iH\psi_t(z^*) + Lz_t^* \psi_t(z^*) - iL^\dagger \sum_\lambda g_\lambda e^{-i\omega_\lambda t} \int ds \frac{\partial z_s^*}{\partial z_\lambda^*} \frac{\delta}{\delta z_s^*} \psi_t(z^*), \\ &= -iH\psi_t(z^*) + Lz_t^* \psi_t(z^*) - L^\dagger \int ds \ i \sum_\lambda g_\lambda e^{-i\omega_\lambda t} \frac{\partial z_s^*}{\partial z_\lambda^*} \frac{\delta \psi_t(z^*)}{\delta z_s^*}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Para melhorarmos a forma da Eq.(3.15), fizemos algumas modificações de termos, logo usamos a igualdade

$$\alpha(t-s) = i \sum_\lambda g_\lambda e^{-i\omega_\lambda t} \frac{\partial z_s^*}{\partial z_\lambda^*}, \quad (3.16)$$

e o termo diferencial da Eq.(3.16) sendo

$$\frac{\partial z_s^*}{\partial z_\lambda^*} = -i \sum_\lambda g_\lambda^* e^{i\omega_\lambda s}. \quad (3.17)$$

O integrando é obtido fazendo a substituição de (3.17) em (3.16),

$$\begin{aligned} \alpha(t-s) &= (i \sum_\lambda g_\lambda e^{-i\omega_\lambda t}) \cdot (-i \sum_\lambda g_\lambda^* e^{i\omega_\lambda s}), \\ &= \sum_\lambda g_\lambda g_\lambda^* e^{-i\omega_\lambda(t-s)}, \\ &= \sum_\lambda |g_\lambda|^2 e^{-i\omega_\lambda(t-s)}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

que é a função de correlação do banho (3.7), na temperatura zero.

Retomando com a Eq.(3.15), já que temos a função de correlação (3.18), obtemos então

$$\partial_t \psi_t(z^*) = -iH\psi_t(z^*) + Lz_t^* \psi_t(z^*) - L^\dagger \int_0^t ds \ \alpha(t-s) \frac{\delta \psi_t(z^*)}{\delta z_s^*},$$

ou simplesmente

$$\hbar \left| \frac{\partial}{\partial t} \psi_t \right\rangle = -iH' |\psi_t\rangle + Lz_t^* |\psi_t\rangle - L^\dagger \int_0^t ds \alpha(t-s) \frac{\delta |\psi_t\rangle}{\delta z_s^*}, \quad (3.19)$$

com os limites de integração obtidos a partir da condição inicial e causalidade, e H' sendo uma correção que será mostrada posteriormente. A Eq. (3.19) foi estabelecida em [45] e é apenas uma representação particular da equação de Schrödinger (3.9) para sistema e ambiente. Como explanado na próxima seção, z_t^* poderá ser visto como um processo estocástico e assim (3.19) torna-se de fato uma equação de Schrödinger estocástica no espaço do sistema aberto. As vezes essa terminologia é amplamente utilizada e referida para as soluções $\psi_t(z^*)$ da equação de Schrödinger estocástica como *trajetórias quânticas* [13].

3.3 Equação estocástica de Schrödinger

Foi mostrada a equação (3.19) para todos vetores $z = (z_1, z_2, \dots, z_\lambda, \dots)$, ou equivalentemente, todos os processos z_t^* de (3.14), mas gostaríamos de fato resolver a equação de Schrödinger para sistema e ambiente através da representação do estado total (3.11). Pode-se esperar, portanto, a capacidade de escolher um finito, 'típico' conjunto de vetores $z = (z_1, z_2, \dots, z_\lambda, \dots)$ tal que o correspondente conjunto finito de estados do sistema $\psi_t(z^*)$ dá uma justa representação da dinâmica emaranhada do sistema e ambiente.

Para encontrar o estado coerente ambiental $|z\rangle$, ou equivalentemente, o mais relevante vetor z entrando na equação de evolução para os estados $\psi_t(z^*)$ do sistema aberto, determina-se o operador de densidade reduzida $\rho_t = Tr_{\text{banho}} |\Psi_t\rangle \langle \Psi_t|$ do sistema a partir de (3.14)

$$\rho_t = \int \frac{d^2 z}{\pi} e^{-|z|^2} |\psi_t(z^*)\rangle \langle \psi_t(z^*)|. \quad (3.20)$$

Aparentemente, a dinâmica do sistema aberto codificado por ρ_t pode ser determinado de uma integração sobre os vetores z com o peso Gaussiano $e^{-|z|^2}$. Esta quantidade soluciona a equação de Schrödinger (3.19) para os estados do sistema $\psi_t(z^*)$ com muitas realizações do *processo estocástico* Gaussiano z_t definido através de (3.14), tal que ρ_t é recuperado como um conjunto médio

$$M(\dots) \equiv \int \frac{d^2 z}{\pi} e^{-|z|^2} (\dots), \quad (3.21)$$

sobre estas realizações:

$$\rho_t = M(|\psi_t(z^*)\rangle \langle \psi_t(z^*)|). \quad (3.22)$$

A estatística do processo Gaussiano complexo z_t é facilmente encontrada de (3.14) e (3.21) como

$$M(z_t) = 0, \quad M(z_t z_s^*) = \alpha(t-s) \quad \text{e} \quad M(z_t z_s) = 0. \quad (3.23)$$

Assim o operador de densidade reduzido do sistema quântico aberto é recuperado como um conjunto de estados do sistema estocástico puro $\psi_t(z^*)$ - *trajetórias quânticas* - obtidas como soluções da equação estocástica de Schrödinger não Markoviana (3.19), sem qualquer aproximação. A relação fundamental (3.22) é muitas vezes referida como a representação de um desenrolar da dinâmica do operador densidade [13]. O processo de condução z_t é um processo Gaussiano complexo com média zero e correlações (3.23). O surgimento do processo estocástico z_t e sua função correlação $M(z_t z_s^*) = \alpha(t-s) = \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 e^{-i\omega_{\lambda}(t-s)}$, onde $M[\cdot]$ denota a média conjunto sobre a condução clássica do ruído.

As muitas realizações para resolver a equação de Schrödinger estocástica são feitas sobre os números distribuídos normalmente $(x_{\lambda}, y_{\lambda})$ já mostrados anteriormente. Usando a teoria de perturbação no sistema de forças de auto acoplamento, a derivada funcional da Eq.(3.19), pode ser escrita na aproximação de primeira ordem como uma função linear de $|\psi_t\rangle$ [49]

$$\frac{\delta |\psi_t\rangle}{\delta z_s^*} = O(t, s, z^*) |\psi_t\rangle \approx e^{-iH(t-s)} L e^{iH(t-s)} |\psi_t\rangle. \quad (3.24)$$

Durante as simulações, é usada aproximação de primeira ordem com o operador sistema, $L = L^{\dagger} = q$, que é o operador posição do sistema. Usando (3.24), a equação de Schrödinger estocástica torna-se

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle = -iH' |\psi_t\rangle + q z_t^* |\psi_t\rangle - q \int_0^t ds \alpha(t-s) e^{-iH'(t-s)} q e^{iH'(t-s)} |\psi_t\rangle. \quad (3.25)$$

Nas equações (3.19) e (3.25), o Hamiltoniano $H' = H(q, p) + q^2 A(t)$, contém um termo de potencial adicional que revela-se ser contrabalançado por um termo similar decorrente da integral de memória [48]. Usando $|\psi_t\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle$, $H |\phi_n\rangle = \epsilon |\phi_n\rangle$, $q = \sum_{n,m} q_{nm} |\phi_n\rangle \langle \phi_m|$, e condição ortonormal $\langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$, Eq.(3.25) transforma-se em [32]

$$\hbar \dot{c}_n = -i\epsilon c_n(t) - iA(t) \sum_{mm'} q_{nm} q_{mm'} c_{m'}(t) + z_t^* \sum_m q_{nm} c_m(t) - \sum_{m,m'} q_{nm'} \bar{O}_{mm'}(t) c_{m'}(t), \quad (3.26)$$

com

$$\bar{O}_{mm'}(t) = \langle \phi_m | \bar{O}(t) | \phi_{m'} \rangle = q_{mm'} \sum_{\lambda} |g_{\lambda}|^2 \frac{e^{-i[\omega_{\lambda} + (\epsilon_m - \epsilon_{m'})]t} - 1}{-i[\omega_{\lambda} + (\epsilon_m - \epsilon_{m'})]}, \quad (3.27)$$

$$\bar{O}(t) = \int_0^t ds \alpha(t-s) e^{-iH(t-s)} q e^{iH(t-s)} \quad (3.28)$$

e

$$A(t) = \sum_{\lambda} \frac{|g_{\lambda}|^2}{\omega_{\lambda}} (\cos \omega_{\lambda} t - 1). \quad (3.29)$$

Chamamos a atenção que o operador $\bar{O}(t)$ é a integral de memória. Onde N é finito, sempre esperamos alguns efeitos de memória e, neste sentido, um comportamento não-Markoviano.

O valor esperado da energia é dada por

$$\langle E \rangle = \langle \psi_t | H | \psi_t \rangle = \sum_n c_n^*(t) c_n(t) \epsilon_n, \quad (3.30)$$

enquanto o valor esperado para a posição é dado por

$$\langle q \rangle = \langle \psi_t | q | \psi_t \rangle = \sum_{n,m} c_n^*(t) c_m(t) q_{nm}. \quad (3.31)$$

Agora a equação de Schrödinger estocástica acoplada para um banho com um número finito de HOs, Eq.(3.26) será implementada para calcular estas e outras quantidades observáveis do sistema nos potenciais harmônico e catraca.

Capítulo 4

Resultados

4.1 Potencial harmônico

Nesta seção é discutido o caso de uma partícula no potencial harmônico, acoplado a um banho discreto de N HOs com frequências ω_λ distribuídas no intervalo $(0.1, 1.0)$. Estas frequências são escolhidas aleatoriamente usando uma sub-rotina em Fortran, mas uma vez escolhidas, elas são mantidas fixas durante as simulações, mesmo para diferentes realizações do banho. Nesta aproximação, devido ao número finito de HOs no banho, o espectro de densidade é determinado numericamente e é sempre estruturado para baixos valores de N (ver Ref.[50] para mais detalhes no caso clássico). As propriedades do banho dependem da distribuição de frequências dos N HOs [50].

O gerador de frequências é escolhido tal que no limite $N \rightarrow \infty$ temos três distribuições contínuas distintas: banho ôhmico, sub-ôhmico e super-ôhmico. Cada oscilador terá um par distinto (x_λ, y_λ) , números escolhidos aleatoriamente com média zero e desvio um. Para cada coeficiente c_n da Eq.(3.26), consideramos condições iniciais retangulares: $c_n(0) = 1 + 0.i$. Consideramos os 10 primeiros níveis de energia, com energias iguais a da Eq.(2.89). Usamos a frequência do sistema $\Omega = 1.0$, $\hbar = 1.0$ e a energia do estado fundamental igual a 0.5.

Assim nosso estado inicial é dado por

$$|\psi_0\rangle = \sum_{n=1}^{10} |\phi_n\rangle, \quad (4.1)$$

que é uma superposição coerente de todos os 10 estados $|\phi_n\rangle$. A fim de obter o decaimento de energia como uma função do tempo e a média da posição como uma função do número de osciladores no banho, Eq.(3.26) é integrada usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem [51] e os valores de $c_n(t)$ são introduzidos na Eq.(3.30) e (3.31). Na primeira parte desta seção, as frequências dos osciladores harmônicos do banho seguem uma distribuição quadrática, fazendo o espectro de densidade como uma função linear $J(\omega \leq \omega_{cut}) \propto \omega$ para

um número muito grande de osciladores. Para tornar a comparação mais fácil, a constante de acoplamento ao oscilador de cada oscilador no banho são iguais a $g_\lambda = 0.01/\sqrt{N}$. Este acoplamento efetivo é necessário tal que o efeito do ambiente sobre o HO converge quando N se torna grande [52].

4.1.1 A energia do sistema

Na Fig. 4.1 a evolução temporal da energia média $\langle E \rangle$, Eq.(3.30), é mostrada para um banho contendo um oscilador com a frequência $\omega = 0,398$ e para 500 condições iniciais (pares (x_λ, y_λ) para z_λ^* da Eq. (3.14)). Na Fig. 4.1 a média da posição $\langle q \rangle$ da Eq.(3.31) é também apresentada. Pode-se ver claramente que, além da pequena amplitude das oscilações rápidas no tempo $t_{\text{rápido}} = 2\pi/\Delta\omega_+ \sim 4,5$, para tempos $t_d = t_{\text{lento}}/2 = \pi/\Delta\omega_- \sim 5,2$ o sistema perde em torno de 6% de sua energia inicial para o banho, mas é capaz de recuperar isto no tempo $t_R = t_{\text{lento}} \sim 10,5$. Esta troca de energia entre sistema e ambiente vai se repetir, com frequência em torno de $\Delta\omega_- \sim 0,61$.

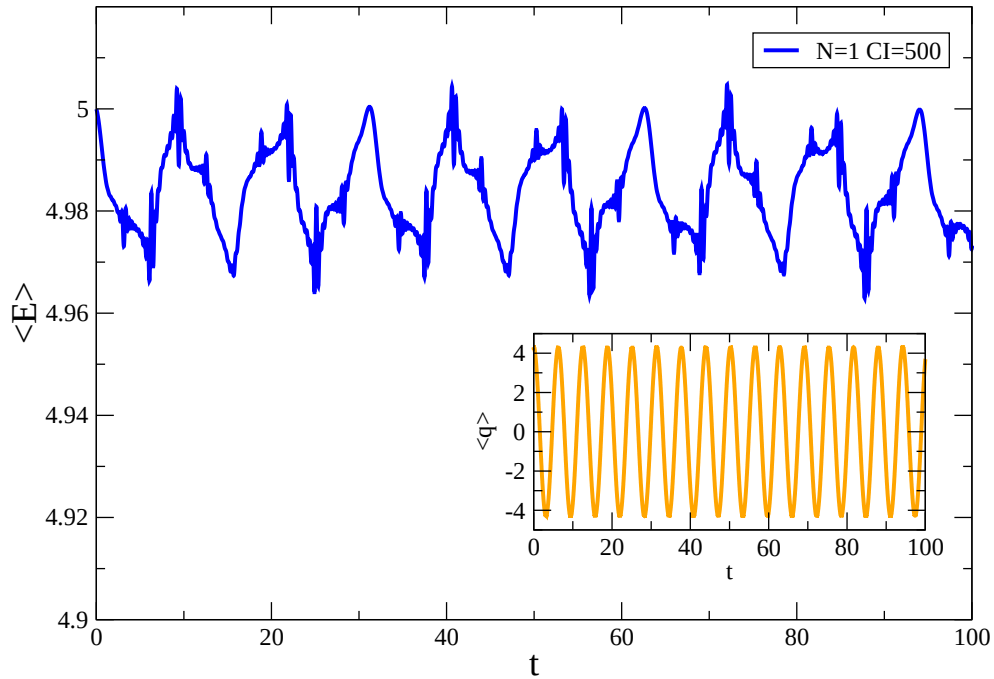


Figura 4.1: A média da energia do sistema, Eq.(3.30), para um oscilador no banho, acoplado com a constante de acoplamento ao sistema $g = 0.01\sqrt{N}$ e a posição média correspondente, Eq.(3.31)

A energia média sobre o tempo de retorno (onde a energia transferida para o banho retorna para o sistema) é quase constante. Os tempos de retorno da energia dependem da frequência do oscilador de banho. A dependência do tempo da energia foi também con-

firmado pela evolução da média da posição: o sistema oscila simetricamente muito rápido em torno do centro $\langle q \rangle = 0$, com uma amplitude que segue quase o padrão do decaimento de energia. A saber, o mínimo da energia corresponde ao mínimo da maior amplitude do oscilador no sistema.

Na Fig. 4.2 é mostrado a evolução individual do tempo dos 10 níveis de energia do potencial harmônico para o mesmo banho usado na Fig. 4.1. Os números de energias são denotados pelo número quântico n , ou seja, a curva denotada por $n = 1$ mostra a evolução temporal da probabilidade do estado fundamental, $|c_1|^2$, com $n = 2$ denota os valores da probabilidade do segundo nível de energia, $|c_2|^2$, e assim por diante. Pode ser verificado claramente que, enquanto os baixos estados permanecem com fracas oscilações, os altos níveis de energia oscilam seguindo as trocas de energias observadas na Fig. 4.1.

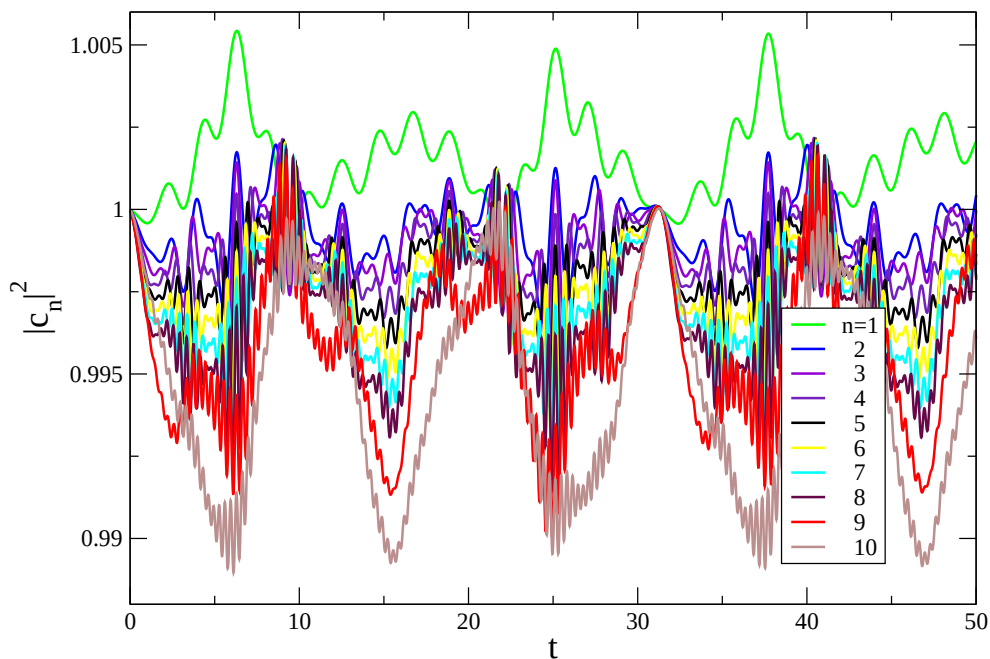


Figura 4.2: A evolução temporal das probabilidades $|c_n|^2$ dos 10 estados do sistema acoplado com um HO do banho.

Na Fig. 4.3 é mostrado o decaimento de energia para um banho de $N = 10$ HOs, com frequências entre 0.1 e 1.0, mantendo a frequência do primeiro HO do caso anterior ($N = 1$) e escolhendo mais nove frequências. O limite de tempo estudado aqui é ($t_{max} = 100$), e pode ser visto claramente que a energia do sistema voltará para o sistema mas não será recuperado inteiramente, tal que o tempo médio da energia do sistema não é mais constante. Entretanto, esperamos que algum tempo depois $t > t_{max}$ a energia retornará inteiramente para o sistema, uma vez que é um sistema finito. O comportamento qualitativo na taxa do decaimento de energia muda para diferentes intervalos de tempo.

É mostrado por símbolos o melhor ajuste do decaimento de energia, isto é, um ajuste

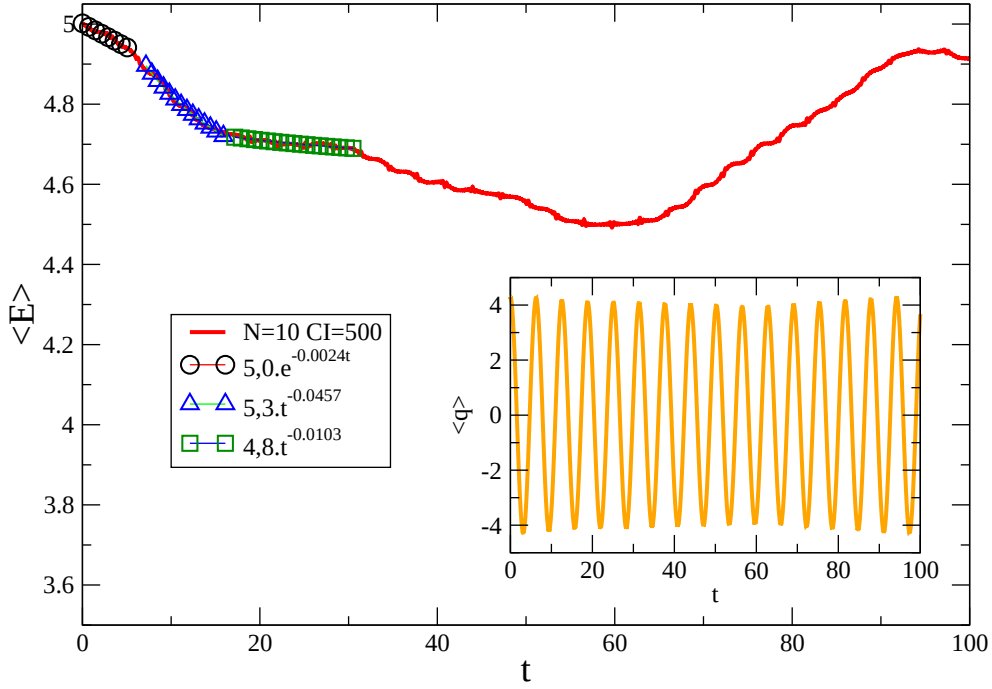


Figura 4.3: O decaimento da energia média, Eq.(3.30), para um banho com 10 HOs e a média da posição, Eq.(3.31). Exibimos os melhores ajustes com símbolos.

exponencial (círculos na figura), com o expoente $\alpha = 0.0019$, para tempos curtos, seguidos para tempos maiores por dois ajustes de tipo leis de potências, com os expoentes $\beta = 0.0457$ (triângulos na figura) e $\beta' = 0.038$ (quadrados na figura), respectivamente. Dizemos que a mudança qualitativa da exponencial para o decaimento da lei de potência, ocorre para tempos próximos $t_{\alpha \rightarrow \beta}$. Na Fig. 4.3 representamos também a correspondente média da posição.

A evolução temporal das probabilidades $|c_n|^2$ para todos os 10 níveis de energias do sistema com $N = 10$ HOs acoplados do banho, é exibido na Fig. 4.4. Como na Fig. 4.2, $n = 1$ mostra a probabilidade para baixos níveis de energia, $|c_1|^2$, $n = 2$ corresponde ao segundo nível e assim por diante. Novamente, fica claro que altos níveis de energias decaem mais rapidamente: quanto maior o nível, maior é o decaimento.

Na Fig. 4.5, mostramos o decaimento da energia média e a média da posição para $N = 50$ osciladores do banho acoplados ao sistema, sendo 10 frequências do caso anterior mais 40 novas frequências. Na Fig. 4.5, é observado que o sistema tem um comportamento dissipativo para tempos consideráveis, com um decaimento exponencial, $\langle E \rangle \propto \exp(-0.0027t)$ para $0 < t \leq 5$. Observa-se também os decaimentos com a lei de potência, com $\langle E \rangle \propto t^{-0.3472}$ para tempos intermediários $40 < t < 60$ e $\langle E \rangle \propto t^{-0.40}$ e para largos tempos, $t > 70$. Os melhores ajustes são representados por símbolos na figura. Nesta mesma figura observa-se também que o sistema não alcança mais as posições mais afastadas da origem.

Em relação a evolução em tempo das probabilidades $|c_n|^2$ de todos os 10 níveis de energia

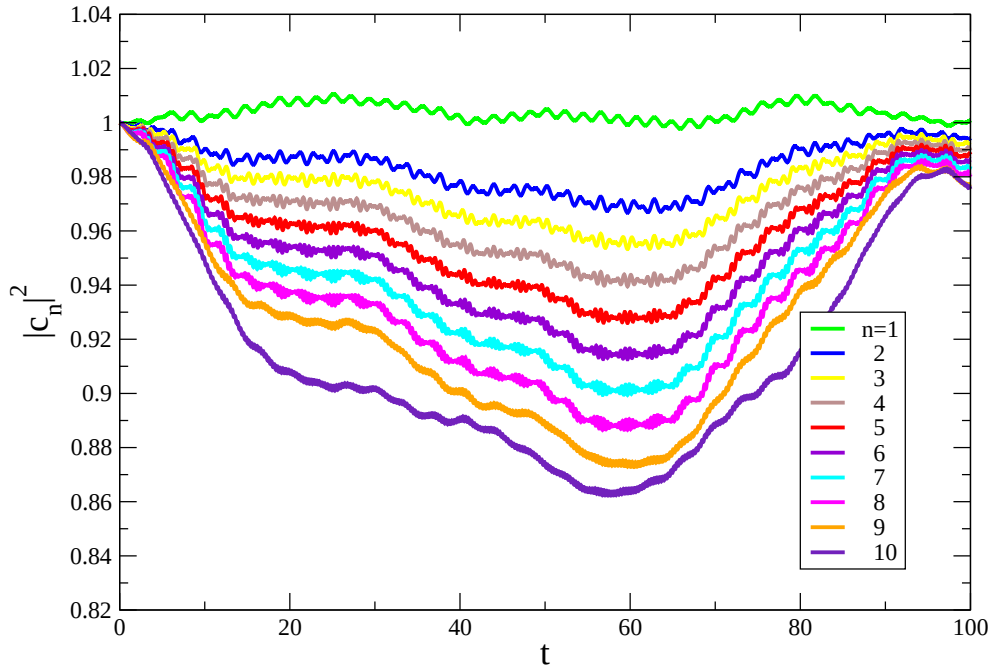


Figura 4.4: A evolução temporal das probabilidades $|c_n|^2$ dos 10 estados do sistema acoplado para um banho contendo $N = 10$ HOs.

na Fig. 4.6, podemos observar que o comportamento em estados de energias mais baixas, não possuem um decaimento tão acentuado quanto nos níveis mais altos. Para altos valores de n , é observado um decaimento mais rápido de $|c_n|^2$ do que nos casos anteriores.

Tais tipos de comportamentos (exponencial seguido por duas leis de potência) são encontrados também para $N = 100$. Na Fig. 4.7, resumimos os resultados do decaimento de energia para $N = 1, 10, 20, 50$ e 100 HOs. A primeira observação é que as energias decaem mais rapidamente para N grande. Para todos os valores de N , observamos um decaimento exponencial para tempos curtos, e para $10 \leq N \leq 100$ na região dos tempos intermediários e largos o decaimento é de tipo lei de potência. A figura mostra uma transição entre um regime quase conservativo, encontrado para valores pequenos de N (com $N < 20$), onde a energia perdida do sistema voltará ao sistema depois de um certo tempo, para um regime completamente dissipativo ($N \geq 50$), onde para o tempo considerado a energia somente decai.

Detalhes do decaimento exponencial e das leis de potência serão discutidos mais adiante, na seção 4.1.4. Quando N aumenta o primeiro decaimento de tipo lei de potência fica mais evidente e o segundo decaimento torna-se mais pronunciado e maior. Notavelmente, o comportamento para N pequeno é mapeado pela curva de N maior: por exemplo o expoente α do comportamento de tipo exponencial nos tempos curtos é quase sempre o mesmo para todos $N \geq 10$. Para $N \geq 50$ observa-se decaimentos muito parecido para todos os valores de tempo.

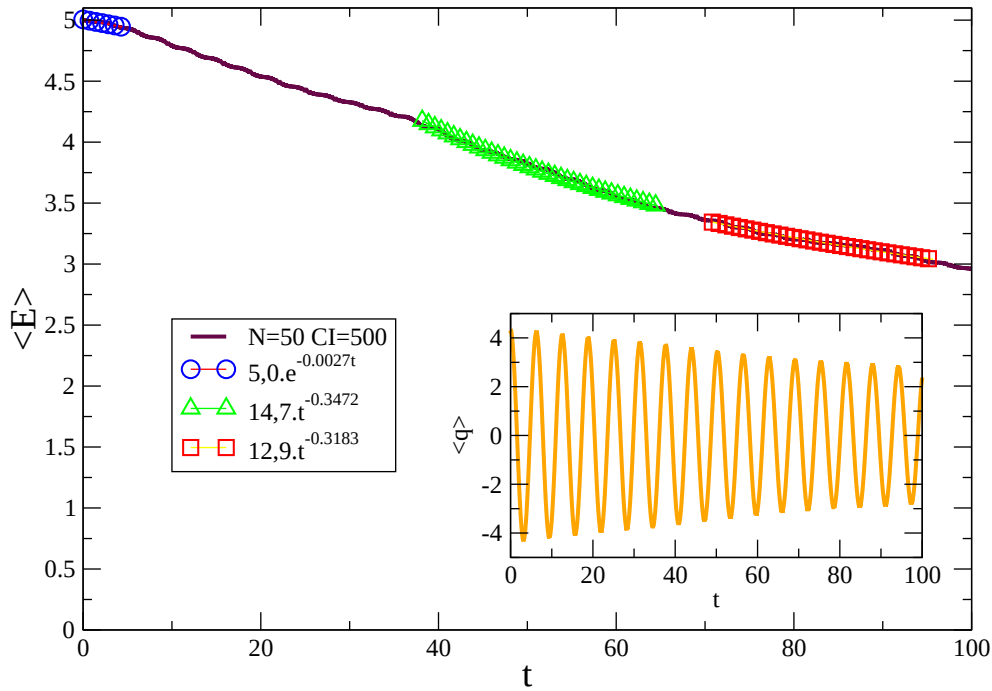


Figura 4.5: O decaimento da energia média, para um banho com 50 HOs acoplados no sistema e a média da posição.

4.1.2 Pureza

É possível analisar também a pureza $P(t) = \text{Tr}_c [\rho_s^2(t)]$, uma quantidade que mede a decoerência no sistema onde $\rho_s(t) = \overline{|\psi_t\rangle\langle\psi_t|}$ é a matriz de densidade reduzida. No estado coerente inicial, a matriz $\rho_s(0)$ tem 10 termos diagonais e 10 termos não diagonais. Os termos não diagonais caracterizam a decoerência quântica. Uma decoerência total acontece quando todos os termos não diagonais desaparecem e neste caso a pureza é $P(t) = 1/10 \sim 0.1$. Na Fig. 4.8 mostramos a evolução temporal da pureza para os mesmos parâmetros mostrados na Fig. 4.7. Para $N = 1$ a pureza diminui e cresce no tempo, mas com variações muito pequenas. Para $10 \leq N \leq 100$ encontramos um regime transitório observado para a energia: um decaimento exponencial e duas leis de potência seguida por acréscimo da pureza (para valores de N intermediários). Para todos os valores de N não é observada uma decoerência total.

4.1.3 Dinâmica no espaço de fases

A dinâmica no espaço de fases é mostrado na Fig. 4.9 para uma realização do banho e para diferentes valores de N . Para $N = 1$ a evolução do tempo ocorre sobre um círculo com uma pequena largura. Quando N cresce, este círculo começa a se parecer com um anel com largura maior. Em $t = 0$ a partícula começa do lado externo do círculo. Com o passar

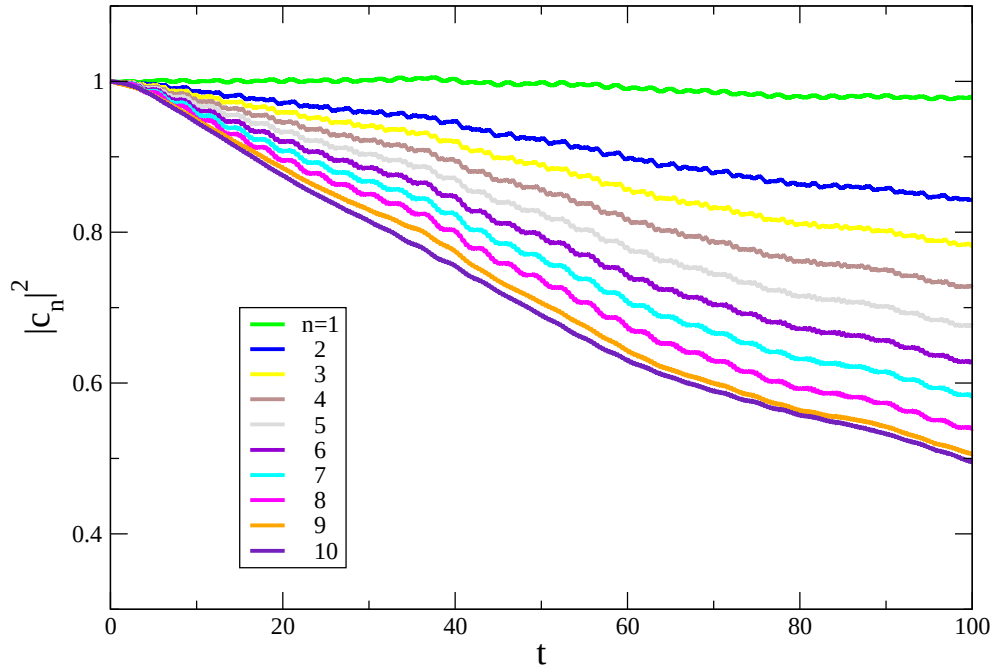


Figura 4.6: A evolução temporal das probabilidades $|c_n|^2$ para um banho contendo com $N = 50$ HOs.

do tempo, parte de sua energia é transferida para o banho movendo-se em direção ao lado interno do círculo. Uma vez que existe contínua troca de energia entre sistema e banho, esperamos que a partícula se mova continuamente entre o lado interno e externo do círculo. A partícula não perde mais energia aumentando o número de osciladores no banho. Isso é devido ao fato que o total da constante de acoplamento dos osciladores é em todos os casos a mesma, $g_\lambda = 0.01\sqrt{N}$.

Resumindo, o comportamento geral observado para a energia em principal a pureza é que, para tempos curtos $t \leq t_{disc} \approx 10$ (obtido das simulações) o decaimento exponencial é independente de N pois o sistema não teve tempo para enxergar a descontinuidade do banho. O sistema se comporta como um banho contínuo. Depois disso, para tempos $t \geq t_{disc}$, a descontinuidade do banho é reconhecida pelo sistema e a dependência de N torna-se visível. Para pequenos valores de N , a descontinuidade faz a energia tender a retornar para o sistema. Esse retorno ainda obedece um comportamento exponencial. Assim, para pequenos valores de N a distinguibilidade do banho induz somente o retorno da energia para o sistema. Para valores intermediários de N , o efeito de retorno da energia para o sistema é reduzido e aparece um decaimento de tipo lei de potência. Para N grande, a densidade espectral das frequências do banho tende para um contínuo, mas com a lei de potência decaindo, ao contrário da exponencial.

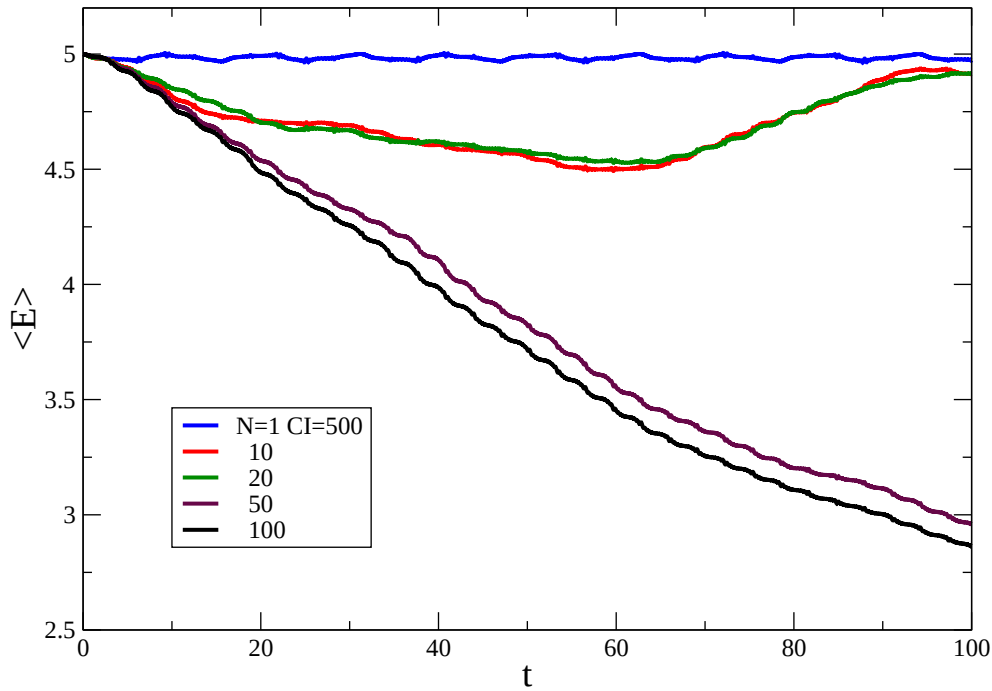


Figura 4.7: O decaimento da energia média para um banho com $N = 1, 10, 20, 50$ e 100 HOs.

4.1.4 Banhos ôhmicos, sub-ôhmicos e super-ôhmicos

Agora retornamos nossa atenção para outros tipos de distribuições, consideramos o caso para o qual a densidade espectral de frequências tem a forma $J(\omega) = \omega^s$, com $0 \leq s \leq 2$ [1]. Se $s = 1$ a distribuição de frequência quadrática do banho ôhmico é recuperada. Para $s \leq 1$ temos o banho sub-ôhmico, onde baixas frequências no domínio escolhido possuem uma grande contribuição. Para $s \geq 1$ temos o caso super-ôhmico, onde altas frequências aparecem mais frequentemente.

Na Fig. 4.10 temos os expoentes α para decaimento exponencial da energia para tempos menores em todos os três tipos de banho: ôhmico ($s = 1$), sub-ôhmico (com $s = 0.1$) e super-ôhmico (com $s = 1.9$). Pode-se notar pequenas diferenças entre os tipos de banho para N pequeno; as diferenças ficando maiores para N grande. Imediatamente aparente é que também há pequena diferença entre os N do mesmo tipo de banho, para todos os três tipos de banhos. Em geral, as diferenças entre os expoentes dos três tipos de banhos são menores do que 10^{-3} ordens de grandeza.

Os expoentes do decaimento de energia β pela lei de potência na região para tempos maiores, podem ser observados na Fig. 4.11, para os mesmos tipos de banho. Diferentes do que os expoentes do comportamento exponencial, notamos diferenças da ordem de máximo 0.2 nos expoentes dos diferentes tipos de banho. Notamos um acréscimo significativo de β quando N cresce.

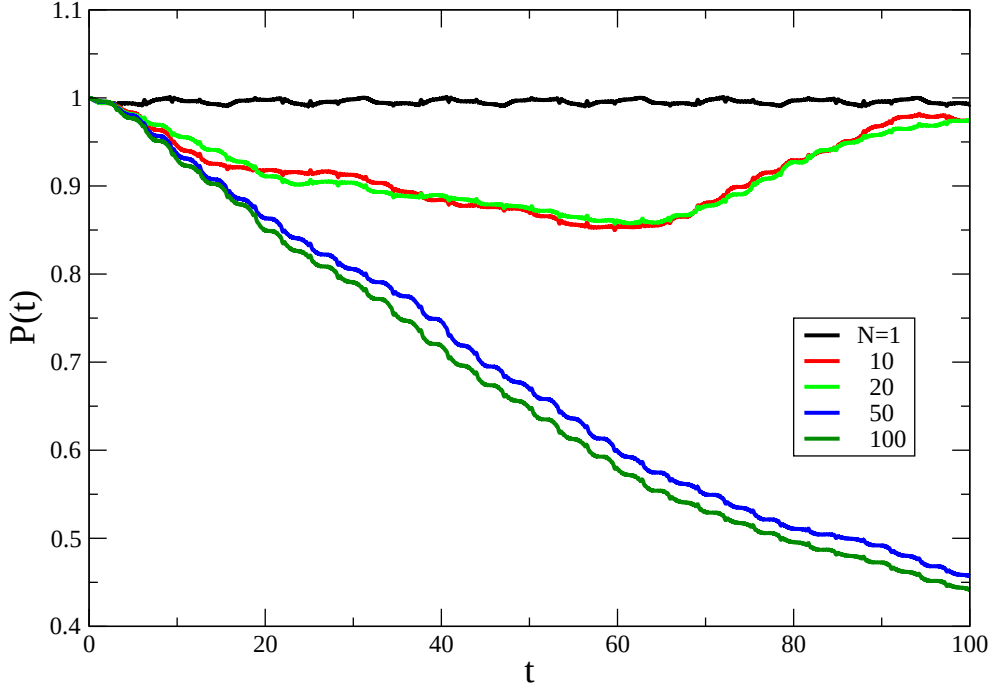


Figura 4.8: A pureza para um banho com $N = 1, 10, 20, 50$ e 100 HOs.

4.2 Potencial de catraca

É considerado o problema composto pela partícula sob a influência de um potencial periódico assimétrico do tipo catraca (sistema) interagindo com N osciladores harmônicos independentes (ambiente) [50]. O potencial de catracas é dado por [53]

$$V(X) = V_1 - V_0 \sin 2\pi \frac{(X - X_0)}{A} - \frac{V_0}{4} \sin 4\pi \frac{(X - X_0)}{A}, \quad (4.2)$$

onde A é a periodicidade do potencial, V_0 é a amplitude, e V_1 é uma constante arbitrária. O potencial é deslocado por uma quantidade X_0 a fim de localizar um mínimo do potencial de catraca na origem.

A Eq.(4.2) pode ser reescrita como

$$V(X) = C - \frac{1}{4\pi^2\delta} (\sin \alpha \pi (X - X_0) + 0,33 \sin 2\alpha \pi (X - X_0)), \quad (4.3)$$

onde nas simulações escolhemos a constante $C \sim 48,935$, tal que $V_0 = 0$, $X_0 \sim -2,16$, $\alpha = 1/6$ e $\delta = 0,0006$. A determinação dos níveis de energia e as funções de estado que solucionam a equação de Schrödinger para uma partícula em um potencial assimétrico, se faz através do algoritmo numérico Numerov [54]. O método de Numerov é um método numérico para solucionar equações diferenciais ordinárias de segunda ordem no qual o termo de primeira ordem não aparece. O método é implícito, mas pode ser feito se a equação é linear. O método de Numerov foi desenvolvido por Boris Vasil'evich Numerov e uma breve apresentação do método encontra-se no Apêndice A.

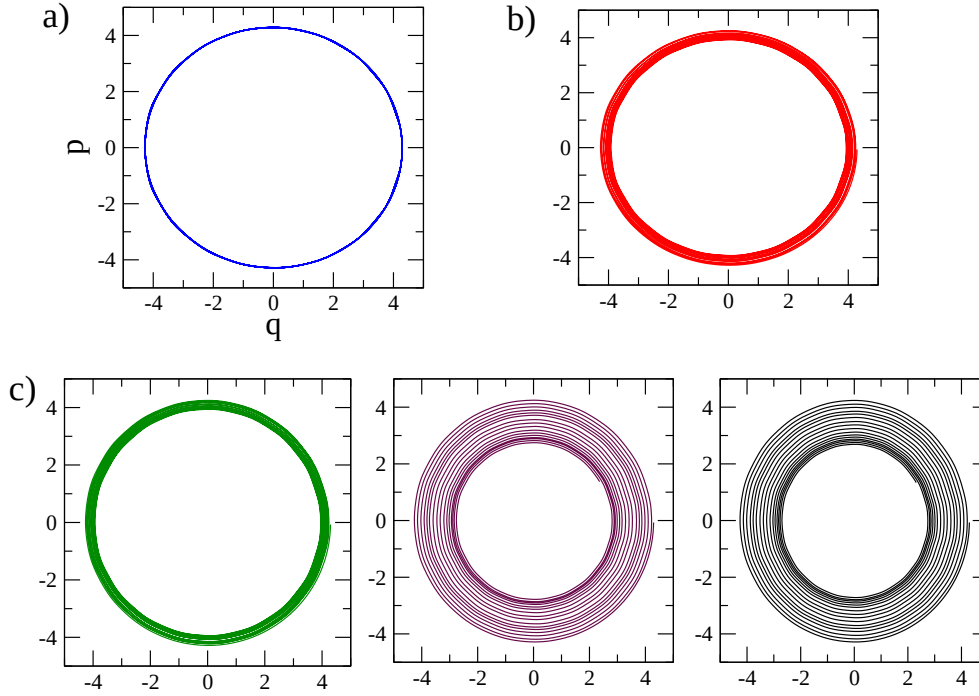


Figura 4.9: Dinâmica no espaço de fases para $N = 1, 10, 20, 50$ e 100 HOs (da esquerda para a direita e de cima para baixo).

Nas simulações usamos como condições iniciais para os coeficientes c_n , um pacote de ondas Gaussiano na forma $\phi(r) = C \exp - \frac{(r-24)^2}{\sigma^2}$, onde $\sigma = 3$ e C é a constante de normalização. Assim, teremos um pacote de ondas com um pico de energia no nível 24, localizado no meio do espectro de energia, correspondente aos valores de 64.15 à 83.05, descritas por linhas horizontais de cor preta na Fig. 4.12. Todos os níveis de energia podem ser vistos nesta figura. Aqui, os coeficientes c_n tem a forma Gaussiana acima e cumprem a condição $\sum_n |c_n|^2(0) = 1$. Podemos observar o primeiro caso, como sendo o sistema acoplado com apenas um único oscilador, $N = 1$, na Fig. 4.13, com 500 condições iniciais (x_λ, y_λ) . Nesta figura, conseguimos observar no decaimento da energia média $\langle E \rangle$, uma certa periodicidade, em relação as trocas de energias entre o sistema e ambiente. O sistema vai perder energia para o banho e depois de um tempo $t \approx 22$ a energia volta no sistema. Nesta mesma figura, é mostrado a média da posição $\langle q \rangle$ correspondente ao mesmo banho, que acompanhará a assimetria do potencial.

Na Fig. 4.14 é mostrado a evolução temporal para os 9 níveis de energias intermediários, do potencial de catraca para o mesmo banho usado na Fig. 4.13. Os níveis de energias são denotados pelo número quântico n , ou seja, a curva denotada por $n = 20$ mostra a evolução temporal da probabilidade do nível 20, $|c_{20}|^2$, com $n = 21$ denotando os valores da probabilidade do vigésimo primeiro nível de energia, $|c_{21}|^2$, e assim por diante. Mostramos apenas os níveis intermediários que estão entre 20 e 28, pois são os níveis de energia que compreendem a região central do pacote de ondas gaussiana considerada, ou seja, são aqueles níveis que

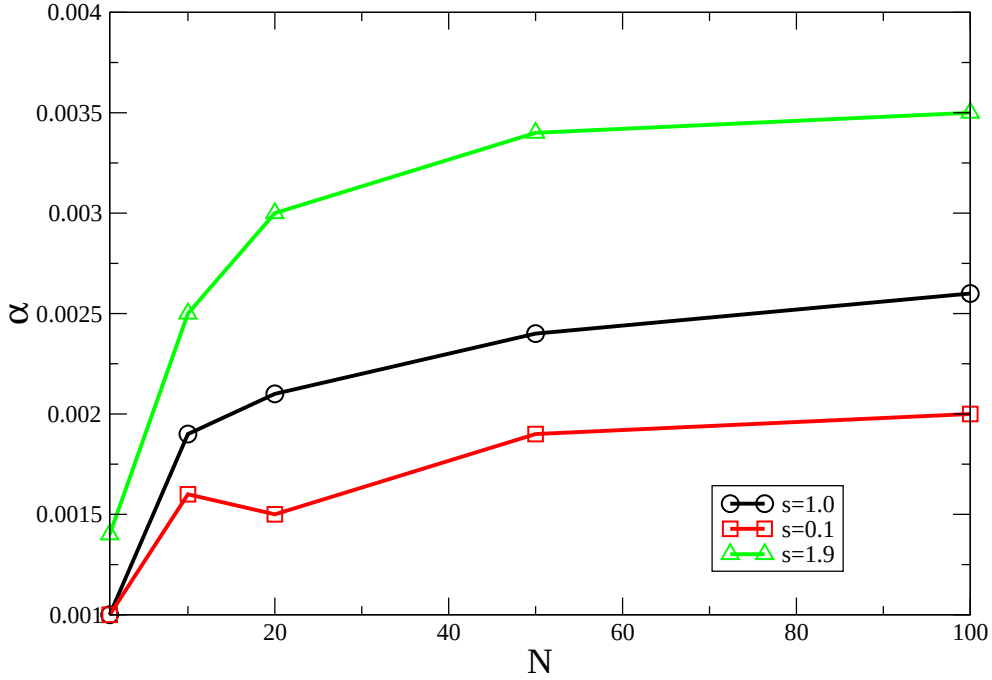


Figura 4.10: Ajustes exponenciais, α , do decaimento de energia em regiões de baixos valores de tempo, para banhos ôhmicos, sub-ôhmicos e super-ôhmicos como uma função de N .

têm valores diferentes de zero no tempo $t = 0$. O nível 24 tem o valor máximo, por ser o centro do pacote de ondas, seguido pelos valores dos níveis 23 e 25 e depois os níveis 22 e 26. Mostramos com símbolos os níveis superiores a 24, para distinguí-los de níveis inferiores. Observamos que todos os níveis apresentam um comportamento oscilante, que acompanha o decaimento de energia da figura anterior.

Acrescentando osciladores no banho, como pode ser visto na Fig. 4.15, temos o caso para o sistema acoplado com $N = 10$ HOs. Nesta figura, observamos as curvas do decaimento da energia média e posição, com algumas oscilações que ocorrem na curva da energia, provavelmente devido ao número de condições iniciais serem um pouco baixas, neste caso temos 520. É observado o sistema em comportamento quase conservativo, situação parecida com o caso de potencial harmônico para o mesmo N . O sistema perde energia para o banho, mas recupera novamente depois de $t \approx 22$, observando-se um decaimento exponencial, $\langle E \rangle \propto \exp(-0.0002t)$ para tempos pequenos $0 \leq t \leq 1.8$. Observa-se também os decaimentos com lei de potência, $\langle E \rangle \propto t^{-0.001}$ para tempos intermediários $2.7 \leq t \leq 5.7$ e $\langle E \rangle \propto t^{-0.002}$ para grandes tempos, $t > 6$.

Em relação a evolução temporal das probabilidades $|c_n|^2$ dos 9 níveis intermediários de energia, Fig. 4.16, podemos observar que as probabilidades em estados de energias são semelhantes ao mesmo comportamento do caso anterior. Para $n = 24$, é observado o maior valor da probabilidade de encontrar a partícula, com $|c_{24}|^2 = 0.26$. Isto é devido ao fato de ser a região central do pacote de ondas, compreendido entre aqueles 9 níveis de energias

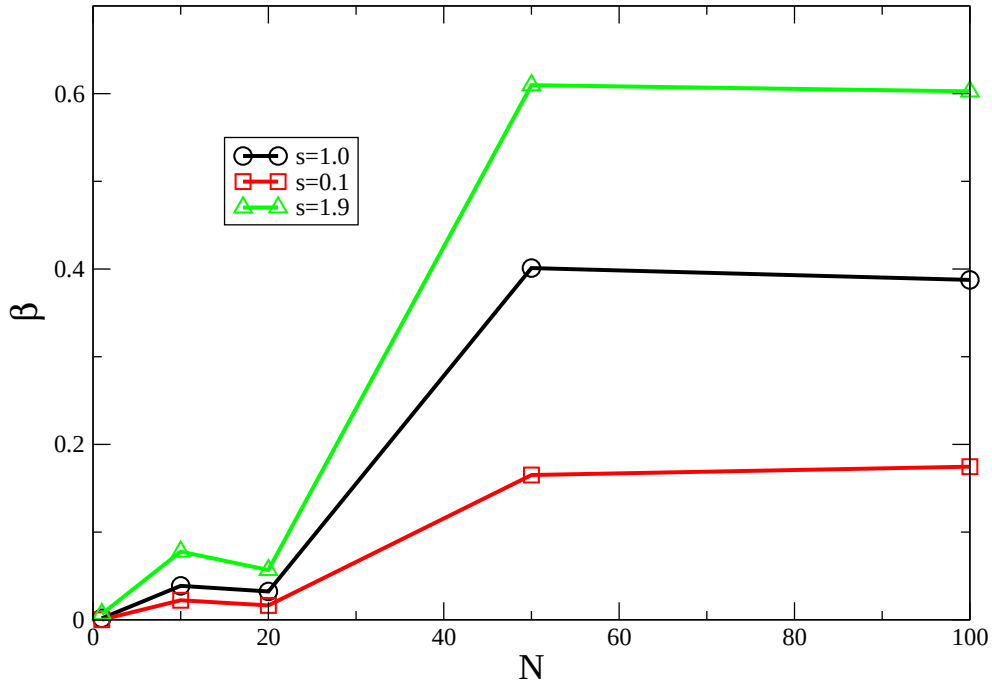


Figura 4.11: Ajustes da lei de potência, β , do decaimento de energia em regiões de altos valores de tempo, para banhos ôhmicos, sub-ôhmicos e super-ôhmicos como uma função de N .

considerados a ser diferentes de zero no tempo inicial.

Considerando os dois casos anteriores $N = 1$ e $N = 10$, e acrescentando mais 40 HOs no banho teremos $N = 50$ HOs. Representamos todas as curvas em um mesmo gráfico para efeitos de comparação, como pode ser observado na Fig. 4.17. É considerado uma distribuição quadrática no intervalo $(0.1, 1.0)$, onde para cada banho, uma vez escolhidas as frequências, elas são mantidas constantes. Para cada caso, varia-se somente x_λ e y_λ , que são números reais de distribuições com média zero e desvio um. Para as simulações, consideramos todos os níveis de energias do sistema, descrito por um pacote de onda de 35 níveis de energias, ε_n , correspondente a 35 funções de ondas, ϕ_n (e implicitamente os coeficientes c_n). Como já mencionado, as condições iniciais dos coeficientes c_n são considerados 0, exceto para os 9 níveis intermediários, compreendidos entre $n = 20$ e $n = 28$, que são as distribuições Gaussianas. Observamos para todos os valores de N um comportamento quase conservativo: a energia que o sistema perde vai voltar para o sistema aproximadamente no mesmo valor.

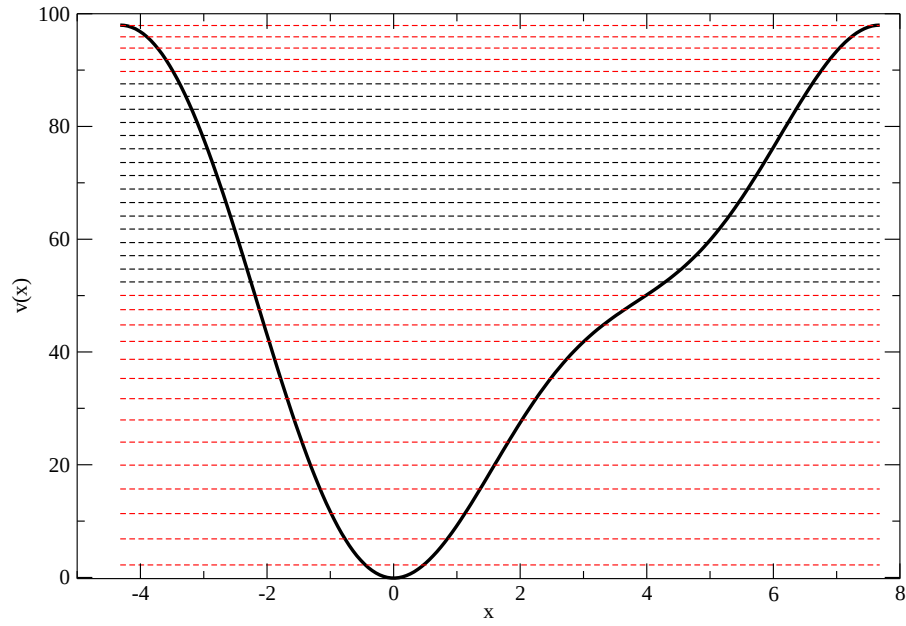


Figura 4.12: Os níveis de energia do potencial de catraca de uma partícula.

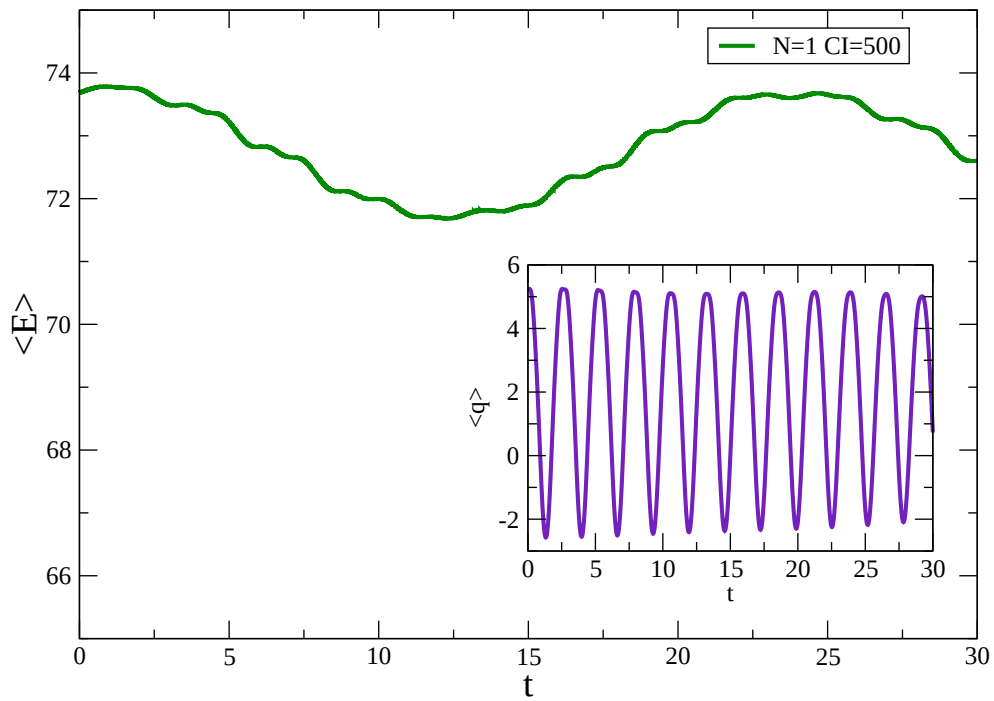


Figura 4.13: A energia média do sistema, Eq.(3.30), para um sistema acoplado a um HO com $g_\lambda = 0.01\sqrt{N}$. É mostrado também a média da posição correspondente.

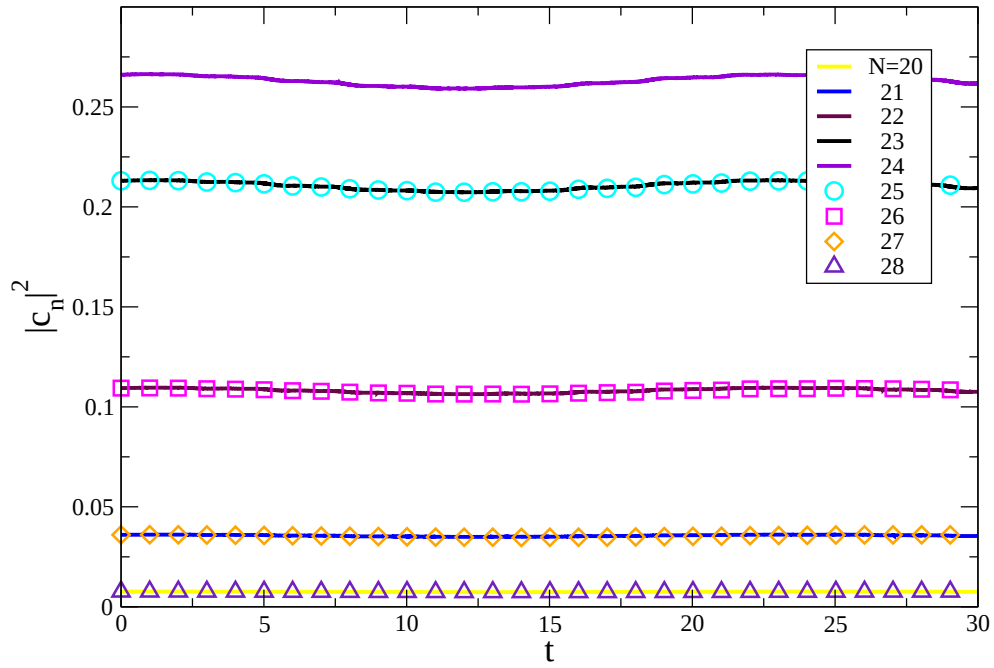


Figura 4.14: A evolução temporal das probabilidades $|c_n|^2$ dos 9 estados do sistema acoplado com um HO do banho.

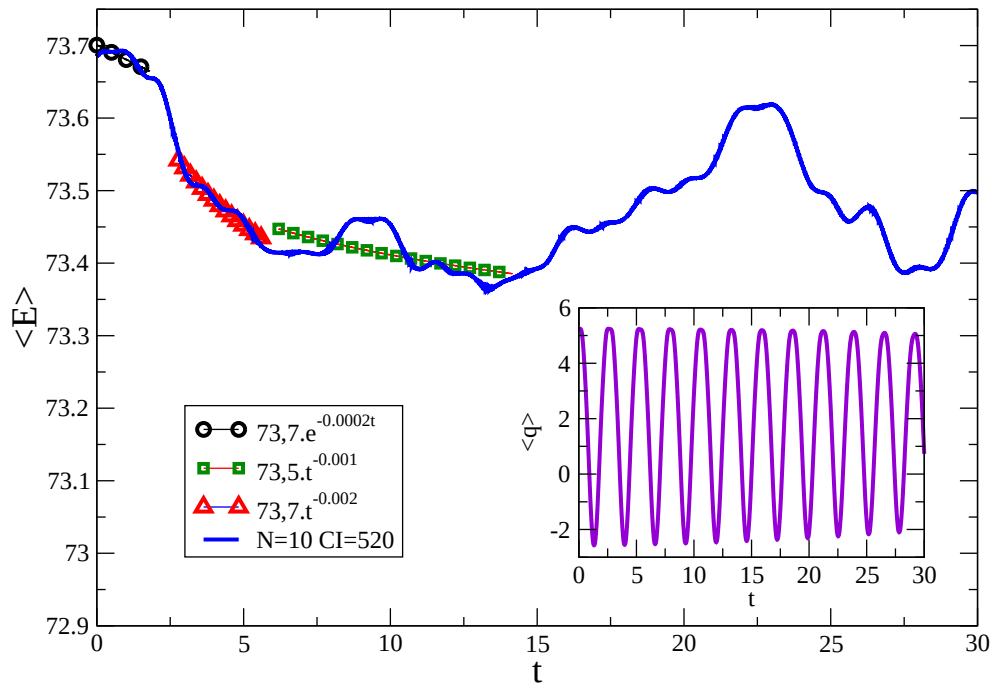


Figura 4.15: A energia média e posição do sistema para $N = 10$ HOs.

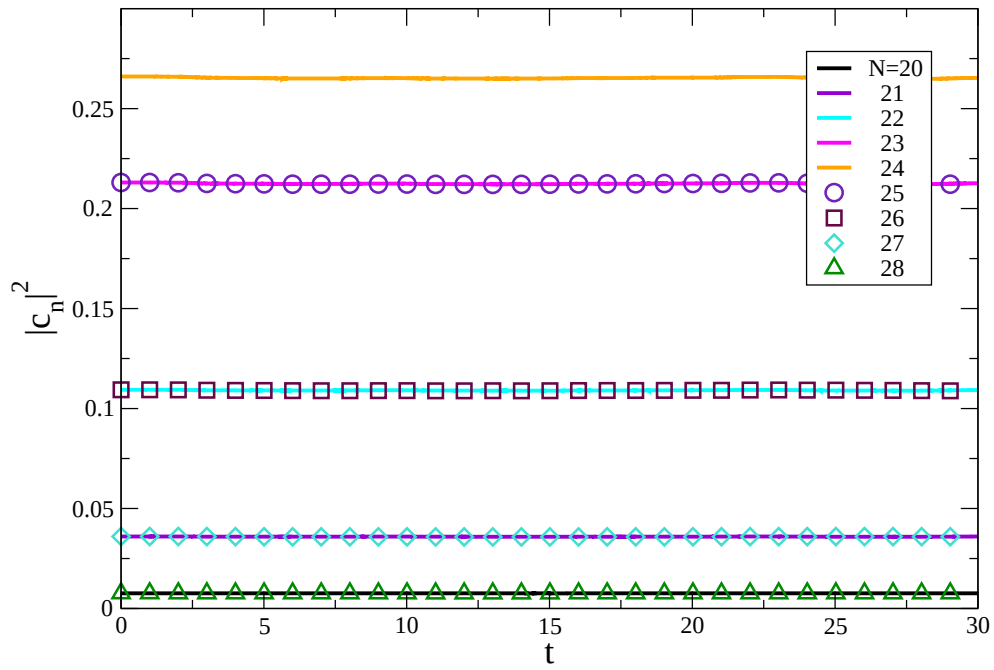


Figura 4.16: A evolução temporal das probabilidades $|c_n|^2$ dos 9 estados centrais do pacote onda para um sistema acoplado com $N = 10$ HOs.

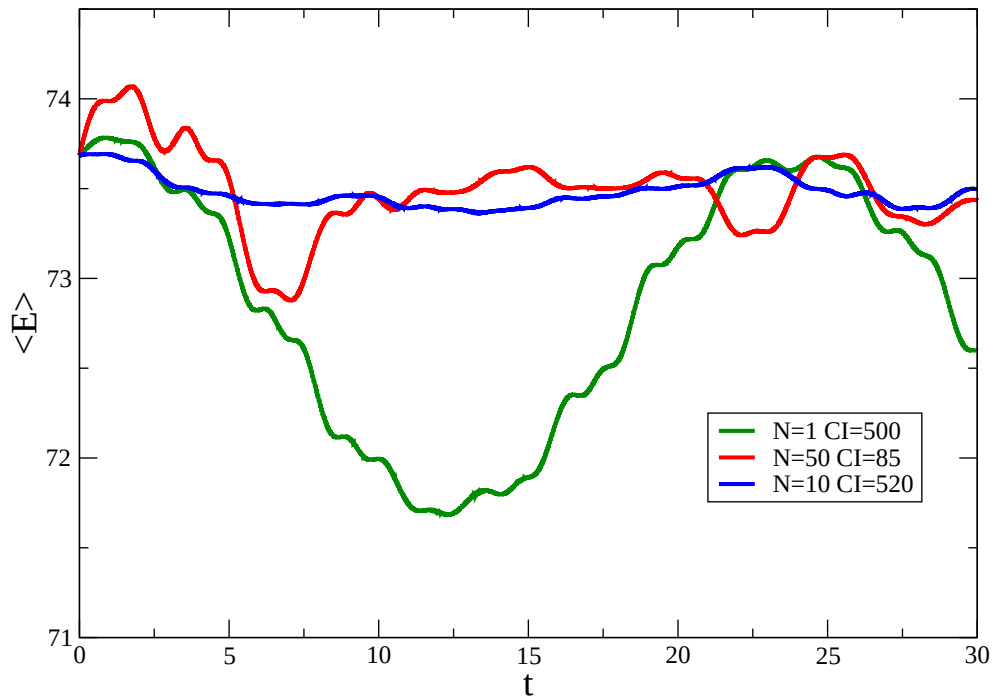


Figura 4.17: O decaimento de energia para o potencial de catraca, com números de HOs no banho sendo: $N = 1, 10$ e 50 .

Capítulo 5

Conclusões

De forma geral, o fato inevitável de que sistemas quânticos reais estão sempre em regime de interação com um ambiente externo, coloca a questão de quais são as consequências dessa interação para as propriedades efetivamente observáveis dos sistemas. Segundo a MQ, o tratamento do sistema quântico mais seu respectivo ambiente como um sistema autônomo com evolução temporal prevê imediatamente um processo dinâmico do sistema com o ambiente, com consequências para o que se possa chamar de estado de ambas as partes.

Em primeiro lugar, o ambiente não é em geral algo suficientemente bem definido, além de tipicamente complexo. Por essa razão adquirem relevância modelos tratáveis de ambiente, bem como análises que os caracterizem como genericamente adequados em determinadas situações. Particularmente relevante é ainda o fato de que o monitoramento do sistema quântico em consideração se dá através de variáveis dinâmicas que estejam diretamente envolvidas no processo de interação com o ambiente. A natureza das variáveis dinâmicas envolvidas nesse processo é portanto um ingrediente de suma importância para determinar os efeitos do ambiente sobre o estado do sistema quântico considerado.

Este trabalho foi concentrado na generalização não-Markoviana da equação de Schrödinger estocástica, na dinâmica de sistemas abertos. Determinamos a solução numérica desta equação para uma partícula acoplada a um banho com um número finito de HOs. Utilizando o método de Numerov [54], determinamos os níveis de energia e as funções de estado que solucionam a equação, para a partícula em um potencial de catraca. Por motivos de comparação, utilizamos o potencial harmônico, com os níveis de energia conhecidos analiticamente. Para o potencial harmônico temos o potencial simétrico, já para o potencial de catraca temos o potencial assimétrico.

O principal objetivo deste trabalho foi alcançado, pois mostramos as características gerais de um sistema acoplado com um banho contendo um número finito de HOs. Utilizamos a equação de Schrödinger estocástica a temperatura zero para o estudo do decaimento da

energia da parte do sistema, sob a influência dos potenciais. O sistema foi acoplado por um banho composto de um número finito de HOs. Para as discussões escolhemos, no limite $N \rightarrow \infty$, uma distribuição de banho ôhmico, mas também estudamos os casos de banhos sub-ôhmicos e super-ôhmicos. No caso de um potencial harmônico, com intensidade de acoplamento efetivo para o banho $g = 0.01/\sqrt{N}$, foi observado que números muito pequenos de N a energia é trocada de forma periódica com o banho.

Para valores intermediários de N como $10 \leq N \leq 20$, o tempo médio de energia do sistema começa a decair, transferindo parcialmente sua energia para o banho. Para estes valores de N , observamos um decaimento exponencial para pequenos valores de tempo, e dois decaimentos por lei de potência para tempos mais altos. Para valores relativamente altos de ($N \geq 50$), o mesmo decaimento exponencial foi observado e um maior comportamento do tipo lei de potência. Para o sistema situado no potencial de catraca, rende uma comparação fácil com o caso harmônico, onde usamos a mesma intensidade de acoplamento, g_λ , e as mesmas frequências do banho. Foi observado que para todos os valores de N consideráveis temos um comportamento quase conservativo, diferente do caso simétrico, onde para $N \geq 50$ temos um comportamento aparentemente dissipativo.

Apêndice A

Método de Numerov

O método de Numerov pode ser usado para solucionar equações diferenciais da forma

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + f(x) \right) y(x) = 0, \quad (\text{A.1})$$

onde a função y é calculada no intervalo $[a, b]$ em posições equidistantes x_n . Começando com valores das funções em duas amostras consecutivas x_{n-1} e x_n , os valores da função remanescente podem ser calculados como [54]

$$y_{n+1} = \frac{\left(2 - \frac{5h^2}{6} f_n \right) y_n - \left(1 + \frac{h^2}{12} f_{n-1} \right) y_{n-1}}{1 + \frac{h^2}{12} f_{n+1}}, \quad (\text{A.2})$$

onde $f_n = f(x_n)$ e $y_n = y(x_n)$ são os valores das funções nas posições x_n , e $h = x_n - x_{n-1}$ é a distância entre duas amostras consecutivas.

Para equações não lineares da forma

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = f(t, y) \quad (\text{A.3})$$

o método é dado por

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + \frac{1}{12} h^2 (f_{n+1} + 10f_n + f_{n-1}). \quad (\text{A.4})$$

Este é um método de várias etapas linear implícito, que reduz para o método explícito dado acima se a função f é linear em y , e alcança ordem 4.

Referências Bibliográficas

- [1] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, Singapore, 2012).
- [2] P. Ullesma, *Physica* (Utrecht) **32**, 27 (1966).
- [3] R. Zwanzig, *J. Stat. Phys.* **9**, 215 (1973).
- [4] E. Cortés, B. J. West e K. Lindenberg, *J. Chem. Phys.* **82**, 2708 (1985).
- [5] A. O. Caldeira e A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 211 (1981).
- [6] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, 2^a ed., (North-Holland, Amsterdam, 1992).
- [7] H. J. Carmichael, *Statistical Methods in Quantum Optics I*, (Springer, Berlim, 1999).
- [8] W. T. Strunz, L. Diósi, N. Gisin e T. Yu, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4909 (1999).
- [9] V. May e O. Kühn, *Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems* (Wiley-VCH, Berlin, 2000).
- [10] C. W. Gardiner, *Handbook of stochastic methods* (Springer, Berlim, 1985).
- [11] P. Langevin, *Comptes rendus.* **146**, 530 (1908).
- [12] H. Risken, *The Fokker-Planck equation*, 2^a ed., (Springer, Berlim, 1989).
- [13] H. J. Carmichael, *An open system approach to Quantum Optics*, (Springer, Berlim, 1994).
- [14] G. Lindblad, *Comm. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
- [15] C. W. Gardiner e P. Zoller, *Quantum Noise*, 2^a ed., (Springer, Berlim, 2000).
- [16] F. Haake, *Quantum Statistics in Optics and Solid State Physics*. (Springer, Berlin, 1973).
- [17] S. John e T. Quang, *Phys. Rev. A.* **50**, 1764 (1994).

- [18] S. John e T. Quang, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3419 (1995).
- [19] B. Garraway, *Phys. Rev. A* **55**, 2290 (1997).
- [20] B. Garraway, *Phys. Rev. A* **55**, 4636 (1997).
- [21] N. Vats e S. John, *Phys. Rev. A* **58**, 4168 (1998).
- [22] J. J. Hope, *Phys. Rev. A* **55**, 2531 (1997).
- [23] H. P. Breuer, B. Faller e F. Petruccione, *Phys. Rev. A* **59**, 1633 (1999).
- [24] G. M. Moy, J. J. Hope e C. M. Savage, *Phys. Rev. A* **59**, 667 (1999).
- [25] M. W. Jack, M. Naraschewski, M. J. Collett e D. F. Walls, *Phys. Rev. A* **59**, 2962 (1999).
- [26] H. M. Wiseman e G. J. Milburn, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 548 (1993).
- [27] H. M. Wiseman, *Phys. Rev. A* **49**, 2133 (1994).
- [28] A. C. Doherty e K. Jacobs, *Phys. Rev. A* **60**, 2700 (1999).
- [29] V. Giovannetti, P. Tombesi e D. Vitali, *Phys. Rev. A* **60**, 1549 (1999).
- [30] J. Wang, H. M. Wiseman e G. J. Milburn, *Chem. Phys.* **268**, 221 (2001).
- [31] W. H. Zurek, *Physics Today*, October, 36 (1991).
- [32] M. Galiceanu, M. W. beims e W. T. Strunz, *Physica A* **415**, 294 (2014).
- [33] P. A. M. Dirac, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 416 (1939).
- [34] J. J. Sakurai, *Mecânica Quântica Moderna*, 2nd ed. (Bookman, Porto Alegre, 2013)
- [35] S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, 1st ed. (Cambridge University Press, New York, 2013)
- [36] J. S. Townsend, *A Modern Approach to Quantum Mechanics*, 2nd ed. (Sausalito, CA: University Science Books, 2000).
- [37] M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maitre, A. Maali, C. Wunderlich, J. M. Raimond e S. Haroche. *Phys Rev Lett.* **77**, 4887 (1996).
- [38] R. P. Feynman, F. L. Vernon, *Ann. Phys.(NY)*, **24**, 118 (1963).
- [39] D. F. Walls e G. J. Milburn, *Quantum Optics*, 2nd ed. (Springer, Berlim, 1995).
- [40] R. J. Glauber, *Phys. Rev.* **131**, 2766 (1963).

- [41] J. Klauder e E. C. G. Sudarshan, *Fundamentals of quantum optics*, (W. A. Benjamim, New York), (1968).
- [42] J. Klauder e B. S. Skagerstam, *Coherent States*, (World Scientific, Singapore), (1985).
- [43] V. Bargmann, *Commun. Pure Appl. Math.* **14**, 187 (1961).
- [44] L. Diósi, *Quantum Semiclass. Opt.* **8**, 309 (1996).
- [45] L. Diósi e W. T. Strunz, *Phys. Lett. A.* **235**, 569 (1997).
- [46] L. Diósi, N. Gisin e W. T. Strunz, *Phys. Rev. A.* **58**, 1699 (1998).
- [47] W. T. Strunz, L. Diósi e N. Gisin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1801 (1999).
- [48] T. Yu, L. Diósi, N. Gisin e W. T. Strunz, *Phys. Rev. A.* **60**, 91 (1999).
- [49] I. de Vega, D. Alonso, P. Gaspard e W. T. Strunz, *J. Chem. Phys.* **122**, 124106 (2005).
- [50] J. Rosa e M. W. Beims, *Phys. Rev. E* **78**, 031126 (2008).
- [51] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery *Numerical Recipes in Fortran* (Cambridge University Press, USA, 1992)
- [52] M. A. Marchiori e M. A. M. de Aguiar *Phys. Rev. E* **83**, 061112 (2011)
- [53] J. L. Mateos, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 258 (2000).
- [54] J. L. M. Q. González and D. Thompson *Computers in Physics* **11**, 514 (1997).