Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos – IFSC

PROGRAMA UNIFICADO DE BOLSAS DE ESTUDO PARA ESTUDANTES DE GRADUAÇÃO

Relatório IC
Tunelamento Dissipativo Não-Local

Bolsista: Anderson Araujo de Oliveira Nº11371311
Orientador: Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa

Dezembro
2023

Conteúdo

1 Introdução

Este projeto planeja estudar o processo de tunelamento dissipativo não local[1], sendo um mecanismo de transferência de estados em redes lineares de osciladores dissipativos. Neste processo, o estado do oscilador em uma extremidade da rede é transferido para a outra extremidade, através da excitação virtual dos osciladores intermediários. Essa excitação virtual minimiza a exposição do estado aos reservatórios térmicos dos osciladores intermediários, minimizando assim o processo de decoerência de estados. A transferência de informação quântica, ou de estados quânticos, em redes de spins[2] ou de osciladores harmônicos, é uma questão central no campo da teoria da informação quântica[3].

No presente projeto, abordamos o processo de maximização da fidelidade da transferência de estados através dos modelos de Caldeira-Leggett[4] e Spin-Boson[5], iremos deduzir a equação de movimento para o modelo de Caldeira-Leggett, utilizando a formulação de Feynman. Esses modelos permitem o tratamento do tunelamento de uma partícula entre poços espacialmente distantes, mesmo que não ocorra o overlap direto entre suas funções de onda. O overlap ocorre indiretamente, através das funções de onda do data bus.

2 Objetivos

- Tratar o processo de tunelamento não-local de uma partícula, de um poço de potencial a outro poço distante, conectados por um terceiro poço, comprido, estreito e de energia maior que aquelas dos poços extremos.

- Superar as analogias feitas na Ref. [1] entre cavidade e poço, e excitação da cavidade e partícula, significa tratar o tunelamento de uma partícula entre poços distantes de forma mais realista, considerando as posições da partícula.

- Transpor o método apresentado [1, 6] em redes de osciladores para os modelos de Caldeira-Leggett e Spin-Boson.

3 Métodos

3.1 Integral de Trajetória

3.2 O Propagador

O propagador, também conhecido como função de Green dependente do tempo, é uma ferramenta fundamental da formulação de Feynman. Ele permite calcular a evolução de um sistema quântico entre dois instantes de tempo, t_0 e t, definido como solução

$$i\hbar\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t} = HU(t,t_0) \tag{1}$$

Onde $\hat{H}$ é a hamiltoniana do sistema. Dado o vetor de estado $|\psi(t_0)\rangle$ no instante inicial, o vetor de estado em função do tempo fica $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$. Se $\hat{H}$ não depende explicitamente do tempo, temos a representação formal $U(t,t_0) = exp\left(-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right)$. Sempre tomando $\hat{H}$ independente do tempo, podemos representar $\hat{U}$ em termos de um conjunto ortonormal completo de estados estacionários, ou seja, autoestados de $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, por

$$U(t) = \sum_{m,n} |\psi_m\rangle\,\langle\psi_m|\, e^{\frac{iht}{\hbar}}\,|\psi_n\rangle\,\langle\psi_n| \tag{2}$$

$$U(t) = \sum_{n} exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)|\psi_n\rangle\,\langle\psi_n| \tag{3}$$

Para definir o propagador, suponhamos agora que o sistema seja descrito no espaço de configurações pelas coordenadas $q = (q_1, q_2, \ldots, q_n)$, onde n é o número de graus de liberdade. Se o sistema está no ponto q_0 para $t = 0$, o que descrevemos pelo vetor de estado, a probabilidade de que esteja entre $|q\rangle$ e $|q + d\vec{q}\rangle$ no instante t é $P(q,t)d\vec{q} = |\langle q|\hat{U}(t,0)|q_0\rangle|^2 d\vec{q}$ essa equação representa uma amplitude de probabilidade para ir de um estado a outro. Onde:

$$K(q, q_0; t) = \langle q|\hat{U}(t,0)|q_0\rangle \tag{4}$$

Define o propagador de $(q_0, t = 0)$ a (q, t). A função de onda no espaço de configurações é $\langle q|\psi(t)\rangle = \psi(q, t)$ inserindo $I = \int \langle q|\hat{U}(t, 0)|q_0\rangle \psi(q_0, 0)dq_0$ na equação $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$, obtemos $\psi(q, t) = \int K(q, q_0; t)\psi(q_0, 0)dq_0$ o que justifica chamar K de função de Green dependente do tempo.

A representação espectral de K se obtém inserindo a equação $U(t, t_0) = exp\left(-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right)$ na equação $K(q, q_0; t) = \langle q|\hat{U}(t, 0)|q_0\rangle$:

$$K(q, q_0; t) = \sum_n \psi_n(q)\psi_n^*(q_0) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) \tag{5}$$

A partir de 5, podemos calcular o traço do operador usando a representação do espaço de configurações, que define outra função importante, a *função espectral*

$$Y(t) = \mathrm{Tr}\left(\hat{U}(t)\right) = \int K(\vec{q}, q_0; t)d\vec{q} = \sum_n N_n \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) \tag{6}$$

Onde N_n é a degenerescência do nível de energia E_n.

A manipulação formal que levou à Eq. 6 puramente simbólica, mas tem uma importante implicação para a mecânica estatística. Em geral, podemos supor que o espectro de energia do sistema é limitado inferiormente, ou seja, que existe um estado fundamental de energia mínima. Sob essa condição, a Eq. 6 é convergente para valores complexos de t com parte imaginária negativa. Em particular, para $t = -i\hbar\beta$, temos, $Y(-i\hbar\beta) = Z(\beta) = \sum_n N_n \exp(-\beta E_n)$. Se identificarmos $\beta = 1/(kT)$, onde k é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta, vemos que $Z(\beta)$ é a função de partição associada ao sistema quântico à temperatura T. Analogamente:

$$\frac{Tr[\hat{U}(-i\hbar\beta)]}{Z(\beta)} = \hat{\rho}(\beta) = \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)} \tag{7}$$

é o operador densidade associada ao ensemble canônico.

Quando a temperatura se aproxima de zero, a função de partição do sistema se torna igual à probabilidade de o sistema estar no estado fundamental. Nesse limite, o valor esperado termodinâmico de um operador $\hat{A}$ no estado fundamental é dado pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_0 | \hat{A} | \psi_0 \right\rangle &= \lim_{\beta \to \infty} \mathrm{Tr}[\hat{\rho}(\beta)\hat{A}] \\ &= \lim_{t \to -i\infty} \{\mathrm{Tr}[\hat{U}(t)\hat{A}]/Y(t)\}. \end{aligned} \tag{8}$$

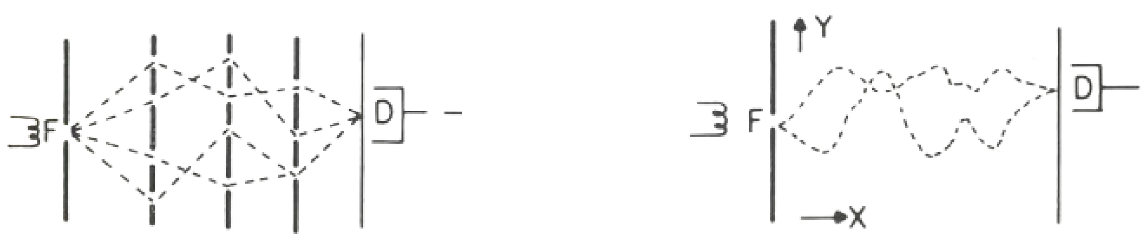
3.3 Formulação de Integrais de Trajetória

Uma maneira intuitiva de entender o conceito de integral de trajetória é considerar a seguinte experiência mental: uma partícula se propaga de uma fonte F até um detector D, tratando o problema, para simplificar, como bidimensional.

Se houver um anteparo opaco na posição com dois furos, a probabilidade da partícula chegar ao detector é dada pela soma das amplitudes de probabilidade para passar por cada um dos furos.

Se aumentarmos o número de furos e de anteparos intermediários (Fig. 1a), o número de trajetórias alternativas que interferem aumenta, até que, no limite de subdivisão (Fig. 1b), a probabilidade da partícula chegar ao detector é dada pela soma das amplitudes de probabilidade para todas as trajetórias possíveis entre F e D.

Podemos ainda especificar o movimento da partícula de forma mais detalhada, definindo o instante t em que ela passa por um determinado ponto. Isso corresponde a especificar a trajetória da partícula por meio de equações paramétricas $x = x(t)$, $y = y(t)$. A amplitude será, finalmente, a superposição das amplitudes correspondentes a todas as trajetórias possíveis.



(a) (b)

Figura 1

3.3.1 Formulação de Espaço de Fase

Para entender matematicamente a ideia de propagação quântica, dividiremos o intervalo de tempo entre o instante inicial $t_0 = 0$ e o instante final t em N subintervalos. Chamaremos esses subintervalos de $t_k(k = 0, 1, \ldots, N)$ tais que $t_0 = 0$, $t_N = t$. A propagação entre t_0 e t pode ser dividida em uma sequência de propagações através dos instantes intermediários. A lei de composição dos propagadores nos diz que $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t_N, t_{N-1})\hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \ldots \hat{U}(t_1, t_0)$. Inserindo conjuntos completos de estados intermediários, o propagador entre a posição inicial $\vec{q}_0$ e a posição final $\vec{q}_f = \vec{q}_N$ pode ser expresso como

$$\begin{aligned}
&\langle q|\hat{U}(t, t_0)|q_0\rangle \\
&= \int \ldots \int \langle q|\hat{U}(t_N, t_{N-1})|p_N\rangle\langle p_N|\hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2})|p_{N-1}\rangle \ldots \langle p_1|\hat{U}(t_1, t_0)|q_0\rangle \\
&\times dp_{N-1} \ldots dp_1.
\end{aligned} \tag{9}$$

Para entender o que acontece quando o número de subintervalos N tende ao infinito, o intervalo de tempo entre cada subintervalo ϵ tende a zero, $\delta t_k \to 0$, onde $\delta t_k = t_k - t_{k-1}$. descrito pela Hamiltoniana, $\hat{H}(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$, onde $\vec{q}$ é uma coordenada cartesiana. Como $\hat{H}$ é independente do tempo,

$$\left\langle \mathrm{q}_k \left| \hat{U}\left(\mathrm{t}_k, \mathrm{t}_{k-1}\right) \right| \mathrm{q}_{\mathrm{k}-1} \right\rangle = \left\langle \mathrm{q}_{\mathrm{k}} \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta \mathrm{t}_{\mathrm{k}}\right) \right| \mathrm{q}_{\mathrm{k}-1} \right\rangle. \tag{10}$$

Para calcular este elemento de matriz, introduzimos um conjunto completo de estados intermediários do momento, usando $\int |p_k\rangle\langle p_k| dp_k = I$, de modo que a Eq. 9 fica

$$\begin{aligned}
K\left(q_f, q_0, t\right) = \int \ldots \int &\left\langle q_f \left| \hat{U}\left(\delta t_N\right) \right| p_N \right\rangle \langle p_N \mid q_{N-1}\rangle \ldots \\
&\ldots < q_1 \left| \hat{U}\left(\delta t_1\right) \right| p_1 > \langle p_1 \mid q_0\rangle \, dq_{N-1} \ldots dq_1 dp_N \ldots dp_1
\end{aligned} \tag{11}$$

Note haver uma integração sobre p a mais do que sobre q.

A ideia básica é agora que a $N \to \infty$, $\epsilon = \max(\delta t_k) \to 0$, $\delta t_k \to 0$, onde $\delta t_k = t_k - t_{k-1}$ pode ser utilizada para simplificar a propagação sobre um intervalo de tempo infinitesimal,

$\langle q_k | e^{-i\hat{H}(\delta t_k)/\hbar} | p_k \rangle \langle p_k | q_{k-1} \rangle \approx \langle q_k | [1 - \frac{i}{\hbar} H(\vec{p}, \vec{q}) \delta t_k] | p_k \rangle \langle p_k | q_{k-1} \rangle$. Onde estamos desprezando termos de ordem igual ou superior a δt_k onde $\delta t_k = t_k - t_{k-1}$ e lembrando que $\langle \vec{q} | \vec{p} \rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{L}{2}} exp\left(\frac{i\vec{p}\cdot\vec{q}}{\hbar}\right)$, resulta em:

$$
\begin{aligned}
< q_k \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t_k\right) \right| p_k > \langle p_k \mid q_{k-1} \rangle &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} H\left(p_k, q_k\right) \delta t_k\right] \underbrace{\langle q_k \mid p_k \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i p_k q_k/\hbar}} \underbrace{p_k \left| q_{k-1} \right\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i p_k q_{k-1}}/\hbar} \\
\approx \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i p_k (q_k - q_{k-1})/\hbar} \cdot \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H\left(p_k, q_k\right) \delta t_k\right],
\end{aligned}
\tag{12}
$$

Substituindo a Eq. 12 na Eq. 11, no limite definido anteriormente, obtemos a expressão heurística, onde $\epsilon = \max(\delta t_k)$:

$$
K(q_f, q_i, t) = \lim_{\epsilon \to 0} \int \ldots \int \prod_{k=1}^{N-1} \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar} exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N-1} (p_k \delta q_k - \hat{H} \delta t_k)\right) \tag{13}
$$

Podemos agora interpretar esta expressão da seguinte maneira. No espaço de fase (p, q) associado ao movimento da partícula, definimos as trajetórias poligonais ilustradas na Fig. 2a, de equações paramétricas $p = p(\tau)$, $q = q(\tau)$, onde $0 < T \leq \tau$, e

$$
\begin{cases}
q(\tau) = \underbrace{\left(\dfrac{q_k - q_{k-1}}{t_k - t_{k-1}}\right)}_{\delta q_k / \delta t_k} (\tau - t_{k-1}) + q_{k-1} \\
\qquad\quad = \dot{q}_k \left(\tau - t_{k-1}\right) + q_{k-1}, \\
p(\tau) = p_k
\end{cases}
\tag{14}
$$

no intervalo $t_{k-1} < \tau \leq t_k$

(a) (b)

Figura 2

As trajetórias em q têm os extremos fixos q_i e q_f; as em p têm extremos livres, ou seja, $p(0)$ e $p(t)$ são arbitrários. Nestas condições, podemos considerar a soma no expoente da Eq. 14 como um aproximante da integral:

$$A\left[p(\tau), q(\tau), q_f, q_0; t\right] = \int_0^t \left[p\dot{q} - H(p,q)\right] d\tau \tag{15}$$

Os colchetes nos argumentos $p(t)$ e $q(t)$ indicam que A é uma função que depende desses argumentos. Essa função é obtida como o limite de uma sequência de trajetórias poligonais. Essas trajetórias definem as trajetórias no espaço de fase.

Obtemos assim a seguinte expressão para o propagador Eq. 14:

$$K(q_f, q_0, t) = \iint \mathcal{D}_p \mathcal{D}_q \exp\left(A\left([p], [q]; q_f, q_0; t\right)\right) \tag{16}$$

A integral de trajetória no espaço de fase é definida como o limite de uma sequência de integral de trajetórias poligonais. O "elemento de volume" no espaço funcional das funções $p(\tau)$, $q(\tau)$ é indicado pela notação

$$\mathcal{D}p\mathcal{D}q = \lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N-1} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_k\, dq_k \tag{17}$$

Que representa uma "produtória contínua". A Eq. 16 do propagador é devida a Feynman.

3.3.2 Formulação No Espaço de Configurações

Para passar ao espaço de configurações, substituiremos na Eq. 14 as integrais sobre o espaço dos momentos. Pelas seguintes relações $\hat{H}(p,q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ e Eq. 14, a integral sobre p_k é dada por

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp_k \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{p_k^2}{2m}\delta t_k - p_k\left(q_k - q_{k-1}\right)\right]\right\} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t_k}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\delta t_k}\left(q_k - q_{k-1}\right)^2\right] \end{aligned} \tag{18}$$

Para simplificar a notação, adotaremos uma subdivisão do intervalo $(0,t)$ em subintervalos todos iguais:

$$\delta t_k = \epsilon, \quad k = 1, 2, \ldots, N, \quad \text{onde} \quad N\epsilon = t. \tag{19}$$

Obtemos então, efetuando as integrações sobre o espaço dos momentos na Eq. 14:

$$\begin{aligned} K\left(q_f, q_0; t\right) = \lim_{\varepsilon\to 0}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} \int \cdots \int_{k=1}^{N-1}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{1/2} da_k. \\ \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N}\varepsilon\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_k - q_{k-1}}{\varepsilon}\right)^2 - v\left(q_k\right)\right]\right\}. \end{aligned} \tag{20}$$

Tomamos agora trajetórias poligonais no espaço de configurações, do tipo ilustrado na Fig. 2a. A somatória no expoente da Eq. (20) é um aproximante da integral

$$\begin{aligned} S\left([q(\tau)], q_f, q_a; t\right) &= \int_0^t \left[\frac{m}{2}\dot{q}(\tau)^2 - v(q(\tau))\right] d\tau \\ &= \int_0^t \mathcal{L}([q(\tau)], [\dot{q}(\tau)]) d\tau \end{aligned} \tag{21}$$

Onde $\mathcal{L}$ é a Lagrangiana clássica associada à Hamiltoniana clássica $\hat{H}(p,q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$. A integral de ação(Eq. (21)) ou função principal de Hamilton é calculada ao longo da trajetória $q(t)$ no espaço de configurações, ligando o ponto inicial fixo q_0 ao ponto final fixo q_f.

Nestas condições, o limite indicado na (20) define a integral de trajetória no espaço de configuração, representada simbolicamente por

$$K\left(q_f, q_0; t\right) = \int Dq \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left([q(\tau)], q_f, q_0; t\right)\right\} \tag{22}$$

A equação (22)é a forma original da integral de trajetória de Feynman. Ela pode ser interpretada como uma superposição de todas as trajetórias possíveis que ligam os pontos q_0 a q_f. A amplitude de probabilidade de cada trajetória é dada pelo exponencial da integral de ação calculada ao longo da trajetória.

4 Resultados

4.1 Modelo de Caldeira-Leggett

Sistema é composto por três partes(sistema, interação e reservatório), descrito como:

$$\mathcal{L}_T = \underbrace{\frac{M\dot{q}^2}{2} - V_0(q)}_{Sistema} + \underbrace{-\sum_k C_k q q_k}_{Interao} + \underbrace{\sum_k \frac{m_k \dot{q}_k^2}{2} - \frac{m_k \omega_k^2 q_k^2}{2}}_{Reservatrio} \tag{23}$$

O reservatório, é formado por um conjunto de osciladores, onde q_k é coordenada, massa m_k e frequência ω_k. As constatantes C_k são as constatantes de acoplamento reservatório-sistema. Estudaremos a equação de movimento clássico, ou seja, $q(t)$ em contato com o reservatório, resolvendo por Euler-Lagrange, chegamos que:

$$\begin{aligned} & M\dot{q} + \frac{\partial V_0(q)}{\partial q} - \sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} q = \\ & -\sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon - i\infty}^{\epsilon + i\infty} \frac{s^2}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} q'(s) ds - \sum_k \frac{C_k}{2\pi i} \int_{\epsilon - i\infty}^{\epsilon + i\infty} \frac{[\dot{q}_k(0) + q_k(0)s]}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds \end{aligned} \tag{24}$$

Podemos definir a função espectral, para definir melhor,

$$J(\omega) = \sum_k \frac{\pi}{2} \frac{C_k^2}{m_k \omega_k} \delta(\omega - \omega_k) \tag{25}$$

Onde a definição da função espectral fica $J(\omega) = \eta\omega\theta(\Omega - \omega)$, onde θ é a função Heaviside, usando essa definição, chegamos em:

$$\sum_k \frac{C_k^2}{m_k \omega_k^2} \frac{1}{2\pi i} \int_{\epsilon - i\infty}^{\epsilon + i\infty} \frac{s^2}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} q'(s) ds = \eta \dot{q} \tag{26}$$

Esse termo pode ser interpretado como uma força que depende das condições iniciais do sistema aos osciladores do reservatório

$$f(t) = \sum_k \frac{C_k}{2\pi i} \int_{\epsilon - i\infty}^{\epsilon + i\infty} \frac{[\dot{q}_k(0) + q_k(0)s]}{s^2 + \omega_k^2} e^{st} ds \tag{27}$$

Chegamos na equação de Langevin:

$$M\ddot{q} + \frac{\partial V(q)}{\partial q} + \eta \dot{q} = f(t) \tag{28}$$

4.1.1 Hamiltoniana

Podemos encontrar a Hamiltoniana do modelo, encontrar primeiramente os momentos canônicos do sistema, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = M\dot{q}$ e $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q_k}} = m_k \dot{q_k}$. Usando a definição da hamiltoniana e os momentos obtemos

$$H = p\dot{q} + \sum_k p_k \dot{q_k} - \mathcal{L} \to H = \frac{p^2}{2M} + V_0(q) + \sum_k \left(\frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{m_k \omega_k^2 q_k^2}{2} \right) + \sum_k C_k q q_k \tag{29}$$

4.1.2 O Operador Densidade Reduzido Dinâmico

O operador para o sistema que estamos trabalhando, será $\hat{\rho}_{s+r}(t) = U(t,0)\hat{\rho}_{s+r}(0)U^{\dagger}(t,0)$. Podemos agora associar os osciladores do banho em um vetor $\vec{R} = (R_1, R_2, R_3, \ldots, R_N)$ é o valor assumido pelas coordenadas q_k, portando, diferencial será, $d\vec{R} = (dR_1, dR_2, dR_3, \ldots, dR_N)$, chegamos que, o estado do reservatório escreve-se, da seguinte forma $|\vec{R}\rangle = |R_1\rangle \otimes |R_1\rangle \otimes |R_1\rangle \otimes \ldots \otimes |R_N\rangle$, podemos escrever a completeza da seguinte forma, $\iint dx' dR' \, |x', \vec{R}'\rangle \langle x', \vec{R}'| = I$.

$$
\begin{aligned}
&\langle x, \vec{R}|\hat{\rho}_{r+s}(t)|y, \vec{q}\rangle = \langle x, \vec{R}|\hat{U}(t,0)\hat{\rho}_{s+r}(0)\hat{U}(t,0)|y, \vec{Q}\rangle = \\
&= \iiiint dx'dy'd\vec{R}'d\vec{Q}' \, \langle x, \vec{R}|\hat{U}(t,0)|x', \vec{R}'\rangle \, \langle x', \vec{R}'|\hat{\rho}_{s+r}(0)|y', \vec{Q}'\rangle \, \langle y', \vec{Q}'|\hat{U}(t,0)|y, \vec{Q}\rangle
\end{aligned} \tag{30}
$$

Usando a definição de propagador que usamos anteriormente, chegamos que:

$$
\langle x, \vec{R}|\hat{\rho}_{r+s}(t)|y, \vec{q}\rangle = \iiiint dx'dy'd\vec{R}'d\vec{Q}'K(x, \vec{R}, t; x', \vec{R}', 0) \, \langle x', \vec{R}'|\hat{\rho}_{s+r}(0)|y', \vec{Q}'\rangle \, K^*(y', \vec{Q}', t; y, \vec{Q}, 0) \tag{31}
$$

O espaço de Hilbert para esse problema é N+1 dimensional, já que estamos considerando 1 sistema de interesse interagindo com N osciladores do reservatório. Os dois propagadores são responsáveis pela evolução do operador densidade, é o sistema mais reservatório. Estamos interessados em observar o comportamento do sistema, portanto, traço de $\rho_{r+s}(t)$ com respeito às variáveis do reservatório, logo, $\hat{\rho}_{r+s}(t) = Tr_R(\hat{\rho}_{r+s}(t)) = \int d\vec{R} \, \langle \vec{R}|\hat{\rho}_{r+s}(t)|\vec{R}\rangle$, é o operador densidade reduzido do sistema.

$$
\rho_s(x, y, t) = \int\!\!\!\int\!\!\!\int\!\!\!\int\!\!\!\int dy'dx'd\vec{R}d\vec{R}'d\vec{Q}'K(x, \vec{R}, t; , x', \vec{R}', 0) \, \langle x', \vec{R}'|\hat{\rho}_{s+r}(0)|y', \vec{Q}'\rangle \, K^*(y', \vec{Q}', t; y, \vec{Q}, 0) \tag{32}
$$

Podemos definir uma função

$$
J(x, y, t; x', y', 0) = \iiint d\vec{R}d\vec{R}'d\vec{Q}'K(x, \vec{R}, t; , x', \vec{R}', 0)K^*(y', \vec{Q}', t; , y, \vec{Q}, 0) \tag{33}
$$

Chamamos de super propagador que rege a evolução temporal do operador densidade reduzido do sistema, usando a representação de Feymman e a ação clássica.

$$
\begin{aligned}
&J(x, y, t; x', y', 0) = \iiint d\vec{R}d\vec{R}'d\vec{Q}'\hat{\rho}_R(\vec{R}', \vec{Q}', 0) \\
&\int_{x'}^{x} \mathcal{D}x \int_{\vec{R}}^{\vec{R}'} \mathcal{D}\vec{R} \; exp\left(\frac{i}{\hbar}[S_s + S_R + S_I]\right) \int_{y'}^{y} \mathcal{D}x \int_{\vec{Q}'}^{\vec{R}} \mathcal{D}\vec{R} \; exp\left(-\frac{i}{\hbar}[S_s + S_R + S_I]\right)
\end{aligned} \tag{34}
$$

Podemos definir uma função

$$F[x,y] = \iiint \prod_{k=1}^{N} dR_k dR'_k dQ'_k \rho_R^k(R'_k, Q'_k, 0) K_{R+I}(R_k, t; R'_k, 0; [x(t')]) K^*_{R+I}(R_k, t; Q'_k, 0; [y(t')]) \tag{35}$$

Resolvendo o propagador com ação caracterizada pela lagrangiana Eq. 29, considerando reservatório e interação.

$$\begin{aligned} K_{R+I}(R_k, t; R'_k, 0; [x(t')]) = \sqrt{\frac{m_k\omega_k}{2\pi i\hbar\sin(\omega_k t)}} exp\left[\frac{i m_k \omega_k}{2\hbar sin(\omega_k t)} \left[\left(R_k^2 + R_k^{2\prime}\right) cos(\omega_k t)\right.\right. \\ - 2R_k R'_k - \frac{2R'_k C_k}{m_k\omega_k}\int_0^t x(t') sin(\omega_k(t-t'))dt' - \frac{2R'_k C_k}{m_k\omega_k}\int_0^t x(t') sin(\omega_k(t'))dt' \\ \left. - \frac{2R'_k C_k}{m_k\omega_k}\int_0^t\int_0^{t'} x(t'')x(t') sin(\omega_k(t-t')) sin(\omega_k(t-t'))dt'dt''\right] \end{aligned} \tag{36}$$

Seguindo a mesma lógica chegamos para o propagador $K^*_{R+I}(R_k, t; Q'_k, 0; [y(t')])$.

Ainda falta calcular o operador densidade para um oscilador do reservatório, consideramos um sistema em contato com um reservatório em equilíbrio térmico à temperatura fixa T. Se o sistema em equilíbrio pode estar em N estados, então a probabilidade de o sistema ter a energia E_i é, $P_i = \frac{e^{-E_i\beta}}{\sum_{i=1}^{N} exp(-E_i\beta)}$. Quando $|\phi_i\rangle$ é um autoket e E_i é um autovalor de energia correspondente de um hamiltoniana $\hat{H}$, a probabilidade de que o sistema esteja estado $|\phi_i\rangle$ é P_i, e então, a matriz densidade é,$\rho = \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Q} |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Q}\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$.

$$\frac{\partial\hat{\rho(\beta)}}{\partial\beta} = -\hat{H}\rho(\beta) \tag{37}$$

Encontraremos o operador densidade do oscilador harmônico simples, hamiltoniana descrita da seguinte forma: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega\hat{x}^2}{2}$, resolvendo, usando a relação 37, chegamos em

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; \beta) = \frac{1}{Z}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar sinh(\omega\hbar\beta)}} \\ exp(\frac{m\omega}{2\hbar sinh(\omega\hbar\beta)}[(x^2 + x^{2\prime})cosh(\omega\hbar\beta) - 2xx']) \end{aligned} \tag{38}$$

a função partição do sistema é dado por $Z = \frac{1}{2sinh(\omega\hbar\beta/2)}$,logo, chegamos que:

$$\begin{aligned}\rho(x,x';\beta) &= 2sinh(\omega\hbar\beta/2)\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar sinh(\omega\hbar\beta)}} \\ &exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar sinh(\omega\hbar\beta)}[(x^2+x^{2\prime})cosh(\omega\hbar\beta)-2xx']\right)\end{aligned} \tag{39}$$

Substituindo pelo sistema de coordenadas que estamos usando, chegamos que:

$$\begin{aligned}\rho_R^K(R_k', Q_k'; t=0,0) &= 2sinh(\omega_k\hbar\beta/2)\sqrt{\frac{m_k\omega_k}{2\pi\hbar sinh(\omega_k\hbar\beta)}} \\ &exp\left(\frac{m_k\omega_k}{2\hbar sinh(\omega_k\hbar\beta)}\left[\left(R_k^2+Q_k^{2\prime}\right)cosh(\omega_k\hbar\beta)-2R_k'Q_k'\right]\right)\end{aligned} \tag{40}$$

4.1.3 Funcional de Influência

Temos em mãos o operador densidade para um oscilador do banho e os propagadores para o osciladores do banho(reservatório), o funcional de influência para o k-ésimo oscilador do banho escreve-se:

$$\begin{aligned}F[x,y] &= exp\left(-\frac{C_k}{2\hbar m_k\omega_k}cotgh(\omega_k\hbar\beta/2))\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\sigma[x(\tau)-y(\tau)]cos[\omega_{k(\tau-\sigma)}][x(\sigma)-y(\sigma)]\right. \\ &\left.+\frac{iC_k^2}{2\hbar m_k\omega_k}\int_0^t d\tau\int_0^\tau [x(\tau)-y(\tau)]sin[\omega_k(\tau-\sigma)]\,[x(\sigma)+y(\sigma)]\right)\end{aligned} \tag{41}$$

Definindo as seguintes funções, primeira, $\alpha_R(\tau-\sigma) = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{2m_k\omega_k}cotgh(\omega_k\hbar\beta/2)cos[\omega_k(\tau-\sigma)]$ e segunda função, $\alpha_I(\tau-\sigma) = \sum_{k=1}^N \frac{C_k^2}{2m_k\omega_k}sin[\omega_k(\tau-\sigma)]$, assim podemos escrever o funcional de influência como

$$\begin{aligned}F[x,y] &= \exp\left\{\frac{-1}{\hbar}\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\sigma[x(\tau)-y(\tau)]\alpha_R(\tau-\sigma)[x(\sigma)-y(\sigma)]\right\} \\ &\exp\left\{\frac{-i}{\hbar}\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\sigma[x(\tau)-y(\tau)]\alpha_I(\tau-\sigma)[x(\sigma)+y(\sigma)]\right\}\end{aligned} \tag{42}$$

substituindo o funcional de influência no super propagador, temos que:

$$\begin{aligned} J\left(x,y,t;x',y',0\right) = \int_{x'}^{x} D_F x\left(t'\right)\int_{y'}^{y} D_F\left(t'\right)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[S_S\left[x\left(t'\right)\right]-S_S\left[y\left(t'\right)\right]\right.\right.\\ \left.\left.-\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\sigma[x(\tau)-y(\tau)]\alpha_I(\tau-\sigma)[x(\sigma)+y(\sigma)]\right]\right\} * (154)\\ * \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\sigma[x(\tau)-y(\tau)]\alpha_R(\tau-\sigma)[x(\sigma)-y(\sigma)]\right\} \end{aligned} \tag{43}$$

Usando a definição de função espectral na Eq. 25, reescrevendo para seguinte definição, $\sum_{k=1}^{N}\frac{C_k^2}{2m_k\omega_k}f(\omega_k) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty J(\omega)f(\omega)$ nas seguintes nas funções, primeira para o reservatório $\alpha_R(\tau-\sigma) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty J(\omega)cotgh(\omega_k\hbar\beta/2)cos[\omega_k(\tau-\sigma)]$ e a segunda relação para a interação $\alpha_I(\tau-\sigma) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty J(\omega)sin[\omega_k(\tau-\sigma)]$. Usando a forma da função espectral como $J(\omega) = \eta\omega\Theta(\Omega-\omega)$(estamos considerando $\Omega\to\infty$) substituindo nas funções anteriores, $\alpha_I(\tau-\sigma) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \eta\omega sin[\omega_k(\tau-\sigma)]$, e a outra $\alpha_R(\tau-\sigma) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \eta\omega cotgh(\omega_k\hbar\beta/2)cos[\omega_k(\tau-\sigma)]$, resolvendo a equação $\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \eta\omega sin[\omega_k(\tau-\sigma)] = \alpha_I(\tau-\sigma) = \frac{\eta\Omega}{\pi(\tau-\sigma)}\cos[\Omega(\tau-\sigma)] - \frac{\eta}{\pi(\tau-\sigma)^2}\operatorname{sen}[\Omega(\tau-\sigma)]$, substituindo no super propagador, chegamos que:

$$\begin{aligned} J\left(x,y,t;x',y',t\right) = \int_{x'}^{x} D_F x\left(t'\right)\int_{y'}^{y} D_F y\left(t'\right)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[S_s\left[x\left(t'\right)\right]-S_s\left[y\left(t'\right)\right]-\right.\right.\\ -\frac{\eta\Omega}{\pi}\int_0^t d\tau[x(\tau)-y(\tau)]\int_0^\tau d\sigma\frac{\cos[\Omega(\tau-\sigma)]}{(\tau-\sigma)}[x(\sigma)+y(\sigma)]+\\ \left.\left.+\frac{\eta}{\pi}\int_0^t d\tau[x(\tau)-y(\tau)]\int_0^\tau d\sigma\frac{\operatorname{sen}[\Omega(\tau-\sigma)]}{(\tau-\sigma)^2}[x(\sigma)+y(\sigma)]\right]\right\} *\\ \exp\left\{\frac{-n}{\pi\hbar}\int_0^t d\tau[x(\tau)-y(\tau)]\int_0^\tau d\sigma\int_0^\Omega d\omega\omega\operatorname{cotgh}(\omega\hbar\hat{h}(2)\cos[\omega(\tau-\sigma)][x(\sigma)-y(\sigma))]\right\} \end{aligned} \tag{44}$$

Consideramos o seguinte potencial efetivo :

$$\begin{aligned} S_S[x]-S_S[y]+\frac{\eta\Omega}{\pi}\int_0^t d\tau\left[x^2(\tau)-y^2(\tau)\right] = \\ = \int_0^t d\tau\left[\frac{1}{2}M\dot{x}^2(\tau)-\frac{1}{2}M\tilde{\omega}^2x^2(\tau)-\frac{1}{2}M\dot{y}^2(\tau)+\frac{1}{2}M\tilde{\omega}^2y^2(\tau)\right] = S_s\left[x\left(t'\right)\right]-\tilde{S}_s\left[y\left(t'\right)\right] \end{aligned} \tag{45}$$

Os intervalos de tempo em que estamos interessados são aqueles em que $t\approx\frac{1}{\omega}$ e que

$\Omega >> \omega$, ou seja, $\frac{1}{\omega} << \frac{1}{\omega} \to t >> \frac{1}{\Omega}$ e assim, podemos fazer a seguinte aproximação, $\frac{1}{\pi}\frac{sen(\Omega(\tau-\omega))}{\tau-\omega} \approx \delta(\tau-\sigma)$, fazendo essas substituições no super propagador, chegamos que:

$$
\begin{aligned}
&J\left(x,y,t;x',y',0\right) = \int_{x'}^{x} D_F x\left(t'\right) \int_{y'}^{y_F} D_y\left(t'\right) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\tilde{S}_s\left[x\left(t'\right)\right] - \tilde{S}_s\left[y\left(t'\right)\right]\right.\right.\\
&\left.\left.-\frac{\eta}{2}\int_0^t d\tau[x(\tau)-y(\tau)][\dot{x}(\tau)+\dot{y}(\tau)]\right]\right\}\\
&\exp\left\{\frac{-\eta}{\pi\hbar}\int_0^t d\tau[x(\tau)-y(\tau)]\int_0^\tau d\sigma\int_0^\Omega d\omega\omega\,\mathrm{cotgh}(\omega\hbar\beta/2)\cos[\omega(\tau-\sigma)][x\mid\sigma)\right.
\end{aligned}
\tag{46}
$$

Podemos definir a constante de relaxação $\nu = \frac{\eta}{2M}$, logo:

$$
\begin{aligned}
&J\left(x,y,t;x',y',0\right) = \exp\left[\frac{-i}{\hbar}f\left(x,x';y,y'\right)\right]\int_{x'}^{x} D_F x(t)\int_{y'}^{y} D_F y(t)\\
&*\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\tilde{S_S}\left[x\left(t'\right)\right]-\tilde{S}_S\left[y\left(t'\right)\right]-MV\int_0^t dt'\left[x\left(t'\right)\dot{y}\left(t'\right)-y\left(t'\right)\dot{x}\left(t'\right)\right]\right]\right\}*\\
&*\exp\int-\frac{2M\gamma}{\pi\hbar}\int_0^t d\tau[x(\tau)-y(\tau)]\int_0^\tau d\sigma\int_0^\Omega d\omega\omega\,\mathrm{cotgh}(\omega\hbar\beta/2)\cos[\omega(\tau-\sigma)][x(\sigma)-y(\sigma)
\end{aligned}
\tag{47}
$$

Analisaremos o limite clássico(altas temperaturas), onde temos,$K_BT >> \hbar\omega$ para $\omega << \Omega$, fazendo essas considerações, $cotgh(\omega\hbar\beta/2) \approx \frac{2K_bT}{\hbar\omega}$, portanto, temos a seguinte expressão.

$$
\begin{aligned}
&J\left(x,y,t;x',y',0\right) = \exp\left[\frac{-i}{\hbar}f\left(x,x';y,y'\right)\right]\int_{x'}^{x} Dx\left(t'\right)\int_{y'}^{y} Dy\left(t'\right)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left[S_S\left[x\left(t'\right)\right]-\right.\right.\\
&\left.-\tilde{S}_s\left[y\left(t'\right)\right]-M\gamma\int_0^t dt'\left[x\left(t'\right)\dot{y}\left(t'\right)-\dot{x}\left(t'\right)y\left(t'\right)\right]\right]\exp\left\{\frac{-2M\gamma k_BT}{\hbar^2}\int_0^t d\tau[x(\tau)-y(\tau)]^2\right\}.
\end{aligned}
\tag{48}
$$

4.1.4 Equação de movimento

Agora podemos encontrar uma equação diferencial para $\hat{\rho}_s(x,y,t)$

$$\rho_s(x,y,t) = \iint J\left(x,y,t;x',y',0\right)\rho_s(x',y',t)dx'dy' \tag{49}$$

O super propagador pode ser encontrado, se seguirmos os mesmos passos de Feynmann ao deduzir a equação de Schrodinger[7] partindo da representação de integrais funcionais para o propagador.

$$K\left(q_k,t_k;q_{k-1},t_{k-1}\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}}\exp\left\{\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2\varepsilon^2}\left(q_k-q_{k-1}\right)^2 - V\left(q_k\right)\right]\right\} \tag{50}$$

O termo $\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}}$ nada mais é que um fator de normalização, $\frac{1}{N^2} = \frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}$, logo, $K\left(q_k,t_k;q_{k-1},t_{k-1}\right) = \frac{1}{N}\exp\left\{\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2\varepsilon^2}\left(q_k-q_{k-1}\right)^2 - V\left(q_k\right)\right]\right\}$. A ação clássica é dada por, $S_{cl} = \int_{t_0}^{t}(\frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q))dt \approx (\frac{m(q_k-q_{k-1})}{2\epsilon^2} - V(\frac{q_k+q_{k-1}}{2}))$, para potenciais bem-comportados, em que, $q_k - q_{k-1} = n_k \to 0$, assim podemos reescrever o potencial como, $V(\frac{q_k+q_{k-1}}{2})) \approx V(q_k - \frac{\eta_k}{2})) \approx V(q_k)$. A ação clássica pode ser escrita da seguinte forma $S_{cl} \approx \epsilon\left[\frac{m(q_k-q_{k-1})}{2\epsilon^2} - V(q_k)\right]$.

$$K\left(q_k,t_k;q_{k-1},t_{k-1}\right) \approx \frac{1}{N}exp(\frac{iS_{cl}}{\hbar}) \tag{51}$$

Considerando os intervalos de tempo infinitesimais, a integração funcional pode ser aproximada num valor do integrando vezes uma constante de normalização:

$$\int \mathcal{D}q\ exp\left(\frac{iS_{cl}}{\hbar}\right) \approx \frac{1}{N}exp\left(\frac{iS_{cl}}{\hbar}\right) \tag{52}$$

Assim, chegamos que:

$$
\begin{aligned}
&J\left(x,y,t+\varepsilon;x',y',t\right)\approx\frac{1}{A}\exp\left\{\frac{-if}{\hbar}\left(x,x',y,y'\right)\right\}\\
&\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left[\int_t^{t+\varepsilon}\left(\frac{1}{2}M\dot{x}^2-\tilde{V}(x)\right)dt'-\int_t^{t+\varepsilon}\left(\frac{1}{2}M\dot{y}^2-\tilde{V}(y)\right)dt'\right.\right.\\
&\left.\left.-M\gamma\int_t^{t+\varepsilon}(x\dot{y}-\dot{x}y)dt'\right]\right\}\exp\left\{\frac{-2M\gamma k_BT}{\hbar^2}\int_t^{t+\varepsilon}(x-y)^2dt'\right\}
\end{aligned}
\tag{53}
$$

Faremos as seguintes mudanças de variavies, $\beta_1 = x - x'$ e $\beta 2 = y - y'$, logo, $dx' = -d\beta_1$ e $dy' = -d\beta_2$, e ainda, $x' = x - \beta_1$ e $y' = y - \beta_2$, portanto, chegamos no seguinte super propagador para o operador densidade.

$$
\begin{aligned}
&\rho_s(x,y,t+\varepsilon)=\frac{1}{A}\iint d\beta_1 d\beta_2\exp\left\{\frac{iM}{2\hbar\varepsilon}\beta_1^2-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\tilde{V}\left(x-\frac{\beta_1}{2}\right)-\frac{iM}{2\hbar\varepsilon}\beta_2^2+\right.\\
&+\frac{i\varepsilon}{\hbar}\widetilde{V}\left(y-\frac{\beta_2}{2}\right)-\frac{iM\gamma}{\hbar}\left(x-\frac{\beta_1}{2}\right)\beta_2+\frac{iM\gamma}{\hbar}\left(y-\frac{\beta_2}{2}\right)\beta_1-\frac{iM\gamma}{\hbar}\left(x-\frac{\beta_1}{2}\right)\beta_1+\\
&+\frac{iM\gamma}{\hbar}\left(y-\frac{\beta_2}{2}\right)\beta_2-\frac{2M\gamma k_BT\varepsilon}{\hbar^2}(x-y)^2+\frac{2M\gamma k_BT\varepsilon}{\hbar^2}(x-y)\left(\beta_1-\beta_2\right)-\\
&\left.-\frac{M\gamma k_BT\varepsilon}{2\hbar^2}\left(\beta_1-\beta_2\right)^2\right\}\rho_S\left(x-\beta_1,y-\beta_2,t\right)
\end{aligned}
\tag{54}
$$

Devemos calcular a integral quando $\epsilon \to 0$. Nesse limite, os termos proporcionais a ϵ^{-1} tornan-se muito grandes, o que faz com que a exponencial oscile muito rapidamente. portanto, par aque a integral assuma um valor finito, temos que ter β_1 e β_2 muito pequenos.Na ordem de $\beta_1 \approx \beta_2 \approx \sqrt{\frac{\varepsilon\hbar}{M}}$ Nessa região, a fase de ambas as exponenciais deven mudar por fase de ordem 1. Assim, consideremos: $\beta_1 \approx \beta_2 \approx O\left(\varepsilon^{1/2}\right)$

Assim definiremos duas novas variáveis, primeira $\beta_1' = \beta_1 - \gamma(x-y)\varepsilon$ e segunda $\beta_2' = \beta_2 + \gamma(x-y)\varepsilon$,tal que, $\beta_1 = \beta_1' + \gamma(x-y)\varepsilon$ e $\beta_2 = \beta_2' - \gamma(x-y)\varepsilon$ e ainda: $d\beta_1 = d\beta_1'$ e $d\beta_2 = d\beta_2'$.

Agora, considerar uma expansão em série de Taylor para uma função de uma variável:

$$\phi(x+h) = \phi(x) + h\frac{d}{dx}\phi(x) + \frac{1}{2!}h^2\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \dots \tag{55}$$

É para uma função de duas variável:

$$\begin{aligned} \phi(x+h, y+k) &= \phi(x,y) + h\frac{\partial}{\partial x}\phi(x,y) + k\frac{\partial}{\partial y}\phi(x,y) + \\ &+ \frac{1}{2!}\left[h^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x,y) + 2hk\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}\phi(x,y) + k^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\phi(x,y)\right] + \cdots \end{aligned} \tag{56}$$

É ainda a expansão em uma série da função exponencial:

$$e^{\alpha x} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha x)^n}{n!} \simeq 1 + \alpha x + \frac{\alpha^2 x^2}{2!} \tag{57}$$

Fazendo todas essas aproximações, chegamos que:

$$\begin{aligned} \rho_s + \epsilon\frac{\partial \rho_s}{\partial t} &= \frac{1}{A}\frac{2\pi\hbar\varepsilon}{M}\left[\rho_s - \frac{i\varepsilon}{\hbar}V(x)\rho_s + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\widetilde{V}(y)\rho_s - \right. \\ &\left. - \frac{2M\gamma k_B T}{\hbar^2}\varepsilon(x-y)^2\rho s - \gamma\varepsilon(x-y)\frac{\partial \rho s}{\partial x} + \gamma\varepsilon(x-y)\frac{\partial \rho_s}{\partial y}\right] + \\ &- \frac{1}{A}\frac{\pi\hbar^2\varepsilon^2}{iM^2}\frac{\partial^2 ps}{\partial x^2} + \frac{1}{A}\frac{\pi\hbar^2\varepsilon^2}{iM^2}\frac{\partial^2 \beta}{\partial y^2} \end{aligned} \tag{58}$$

O termo de normalização séra $\rho_s = \frac{2\pi\hbar\epsilon}{AM}\rho_s$, logo, chegamos que $A = \frac{2\pi\hbar\epsilon}{M}$. Os termos proporcionais a ϵ nos dão a equação de movimento para ρ_s na região semiclássica:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_s}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2Mi}\frac{\partial^2 \rho_s}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2Mi}\frac{\partial^2 \rho_s}{\partial y^2} - \gamma(x-y)\left[\frac{\partial \rho_s}{\partial x} - \frac{\partial \rho_s}{\partial y}\right] + \\ &+ \frac{1}{i\hbar}[\tilde{V}(x) - \tilde{V}(y)]\rho_s - \frac{2MVk_BT}{\hbar^2}(x-y)^2 p_s \end{aligned} \tag{59}$$

Não é a equação mais geral para ρ_s. Válida somente quando temos $2k_bT >> \hbar\Omega >> \hbar\omega$, região semiclássica. Outra forma de escrever:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}_s] - \frac{i\nu}{\hbar}[\hat{x}, \{\hat{\rho}, \hat{\rho}_s\}] - \frac{2M\nu K_B T}{\hbar^2}[\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}_s]] \tag{60}$$

5 Conclusão

O bolsista conseguiu concluir os estudos da integral de trajetória na Ref.[7] e o modelo de Caldeira-Leggett Ref. [4] durante o período 6 meses da bolsa, conseguindo replicar todas as contas e deduzir a euquação de movimento para o modelo de Caldeira-Leggett. O bolsista vai prosseguir os estudos para o tunelamento não-local em seu mestrado.

Partindo da formulação de Feynman, usando a relação do super propagador Eq. 49 com o operador densidade reduzido, encontramos uma equação de movimento para o modelo de Caldeira-Leggett na região semiclássica pelas condições de aproximações feitas para encontrar de forma analítica.

6 Referência

[1] GDM Neto, MA de Ponte, and Miled Hassan Youssef Moussa. Nonlocal dissipative tunneling for high-fidelity quantum-state transfer between distant parties. *Physical Review A*, 85(5):052303, 2012.

[2] Sougato Bose. Quantum communication through an unmodulated spin chain. *Physical review letters*, 91(20):207901, 2003.

[3] Michael A Nielsen and Isaac L Chuang. *Quantum computation and quantum information.* Cambridge university press, 2010.

[4] Amir O Caldeira and Anthony J Leggett. Quantum tunnelling in a dissipative system. *Annals of physics*, 149(2):374–456, 1983.

[5] Anthony J Leggett, SDAFMGA Chakravarty, Alan T Dorsey, Matthew PA Fisher, Anupam Garg, and Wilhelm Zwerger. Dynamics of the dissipative two-state system. *Reviews of Modern Physics*, 59(1):1, 1987.

[6] A Cacheffo, MA De Ponte, Miled Hassan Youssef Moussa, and ASM De Castro. Quasi-perfect state transfer in a bosonic dissipative network. *Journal of Physics B: atomic, molecular and optical physics*, 43(10):105503, 2010.

[7] Hagen Kleinert. *Path integrals in quantum mechanics, statistics, polymer physics, and financial markets.* World scientific, 2009.