

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA

# Sobre o Fenômeno da Descoerência em Sistemas Quânticos

Nicole Martins De March

Trabalho de conclusão de curso realizada sob a orientação da Prof. Dra. Sandra Denise Prado e apresentada a Comissão de Graduação em Física da UFRGS, em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do grau de Bacharel em Física.

Porto Alegre

2011



# Agradecimentos

Durante o período em que estive realizando este trabalho de pesquisa científica, muitas pessoas me acompanharam nesta jornada e muitas instituições me deram apoio. Enorme foi a ajuda que recebi, tanto direta quanto indiretamente, de forma que quero agradecer especialmente os citados abaixo:

- a Universidade Federal do Rio Grande do Sul, pelo ensino gratuito e de qualidade e pela estrutura disponibilizada;
- a Sandra Denise Prado, pela dedicação e paciência na orientação deste trabalho;
- ao Professor Leonardo Brunnet, por sua amizade, compreensão e contribuição na construção dos programas apresentados;
- a minha família, especialmente meus pais Itacir De March e Sônia, pelo apoio incondicional e pela base forte que sempre me proporcionaram;
- a todos os meus amigos, pelo companheirismo e compreensão.

Muito obrigada a todos.



# Sumário

<b>1. Introdução e motivação</b> . . . . .	1
1.1 Sobre Descoerência . . . . .	6
<b>2. A Partícula Livre</b> . . . . .	9
2.1 A Dualidade Onda-Partícula . . . . .	9
2.2 A função de Onda e o Experimento de Duas Fendas . . . . .	11
2.3 O Pacote de Onda e o Princípio da Incerteza . . . . .	12
2.4 O Movimento do Pacote de Onda . . . . .	16
2.5 O Espalhamento do Pacote de Onda . . . . .	18
2.6 Caso da Partícula num Estado Inicial de Superposição . . . . .	19
2.7 Descoerência no Caso de Temperatura Nula . . . . .	21
<b>3. Partícula Livre em Equilíbrio Térmico a uma Temperatura <math>T</math></b> . . . . .	25
3.1 Operador Densidade . . . . .	25
3.2 Aplicações do Operador Densidade: Sistema em Equilíbrio Termodinâmico	27
3.3 Distribuição de Maxwell- Boltzmann . . . . .	27
3.4 Descoerência no Caso de uma Temperatura Finita . . . . .	29
<b>4. Considerações Finais</b> . . . . .	39
<b>Referências Bibliográficas</b> . . . . .	i

# Lista de Figuras

1.1	Figura que demonstra o limite clássico para o experimento de duas fendas [7].	4
2.1	Diagrama esquemático da geometria de um experimento de duas fendas [4].	12
2.2	Gráfico de $ \psi(x, t) ^2$ (Equação 2.6) em $t=0$ (retângulo) e quando $t = \frac{ma^2}{\hbar}$ (curva) [22]. . . . .	15
2.3	Para pequenos valores do parâmetro $a$ . (a) Gráfico de $\psi(x, 0)$ . (b) Gráfico de $\phi(k)$ [22]. . . . .	15
2.4	Para grandes valores do parâmetro $a$ . (a) Gráfico de $\psi(x, 0)$ . (b) Gráfico de $\phi(k)$ [4]. . . . .	16
2.5	Distribuição de Probabilidade para $t=0$ . . . . .	21
2.6	Distribuição de Probabilidade para $t=0.4$ . . . . .	21
2.7	Distribuição de Probabilidade para $t=0.8$ . . . . .	22
2.8	Distribuição de Probabilidade para $t=1.8$ . . . . .	22
2.9	Distribuição de Probabilidade para $t=4.3$ . . . . .	23
3.1	Distribuição de Probabilidade para $t=0$ e $T=0.1$ . . . . .	30
3.2	Distribuição de Probabilidade para $t=0.08$ e $T=0.1$ . . . . .	30
3.3	Distribuição de Probabilidade para $t=0.11$ e $T=0.1$ . . . . .	31
3.4	Distribuição de Probabilidade para $t=0.14$ e $T=0.1$ . . . . .	31
3.5	Distribuição de Probabilidade para $t=0.15$ e $T=0.1$ . . . . .	32
3.6	Distribuição de Probabilidade para $t=0.16$ e $T=0.1$ . . . . .	32
3.7	Distribuição de Probabilidade para $t=0.22$ e $T=0.1$ . . . . .	33
3.8	Distribuição de Probabilidade para $t=0.32$ e $T=0.1$ . . . . .	33
3.9	Distribuição de Probabilidade para $t=0$ e $T=5$ . . . . .	34
3.10	Distribuição de Probabilidade para $t=0.06$ e $T=5$ . . . . .	34
3.11	Distribuição de Probabilidade para $t=0.08$ e $T=5$ . . . . .	35
3.12	Distribuição de Probabilidade para $t=0.09$ e $T=5$ . . . . .	35

---

3.13	Distribuição de Probabilidade para $t=0.10$ e $T=5$ . . . . .	36
3.14	Distribuição de Probabilidade para $t=0.11$ e $T=5$ . . . . .	36
3.15	Distribuição de Probabilidade para $t=0.16$ e $T=5$ . . . . .	37





## Resumo

O objetivo principal desse trabalho é um estudo introdutório sobre o fenômeno da descoerência. Esse processo físico pode, em princípio, explicar como o mundo clássico emerge do mundo quântico. O entendimento do fenômeno de descoerência tem fundamental importância não somente para o *status* da teoria quântica, mas também para uma discussão filosófica acerca da nossa visão de mundo. Uma vez que a mecânica quântica tem sua validade assegurada devido às suas previsões corretas no âmbito experimental, ainda não se sabe quais das interpretações físicas sobre os processos é a mais adequada. A maioria da comunidade Física utiliza a interpretação de Copenhagen<sup>1</sup>, mas isso não significa que esta seja a mais correta, mas sim, que tem mais adeptos. Do ponto de vista das áreas mais aplicadas da Física, a compreensão desse fenômeno também é de vital importância para o desenvolvimento da nanotecnologia, da computação quântica, da criptografia quântica e do teletransporte.

Nesse trabalho será enfatizado o fenômeno da descoerência para o caso de uma partícula livre se movendo em uma dimensão. Analisaremos a evolução do pacote de onda com o tempo ilustrando a perda de coerência do pacote em virtude das interações da partícula com um reservatório térmico. Para ilustrar a situação, apresentaremos resultados numéricos que simulam a evolução temporal da partícula em duas situações distintas: temperatura nula e temperatura finita, evidenciando a influência do meio na perda de coerência.

---

<sup>1</sup> Também chamada de interpretação ortodoxa.



# Abstract

The main goal of this work is an introductory study on the phenomenon of decoherence. This physical process can in principle explain how the classical world emerges from the quantum world. The understanding of the phenomenon of decoherence is very important not only for the quantum theory, but also for a philosophical discussion about our world vision. Since quantum mechanics has ensured its validity because of their correct predictions in an experimental setting, it remains unclear which of its possible interpretations is more appropriate. Most of the physics community are aligned to the Copenhagen interpretation, but that only means it has more followers. From the standpoint of the more applied areas of physics, the understanding of decoherence is also of vital importance for the development of nanotechnology, quantum computing, quantum cryptography and teleportation.

We will emphasize the phenomenon of decoherence for the case of a free particle moving in one dimension. We will review the evolution of the wave packet and will show its loss of coherence, since the particles interact with a thermal reservoir. To illustrate the situation, we present numerical results that simulate the evolution of the particle in two different situations: zero temperature and finite temperature.



## Capítulo 1

# Introdução e motivação

A Mecânica Quântica é amplamente utilizada e seus resultados são verificados experimentalmente com grande precisão. Por que uma teoria que considera com precisão tudo que nós podemos medir ainda carece de aprovação? Desde a sua origem, no início do século XX, ainda não existe um consenso sobre a melhor maneira de abordar os seus fenômenos, devido à sua inabilidade de fornecer uma explicação que nos pareça óbvia sobre o funcionamento do Universo. Afinal, não é de se esperar a sobreposição de um gato vivo e morto ou a sobreposição da lua em lugares diferentes do céu[1].

Grandes autores da teoria quântica como Bohr, Schrödinger e Einstein também tiveram problemas com o pensamento contraintuitivo que permeia esse mundo quântico[2]:

*Those who are not shocked when they first come across quantum theory can not possibly have understood it. Niels Bohr*<sup>1</sup>

*I do not like [Quantum Mechanics], and I am sorry I ever had anything to do with it. Erwin Schrödinger*<sup>2</sup>

*If [quantum theory] is correct, it signifies the end of physics as a science. Albert Einstein*<sup>3</sup>

Enquanto a teoria quântica foi originalmente concebida como uma teoria sobre átomos, esta tem demonstrado um aumento de aplicabilidade, fazendo ser cada vez mais evidente que o formalismo descreve algum tipo de verdade, e de que descreve propriedades gerais da Natureza. Sem o conhecimento da física quântica, não poderíamos explicar o comportamento dos sólidos, a função do DNA e sua estrutura, a cor das estrelas, a ação do laser, ou as propriedades de um superfluido[3].

---

<sup>1</sup> Aqueles que não ficam chocados quando se deparam pela primeira vez com a teoria quântica, provavelmente não a entenderam (tradução livre).

<sup>2</sup> Não gosto [de Mecânica Quântica], e sinto muito por ter tido alguma coisa a ver com isso (tradução livre).

<sup>3</sup> Se [a teoria quântica] está correta, isto significa o fim da física como uma ciência (tradução livre).

Estados dos sistemas quânticos são envolvidos de acordo com a equação linear determinística de Schrödinger.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad (1.1)$$

Ou seja, tal como para a Mecânica Clássica, dada pelo estado inicial do sistema e seu hamiltoniano  $H$ , que pode, a princípio, computar o estado em um tempo arbitrário [3]. Onde a função de onda  $|\psi\rangle$  está relacionada à probabilidade de achar a partícula num tempo  $t$  numa posição  $x$  (caso unidimensional). Obviamente, essa quantidade  $\psi$  sozinha não pode ser uma probabilidade, uma vez que esta é uma função complexa, e as probabilidades são reais e positivas. A probabilidade é proporcional a  $|\psi|^2$ . Numa certa região do espaço, essa probabilidade é a integral de  $\psi^*\psi$  sobre esta região [4].

A consistência dessa interpretação probabilística requer que a probabilidade de encontrar uma partícula em alguma região limitada diminua conforme o tempo passa, então a probabilidade de encontrar a partícula fora desta região deve aumentar proporcionalmente. A interpretação probabilística da onda  $\psi$  só pode ser consistente se a conservação da probabilidade for garantida. Essa exigência é cumprida, devido ao teorema de Gauss, uma vez que seja possível definir uma densidade de corrente de probabilidade  $\mathbf{j}$  que juntamente com a densidade de probabilidade  $\rho = \psi^*\psi$  satisfaça a equação contínua [4]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (1.2)$$

onde

$$\rho = \psi^*\psi \quad (1.3)$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi] \quad (1.4)$$

exatamente como no caso de conservação de matéria na hidrodinâmica ou na conservação de carga da eletrodinâmica. Daqui para frente, adotaremos sempre sistemas unidimensionais, de modo que o elemento de volume é simplesmente  $dx$ .

A distribuição da probabilidade integrada em todo o espaço é 1, ou seja, a função deve ser normalizada:

$$\int \rho dx = 1 \quad (1.5)$$

Sempre que esta integral existir, iremos assumir que esta normalização foi imposta. Uma vez que (1.5) existe, e se a densidade de probabilidade atual cai a zero mais rápido que  $x^{-2}$  para grandes valores de  $x$ , então o teorema de Gauss aplicado em (1.2) nos mostra que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho dx = 0. \quad (1.6)$$

A equação de Schrödinger garante a conservação da normalização, se  $\psi$  foi normalizado em  $t=0$ , continuará normalizado para todos os tempos [4].

A evolução determinística de  $\psi$  tem sido verificada cuidadosamente em experimentos controlados[3]. O mais curioso é que não existe nenhuma indicação de que exista um divisória entre o mundo quântico e o clássico onde a equação de Schrödinger seja inconsistente.

Um dos problemas centrais da interpretação quântica é o limite clássico, ou seja, seria a Mecânica Clássica de alguma maneira contida na Mecânica Quântica como um caso especial, similar ao limite para pequenas velocidade na Relatividade [1]. A aplicabilidade formal da Mecânica Clássica na teoria quântica é o principal assunto do princípio da correspondência [5] que foi enunciado por Bohr em 1923 [6].

O problema enfrentado aqui é o mesmo que usualmente enfrentamos numa situação onde uma teoria mais geral  $G$  e uma teoria mais especial  $S$  são conectadas por um parâmetro adimensional  $\delta$  [7]:

$$G \rightarrow S \text{ como } \delta \rightarrow 0. \quad (1.7)$$

No caso mais simples, quantidades em  $G$  são analíticas quando  $\delta = 0$ . Analisando o caso do limite clássico para a relatividade: Uma partícula com velocidade  $v$ , onde  $G$ = relatividade especial,  $S$  = física newtoniana e  $\delta = \frac{v^2}{c^2}$ .

Para o limite entre o mundo clássico e o quântico, a teoria geral é  $G$ = Mecânica Quântica, e a teoria especial é  $S$ = Mecânica Clássica, e o parâmetro é  $\delta =$  constante de Planck  $\hbar$ . A constante  $\hbar$  possui a dimensão correspondente a sua ação, desta forma se tivermos um parâmetro adimensional que depende de  $\hbar$ , como por exemplo o Hamiltoniano de uma

partícula, a constante de Planck carregará uma dependência da massa da partícula, em geral.

No limite  $\hbar \rightarrow 0$ , existem muitos resultados não analíticos. A interferência de dois feixes, por exemplo (como no experimento de duas fendas), a onda é uma superposição de feixes  $\psi_+$ , com momentum  $p$ , e  $\psi_-$ , com momentum  $-p$ :

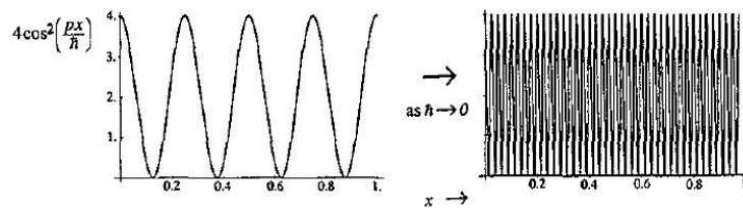
$$\psi_+ = \exp(ipx/\hbar), \quad \psi_- = \exp(-ipx/\hbar). \quad (1.8)$$

A intensidade, observável como a densidade de probabilidade da onda, é

$$|\psi_+ + \psi_-|^2 = 4\cos^2(px/\hbar). \quad (1.9)$$

No limite  $\hbar \rightarrow 0$  ocorrem problemas: a intensidade oscila infinitamente rápida e possui todos os valores entre 0 e 4 (Figura 1.1). Isto acontece porque temos uma singularidade em  $\hbar = 0$ . Somente após uma média sobre todos os  $\Delta x$  representando a impossibilidade prática de fazer medidas com precisão perfeita, podemos recuperar o resultado clássico [8], esperados na base do princípio da correspondência. Ou seja, a soma da intensidade de cada feixe:

$$1 + 1 = 2. \quad (1.10)$$



**Fig. 1.1:** Figura que demonstra o limite clássico para o experimento de duas fendas [7].

Por que nossas percepções geralmente tem tanta dificuldade de serem reconciliadas com as predições da equação de Schrödinger? O que ocorre é que quase toda condição inicial descrita por  $\psi$  envolve um estado contendo muitas alternativas que nunca são vistas coexistindo em nosso mundo. A raiz do nosso desconforto com essa teoria gira em torno dos conceito de estados, observável, medida e localidade.



A primeira explicação amplamente aceita de como um único resultado surge de múltiplas possibilidades foi a interpretação de Copenhagen proposta por Niels Bohr (1928), que insistia que um aparelho clássico é necessário para realizar medidas [3]. Pois para Bohr nossa mente funciona classicamente, e os conceitos que entendemos e podemos comunicar são clássicos, de forma que qualquer teoria científica deve ser formulada em termos clássicos. Dessa forma, Bohr argumenta que o aparelho de medida tem que ser clássico, já que seus resultados devem ser passíveis de compreensão e comunicação. A base da interpretação de Copenhagen é a linha que divide o mundo clássico e quântico. Bohr enfatizou que a divisória deve ser móvel, de forma que até o aparelho mais moderno -que é o sistema nervoso- pode a princípio ser medido e analisado como um objeto quântico, desde que um dispositivo apropriado fosse encontrado pra realizar essa função.

O problema da medida, a indeterminância das informações estatísticas da teoria quântica, perturba os físicos e os filósofos. Na visão ortodoxa, ou seja, na interpretação de Copenhagen, se queremos saber a posição da partícula anteriormente de tê-la medido em um determinado ponto, concluímos que a partícula poderia estar em qualquer lugar antes da medida. Foi o ato desta medida que forçou a partícula a tomar uma posição. O ato de medir alterou radicalmente a função de onda, que é o mesmo que dizer que a função de onda colapsou. Se fizermos uma segunda medida rapidamente, encontraremos a partícula na mesma posição anterior [22]. Com esse postulado do colapso, acaba não se discutindo muito sobre a divisória clássico-quântica.

A interpretação de Copenhagen passou a ser considerada a interpretação oficial da Mecânica Quântica [2]. Após isso, a maioria da comunidade física se preocupou mais em aplicar a teoria aos mais variados domínios e testá-la experimentalmente a partir do algoritmo mínimo de produção de resultados que todos concordavam, do que investigar questões fundamentais a respeito desse algoritmo. É importante ressaltar que os principais idealizadores da interpretação de Copenhagen em suas diversas variantes (Bohr, Heisenberg, Dirac, Von Neumann, Pauli, etc) não compartilhavam dessa visão imediatista. Eles tinham perfeita noção da profundidade das questões que estavam em jogo e que a abordagem de questões filosóficas e de linguagem sobre a física quântica eram essenciais para que a teoria fizesse algum sentido.

Felizmente, alguns grandes físicos continuaram buscando entender mais profundamente os fenômenos quânticos, produzindo artigos cruciais para o desenvolvimento da teoria quântica [2]:

i. Einstein, Podolski e Rosen, questionando a completeza da Mecânica Quântica em 1935

[9];

ii. Schrödinger, levantando seu famoso paradoxo do gato a respeito do problema da interferência quântica em objetos macroscópicos, também em 1935 [10];

iii. Bohm, propondo uma teoria não local de variáveis escondidas para a Mecânica Quântica a partir das ideias de de Broglie em 1952 [11];

iv. Everett, introduzindo a interpretação de vários mundos em 1957 [12];

v. Bell, apresentando as famosas desigualdades de Bell em 1964 [13];

Esses artigos estão sendo levados cada vez mais a sério devido a resultados experimentais concretos[2]. Boa parte disso se deve ao desenvolvimento tecnológico que propiciou o desenvolvimento de experimentos cruciais que vem se aprimorando a cada ano. Um bom exemplo disso é a observação do fenômeno de descoerência, assunto enfatizado nesse trabalho.

## 1.1 Sobre Descoerência

Já que as interpretações da Mecânica Quântica vão contra nossas intuições, onde está a divisão entre os dois conceitos cinéticos quântico e clássico? Se existe essa divisão, qual seria a estrutura precisa entre esses dois mundos? Essa transição é suave e sutil ou envolve uma mudança rápida e drástica de concepções [1]? Essas dúvidas que permeiam a mente humana quando se trata de panoramas tão diferentes podem ser entendidas ao se estudar o fenômeno da descoerência.

Descoerência é o processo físico responsável pelo surgimento do mundo clássico a partir do mundo quântico, ou seja, especialmente responsável pela destruição do padrão de interferência[1], [14], [15]. As principais questões que envolvem esse assunto podem ser colocadas, de maneira mais simples, nas perguntas: qual é a origem da descoerência e qual é a escala de tempo com que a coerência desaparece. A conservação da coerência é um elemento essencial para experimentos que dependem da obtenção e da manutenção de estados emaranhados [16] como o teletransporte quântico [17], informação quântica e computação quântica [18],[19], uma vez que as superposições são muito sensíveis a descoerência [15]. Estes são tópicos que estão na frente das pesquisas que adotam Mecânica Quântica e ciência da informação [1].

Objetivando entender o fenômeno com profundidade, muita atenção tem sido dada ao caso da partícula livre interagindo com um reservatório térmico [15],[20]. A maioria dessas investigações tem assumido que o emaranhamento com o reservatório acontece em algum

tempo inicial, levando a conclusão de que um meio dissipativo é necessário para atingir a descoerência [15]. Porém, pode-se mostrar no caso de emaranhamento com o reservatório em todos os tempos, que a descoerência pode ocorrer simplesmente devido aos efeitos de temperatura sem exigir processos dissipativos, ou seja, que a descoerência pode acontecer independentemente da intensidade do acoplamento com o meio[20],[14], [15].

Neste trabalho, estudaremos a situação em que a partícula livre perde coerência, quando não há mecanismos de dissipação de energia. Primeiramente, analisaremos um partícula livre se movendo em uma dimensão. A partícula é colocada em um estado inicial de superposição (estado gato de Schrödinger), correspondendo a dois pacotes de onda separados. Ilustraremos a descoerência através de simulações computacionais. A escolha deste caso é motivada pelo fato de poder descrever o padrão de interferência que aparece no experimento de fenda dupla de Young[21], que envolve feixe de partículas passando através de duas fendas separadas, estes feixes de partículas em algum momento interferem, como fossem ondas.

Será observada também nessas simulações o espalhamento dos pacotes de onda com o tempo. De fato, o efeito da descoerência é fazer com que o pacote de onda inicial se espalhe no tempo, com um decrescimento concomitante com a amplitude, consistente com o fato que a probabilidade é constante no tempo [15], como mostrado anteriormente (1.6).



## Capítulo 2

# A Partícula Livre

Neste capítulo, será examinado brevemente as ferramentas e alguns conceitos da Mecânica Quântica que são necessárias para a dedução da evolução do pacote de onda para uma partícula livre. O entendimento de todos os conceitos que serão apresentados são de fundamental importância no estudo da descoerência para o caso de uma partícula livre, cujo estado inicial é de uma superposição correspondente a dois pacotes de onda gaussianos, cada um com variância  $\sigma^2$  e separados por uma distância  $d$ .

### 2.1 A Dualidade Onda-Partícula

Louis de Broglie intrigou a comunidade científica ao ir além de Einstein, que introduziu o conceito de fóton no trabalho do efeito fotoelétrico [23], quando fez a observação de que a dualidade onda-partícula não é um fenômeno que só ocorre com a luz. Essa dualidade é uma característica universal da matéria que se torna evidente em sistemas em que a magnitude da constante  $h$  (constante de Planck) não pode ser desprezada (partículas, átomos, moléculas...). Desta forma, de Broglie ressaltou a natureza ondular da matéria, ou seja, que em certos experimentos o feixe de partículas com massa se comporta como onda, sofrendo fenômenos de interferência e difração, agindo de forma semelhante à da luz [4]. Foram observadas propriedades ondulatórias também em objetos mais pesados como átomos e moléculas [4].

Com a constatação dessa dualidade, experimentos onde partículas sofreram difração e interferência mostraram que ondas planas harmônicas infinitas associadas com o movimento de uma partícula livre (potencial  $V = 0$ ) com momentum linear  $\mathbf{p}$ , se propagam na direção do seu movimento e que seu comprimento de onda (comprimento de onda de de Broglie) é dado por [4]

$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

onde  $E$  é a energia cinética da partícula.

Essa relação estabelece um contato entre o conceito de onda e de partícula, associando o comprimento de onda com o momentum da partícula.

O fato da constante de Planck  $h$  ser finita tem um papel fundamental: se  $h$  fosse zero não importaria o momentum da partícula: a onda associada corresponderia sempre  $\lambda = 0$  e valeriam as leis da Mecânica Clássica. Ou seja, a partícula livre não seria difratada, mas seguiria sua trajetória em linha reta.

Formulando isto mais precisamente: se  $x$  é uma dimensão característica de um corpo com momentum  $p$ , o aspecto ondulatório da matéria se ocultará de nossa visão se [4]

$$\frac{\lambda}{x} = \frac{h}{xp} \ll 1$$

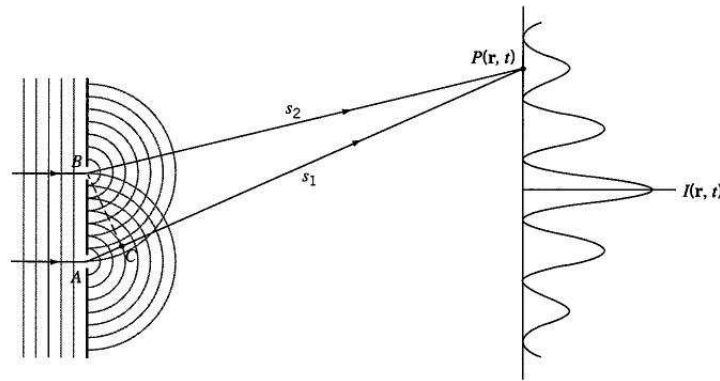
ou seja, se a ação quântica de  $h$  é desprezível em relação a  $xp$ . Desta forma, corpos macroscópicos, aos quais empregamos a Mecânica Clássica, satisfazem a condição  $xp \gg h$ .

A relação de de Broglie foi citada muito vagamente acima, quando dizemos que esta relaciona os cenários de onda e de partícula. Os conceitos de onda e de partícula quando empregados na mesma partícula, como por exemplo o elétron, se tornam incompatíveis, a menos que alguns conceitos tradicionais da física clássica sejam modificados numa certa extensão. Tradicionalmente, quando se fala de partícula queremos tratar de um objeto com posição definida no espaço, localizado. Porém, no caso ondulatório é diferente, a onda se estende por todo o espaço sendo caracterizada por não ter uma localização ou posição bem definida. Historicamente, a necessidade de uma reconciliação de dois conceitos visivelmente contraditórios como o de onda e de partícula foram todos enfatizados por Bohr, que na tentativa de interpretar as proposições da Mecânica Quântica acabou formulando o princípio da complementaridade [4]. Neste princípio os conceitos de onda e partícula não são contraditórios e sim complementares. Isto significa que a natureza corpuscular e ondulatória são ambas detectáveis separadamente e surgem de acordo com o tipo de experiência. Assim, na experiência da dupla fenda, a natureza evidenciada da luz é ondulatória, ao passo que no experimento do efeito fotoelétrico, a natureza ressaltada é a corpuscular.

## 2.2 A função de Onda e o Experimento de Duas Fendas

A função de onda  $\psi(x, t)$  é a amplitude de probabilidade na mecânica quântica, a qual descreve o estado quântico de uma partícula ou de um sistema de partículas. Na física óptica, padrões de interferência são produzidos pela superposição de ondas de campo elétrico  $\mathbf{E}$  e campo magnético  $\mathbf{B}$  e as intensidades das franjas são medidas por  $|\mathbf{E}|^2$  e  $|\mathbf{B}|^2$ . Em analogia a essa situação, Max Born (1926) postulou que as quantidades positivas  $|\psi(x, t)|^2$  medem a probabilidade de encontrar a partícula na posição  $x$  num tempo  $t$  (caso unidimensional) [4].

Um dos experimentos mais famosos que relaciona esse comportamento ondulatório da matéria é o experimento de duas fendas (Figura 2.1)[24]. Nesse experimento, um grande número de partículas independentes é lançado na direção das duas fendas e após passarem por estas são detectados numa tela. O padrão de interferência mostrado esquematicamente na Figura 2.1 é o resultado estatístico dessas muitas partículas depositadas nessa tela. Cada partícula é sujeita à efeitos de interferência de onda. Mas o mais intrigante é que algumas destas, ao serem encontradas na tela, estão em locais que não poderiam ser alcançados se tivessem se movido através de caminhos clássicos pela fenda. A aparência das franjas de interferência depende da passagem da onda através das duas fendas ao mesmo tempo. Como acontece no caso de uma onda de luz que passa através das duas fendas, em analogia ao experimento de interferência óptico de Young. Se a onda descreve o comportamento de uma única partícula, segue que não podemos decidir através de qual das duas fendas a partícula passou. Se tentarmos evitar essa consequência determinando experimentalmente com algum dispositivo de monitoramento sutil, através de qual fenda a partícula passou, mudamos a onda drasticamente e destruimos o padrão de interferência. Uma partícula agora segue, definitivamente, através de uma fenda ou da outra, e o acúmulo de um grande número de partículas na tela irá resultar em dois traços bem definidos. Exatamente o mesmo traço é obtido se bloquearmos uma fenda em um dado tempo. Desta forma pré determinaremos o caminho da partícula. As condições sob as quais o padrão de interferência é produzido proibem a determinação da fenda pela qual a partícula passou. Esse experimento de duas fendas idealizado ilustra muito bem o indeterminismo que a visão probabilística atribui à natureza.



**Fig. 2.1:** Diagrama esquemático da geometria de um experimento de duas fendas [4].

Esse experimento de interferência não fornece nenhuma informação detalhada e direta sobre a dependência no espaço e no tempo da perturbação periódica que causa as franjas pretas e brancas, que aparecem alternadamente. A comparação que fizemos com a interferência óptica sugere que o padrão das franjas surge de uma superposição linear de duas ondas.

Ou seja, matematicamente a idéia de superposição linear de duas ondas  $\psi_1(x, t)$  e  $\psi_2(x, t)$ , corresponde que  $\psi(x, t) = \psi_1 + \psi_2$  também descreve uma situação física possível. Esse é conhecido com o Princípio da Superposição que é ilustrado no experimento de interferência da Figura 2.1. A intensidade produzida na tela, quando se abre apenas uma fenda, é  $|\psi_1|^2$  ou  $|\psi_2|^2$ . Quando as duas fendas são abertas, a intensidade é determinada por  $|\psi_1 + \psi_2|^2$ . Essa intensidade para as duas fendas é diferente da soma das duas intensidade,  $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$ , por causa do termo de interferência  $\psi_1\psi_2^* + \psi_2\psi_1^*$ .

### 2.3 O Pacote de Onda e o Princípio da Incerteza

Será descrito o movimento da partícula livre ( $V(x) = 0$ ) se movendo na direção  $x$  positiva ou negativa, com momentum  $p = \hbar k$ , e será utilizado o tipo mais simples de movimento de onda que é o de uma onda plana infinita harmônica propagando-se na direção  $x$  positiva ou negativa, com comprimento de onda  $\lambda = 2\pi/k$  e com frequência  $\omega$ . Essa onda plana, que se propaga em uma direção arbitrária, tem a forma

$$\psi_k(x, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} \tag{2.1}$$



onde  $\mathbf{k} = \pm k$  e  $A$  é a constante de normalização.

Ao normalizarmos (2.1),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^* \psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rightarrow \infty \quad (2.2)$$

vemos que essa função não é normalizável. No caso da partícula, as autofunções não representam estados físicos concebíveis. Ou seja, uma partícula livre não pode existir num estado estacionário [22].

A função de onda  $\psi(x, t)$  tem como objetivo descrever, pelo menos aproximadamente, o movimento clássico de uma partícula que tem simultaneamente uma posição e um momento definido, de maneira razoável. A onda plana (2.1) corresponde ao movimento de partícula com momentum  $p = \hbar k$ ; mas tem amplitudes  $|\psi| = \text{constante}$  para todos os valores de  $x$  e  $t$ , a onda plana harmônica infinita (2.1) deixa a posição da partícula totalmente indefinida. Pela superposição de várias ondas planas diferentes, um certo grau de localização pode ser atingido, como as franjas na tela de detecção do experimento de interferência mostram.

A ferramenta matemática para a síntese de um pacote de onda compacto, dado pela superposição de ondas planas com diferentes números de onda  $k$ , é a análise de Fourier [4]. Como tratamos do caso unidimensional, apenas a coordenada espacial  $x$  deve ser considerada, de forma que se pode escrever

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} dk \quad (2.3)$$

e a fórmula inversa

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} dx \quad (2.4)$$

Desta forma,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk. \quad (2.5)$$

Assumindo que  $\phi(\mathbf{k})$  é uma função real positiva que tem uma distribuição simétrica de  $k$  em torno do valor médio  $\bar{k}$  [22],

$$\phi(k) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \frac{\sin(ka)}{k} \quad (2.6)$$

onde  $a$  é um valor ajustável.

Substituindo (2.6) na equação (2.5)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(ka)}{k} e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (2.7)$$

Pode-se ver essa integral na Figura 2.2.

Explorando os limites, podemos obter algumas conclusões interessantes. Se  $a$  é muito pequeno, a função de onda inicial é bem localizada (Figura 2.3(a)). Nesse caso podemos usar um pequeno ângulo e aproximarmos  $\sin ka \approx ka$ , e assim

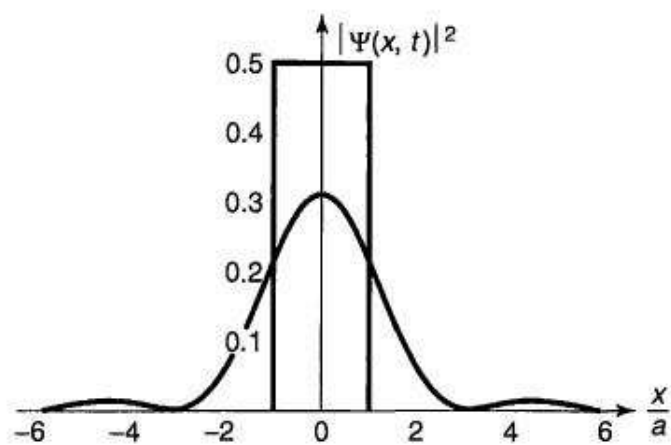
$$\phi(k) \approx \sqrt{\frac{a}{\pi}};$$

é constante, uma vez que o  $k$  é cancelado (Figura 2.3(b)). Esse exemplo tem o objetivo de ilustrar o princípio da incerteza: se a largura da posição é pequena, a partícula é bem localizada, então a largura do momentum (e no  $k$ , pela relação de de Broglie) deve ser grande, bem indefinida.

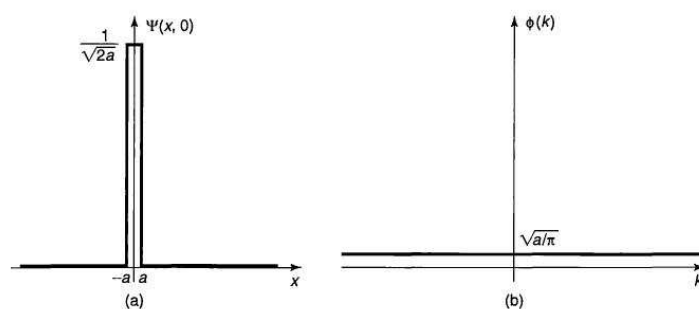
No outro extremo, quando  $a$  tem valores grandes, a posição da partícula é bem alargada, indefinida, e

$$\phi(k) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\sin(ka)}{ka}.$$

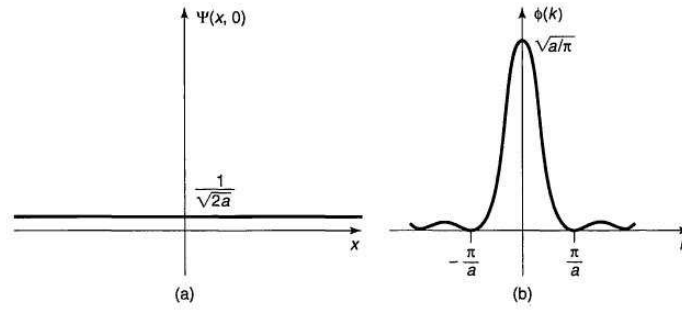
Uma vez que,  $\sin z/z$  tem seu máximo em  $z = 0$ , e cai à zero em  $z = \pm\pi$ . Então para grandes valores de  $a$ ,  $\phi(k)$  é bem definido em  $k = 0$  (Figura 2.4(b)). Ou seja, um momentum bem definido, enquanto a posição é indeterminada.



**Fig. 2.2:** Gráfico de  $|\psi(x, t)|^2$  (Equação 2.6) em  $t=0$  (retângulo) e quando  $t = \frac{ma^2}{\hbar}$  (curva) [22].



**Fig. 2.3:** Para pequenos valores do parâmetro  $a$ . (a) Gráfico de  $\psi(x, 0)$ . (b) Gráfico de  $\phi(k)$  [22].



**Fig. 2.4:** Para grandes valores do parâmetro  $a$ . (a) Gráfico de  $\psi(x, 0)$ . (b) Gráfico de  $\phi(k)$  [4].

O princípio da Incerteza é dado por

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \tag{2.8}$$

ou equivalentemente, visto que  $p = \hbar k$

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{2.9}$$

Pode-se concluir que se pode ver um pico em  $|\psi|^2$  como uma partícula bem localizada, e um pico em  $|\phi|^2$  como uma partícula movendo-se com uma velocidade aproximadamente definida. O princípio da incerteza (2.8 e 2.9) limita a precisão com que podemos atribuir simultaneamente valores à posição e ao momentum da partícula. Geralmente, as duas quantidades juntas são vagas e indeterminadas. Desta forma enquanto  $|\psi(x)|^2$  é proporcional a probabilidade de encontrar a partícula numa posição  $x$ ,  $|\phi(k)|^2$  é proporcional a probabilidade de encontrar a partícula com um momentum  $\hbar k$  [22].

## 2.4 O Movimento do Pacote de Onda

Consideremos um pacote de onda cuja inversa de Fourier  $\phi(k)$  é diferente de zero apenas no intervalo limitado de  $\Delta \mathbf{k}$  próximo do vetor de onda médio  $\hbar \bar{\mathbf{k}}$ . Na coordenada espacial  $x$ , o pacote de onda  $\psi(x, t)$  deve se mover aproximadamente como uma partícula livre clássica com momentum médio  $\hbar \bar{\mathbf{k}}$ . Para ver esse comportamento expandimos  $\omega(\bar{\mathbf{k}})$  em relação a  $\bar{\mathbf{k}}$  e desconsideramos os termos de segunda ordem [4]:

$$\begin{aligned}\omega(\mathbf{k}) &= \omega(\bar{\mathbf{k}}) + (\mathbf{k} - \bar{\mathbf{k}}) \cdot (\nabla_{\mathbf{k}}\omega)_{\mathbf{k}=\bar{\mathbf{k}}} + \dots \\ &= \bar{\omega} + (\mathbf{k} - \bar{\mathbf{k}}) \cdot \nabla_{\bar{\mathbf{k}}}\bar{\omega} + \dots\end{aligned}\quad (2.10)$$

Se substituirmos os primeiros dois termos dessa expansão em (2.5), obteremos

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp(-i\bar{\omega}t + i\bar{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\bar{\mathbf{k}}}\bar{\omega}t)\psi(\mathbf{x} - \nabla_{\bar{\mathbf{k}}}\bar{\omega}t, 0) \quad (2.11)$$

Ignorando o primeiro fator da multiplicação na equação (2.11), o fator de fase, veremos que a equação (2.10) descreve um pacote de onda realizando um movimento translacional uniforme, sem nenhuma mudança em seu formato e com a velocidade de grupo [4]:

$$\mathbf{v}_g = \nabla_{\bar{\mathbf{k}}}\bar{\omega} \quad (2.12)$$

O Teorema de Ehrenfest (1927) mostra que os valores médios das quantidades da Mecânica Quântica se comportam como as quantidades [26]:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \int \psi^* x \psi &= \frac{1}{m} \int \psi^* p \psi, \\ \frac{d}{dt} \int \psi^* p \psi &= - \int \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi.\end{aligned}$$

Baseando-se na correspondência entre a mecânica clássica e quântica mostrada neste Teorema, indentificamos a onda  $\psi$  como uma partícula com velocidade média  $\hbar\mathbf{k}/m$ , onde  $m$  é a massa da partícula. Já que essa relação deve funcionar para um valor arbitrário de  $\mathbf{k}$  e uma vez que o movimento é não-relativístico

$$m\nabla_{\mathbf{k}}\omega = \hbar\mathbf{k} \quad (2.13)$$

Integrando (2.13), obtemos

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2m}k^2 + const. \quad (2.14)$$

ou

$$\hbar\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \frac{p^2}{2m} + V \quad (2.15)$$

Como para a partícula livre  $V = 0$ , encontra-se que

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (2.16)$$

## 2.5 O Espalhamento do Pacote de Onda

Como foi demonstrado anteriormente, desprezando-se os termos quadráticos e de ordens superiores, o pacote de onda se propaga de maneira uniforme e sem mudanças em sua forma. Considerando os termos de segunda ordem, observaremos um dos fenômenos mais importantes e interessantes para o estudo do pacote de onda, que é seu espalhamento com o decorrer do tempo.

Considerando os outros termos, a expansão (2.10) teremos:

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \bar{k}^2}{2m} + \frac{\hbar \bar{\mathbf{k}}}{m} \cdot (\mathbf{k} - \bar{\mathbf{k}}) + \frac{\hbar}{2m} (\mathbf{k} - \bar{\mathbf{k}})^2 \quad (2.17)$$

Considerando um pacote de onda onde  $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{x}}$ , o termo de segunda ordem desprezado em (2.10) multiplicado por  $t$ , é dado por

$$\frac{\hbar}{2m} (k - \bar{k})^2 t = \frac{\hbar}{2m} (\Delta k)^2 t = \frac{(\Delta p)^2}{2m\hbar} t \quad (2.18)$$

Esse termo contribui no expoente do integrando de (2.5). Um expoente pode ser rejeitado apenas se for muito menor que uma unidade em valor absoluto. Dessa forma, para partículas não-relativísticas, o pacote de onda se move sem nenhuma mudança apreciável na forma apenas para tempos  $t$  dados pela condição [4]

$$|t| \ll \frac{m\hbar}{(\Delta p)^2} \quad (2.19)$$

ou

$$|t|\Delta v = \frac{\Delta p}{m}|t| \ll \frac{\hbar}{\Delta p} \cong \Delta x \quad (2.20)$$

O produto  $|t|\Delta v$  representa uma incerteza na posição, no tempo  $t$ , e é atribuída ao espalhamento na velocidade inicial. Se  $|t|$  aumenta muito em seu valor, a condição (2.19)

é violada, a contribuição de segunda ordem não pode ser desprezada, e o pacote de onda é alargado, de modo que, para grandes valores de  $|t|$ :

$$\Delta x(t)\Delta k > 1 \quad (2.21)$$

Isso significa que se  $t$  aumenta de um passado distante ( $t \rightarrow -\infty$ ) para um futuro remoto ( $t \rightarrow +\infty$ ), o pacote de onda primeiro contrai e eventualmente se espalha.

## 2.6 Caso da Partícula num Estado Inicial de Superposição

Após uma introdução sobre a descrição da partícula livre, como um pacote de onda e sua evolução com o tempo, iremos nos deter ao caso de uma partícula se movendo em uma dimensão colocada em um estado inicial de superposição correspondente a dois pacotes de onda gaussianos separados por uma distância  $d$ . Essa função de onda no instante inicial, possui a seguinte forma [20]:

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) = & \frac{1}{[2(1 + e^{-d^2/8\sigma^2})]^{1/2}} \\ & \times \left( \frac{\exp \left\{ \frac{-(x-d/2)^2}{4\sigma^2} + i \frac{mv}{\hbar} x \right\}}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \right. \\ & \left. + \frac{\exp \left\{ \frac{-(x+d/2)^2}{4\sigma^2} + i \frac{mv}{\hbar} x \right\}}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \right), \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde  $\sigma$  é a largura de cada pacote,  $d$  é a separação entre os centros dos dois pacotes e  $v$  é a velocidade da partícula.

Pode-se mostrar que o pacote (2.22) está normalizado, uma vez que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = 1 \quad (2.23)$$

onde  $|\psi(x, 0)|^2 = \psi(x, 0)^* \psi(x, 0)$ .

Resolvendo a Equação de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad (2.24)$$

com esse estado inicial. A solução geral é [4]

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \exp\left\{-\frac{m(x-x')^2}{2i\hbar t}\right\} \psi(x', 0). \quad (2.25)$$

Portanto, usando (2.22) obtemos [20]

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{e^{i(mv/\hbar)x - i(mv^2 t/2\hbar)}}{[2(1 + e^{-d^2/8\sigma^2})]^{1/2}} \\ &\times \left( \frac{1}{[2\pi(\sigma + \frac{i\hbar t}{2m\sigma})^2]^{1/4}} \right. \\ &\times \exp\left\{-\frac{(x - d/2 - vt)^2}{4\sigma^2(1 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma^2})}\right\} \\ &+ \frac{1}{[2\pi(\sigma + \frac{i\hbar t}{2m\sigma})^2]^{1/4}} \\ &\left. \times \exp\left\{-\frac{(x + d/2 - vt)^2}{4\sigma^2(1 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma^2})}\right\} \right). \quad (2.26) \end{aligned}$$

Então, a distribuição de probabilidade,  $P(x; t) = |\psi(x, t)|^2$  [20]

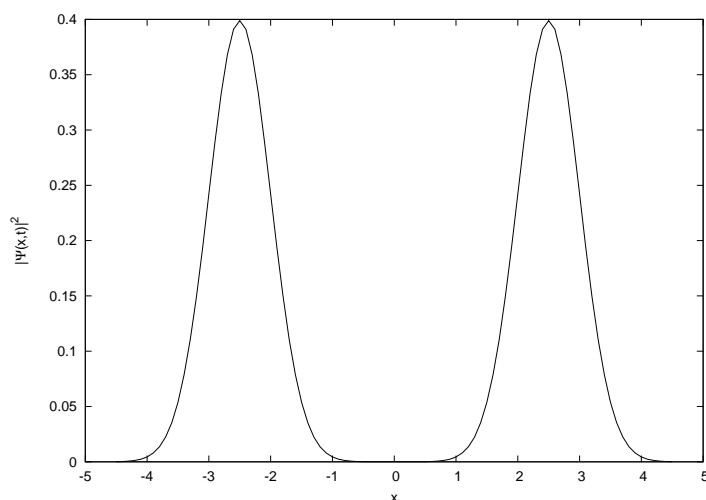
$$\begin{aligned} P(x; t) &= \frac{1}{2(1 + e^{-d^2/8\sigma^2}) \sqrt{2\pi(\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma^2})}} \\ &\times \left( \exp\left\{\frac{-(x - d/2 - vt)^2}{2(\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma^2})}\right\} \right. \\ &+ \exp\left\{\frac{-(x + d/2 - vt)^2}{2(\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma^2})}\right\} \\ &+ 2 \exp\left\{\frac{-(x - vt)^2 + d^2/4}{2(\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma^2})}\right\} \\ &\left. \times \cos \frac{\hbar t d(x - vt)}{4m\sigma^2(\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma^2})} \right). \quad (2.27) \end{aligned}$$



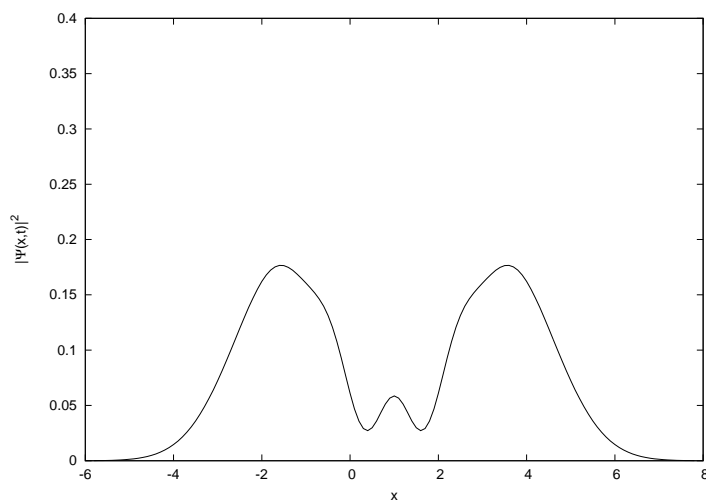
## 2.7 Descoerência no Caso de Temperatura Nula

No pacote inicial (2.22) consideramos um meio com temperatura nula. Se a descoerência é entendida como os efeitos que um reservatório produz, em princípio, não era para se observar nenhuma mudança na coerência dos dois pacotes, uma vez que não há influências do reservatório onde se encontram ( $T=0$ ).

Simulamos a evolução da distribuição de probabilidade (2.27) numericamente utilizando os valores adimensionais  $m = 1$ ,  $\hbar = 1$ ,  $d = 5$ ,  $\sigma = 0.5$



**Fig. 2.5:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0$*



**Fig. 2.6:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.4$*

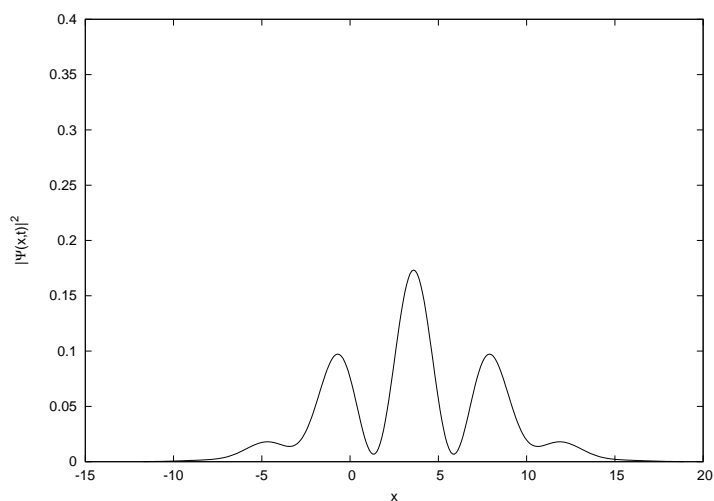


Fig. 2.7: Distribuição de Probabilidade para  $t=0.8$

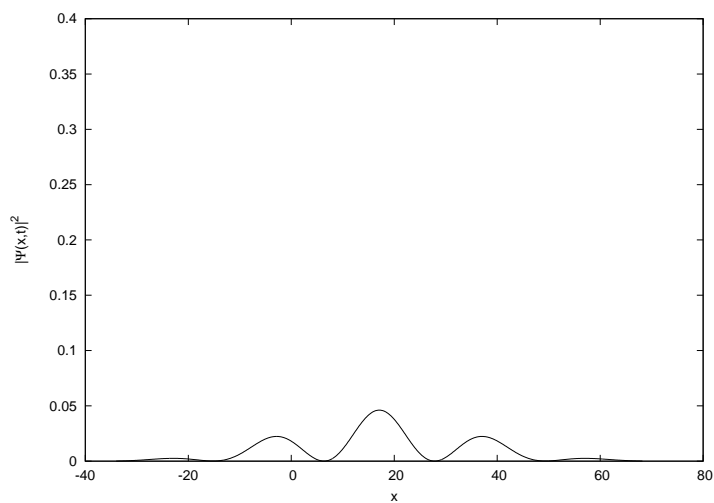
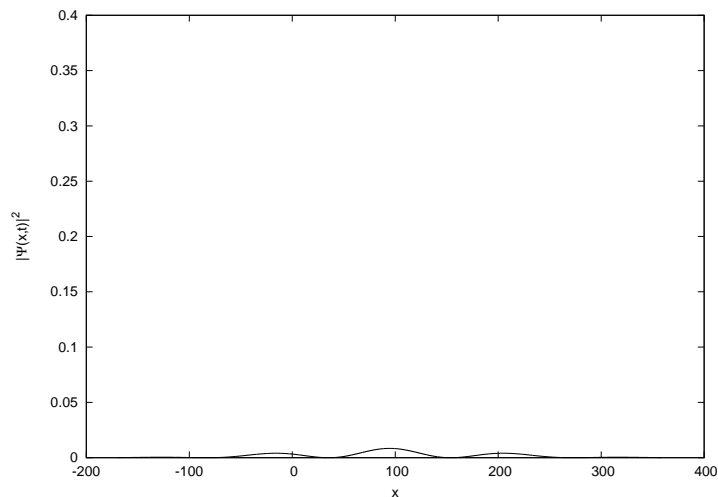


Fig. 2.8: Distribuição de Probabilidade para  $t=1.8$



**Fig. 2.9:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=4.3$*

Observando a evolução do pacote percebemos que inicialmente os dois pacotes, que estão se propagando separadamente, começam a interferir. A interferência deve-se ao terceiro fator de (2.26), os termos de interferência tem como característica marcante a presença do cosseno.

A descoerência geralmente é descrita como o desaparecimento do termo de interferência com o tempo [1]. Porém, isso não é totalmente correto uma vez que a probabilidade integrada de cada um dos três termos em (2.27) é constante no tempo [15]. De fato, o efeito da descoerência é o espalhamento no tempo, como podemos notar nas Figuras 2.5, 2.6, 2.7, 2.8 e 2.9. Com um decrescimento concomitante em sua amplitude, consistente com o fato de que sua probabilidade integrada é constante no tempo. Desta forma notamos que a descoerência é independente do acoplamento com o meio [14], [15], [20]. O problema deriva do fato de que o pacote de onda para a partícula livre se espalha naturalmente com o tempo, um resultado padrão da mecânica quântica (seção 2.5). No capítulo seguinte, faremos a comparação entre este caso com o de uma partícula num reservatório e definiremos melhor a descoerência.



## Capítulo 3

# Partícula Livre em Equilíbrio Térmico a uma Temperatura T

Esse capítulo tem como objetivo introduzir às propriedades físicas de uma partícula livre em equilíbrio térmico com um reservatório a uma temperatura T.

### 3.1 Operador Densidade

Na prática um sistema não é sempre especificado perfeitamente. Um exemplo disto é quando átomos num feixe são emitidos a uma temperatura T, onde a energia cinética dos átomos é conhecida apenas estatisticamente. O problema colocado pela física quântica é o seguinte: como podemos incorporar no formalismo a informação incompleta que temos sobre o estado do sistema, de maneira que nossa predição use o máximo dessa informação parcial? Para isto, teremos que introduzir uma ferramenta matemática muito prática, o operador densidade, que facilita as aplicações simultâneas dos postulados da mecânica quântica com os resultados dos cálculos probabilísticos.

O operador densidade  $\hat{\rho}(t)$  contém todas as informações possíveis sobre o estado de um sistema quântico [27]. É um operador Hermitiano positivo definido [27]. Ou seja, o operador é positivo se e somente se todos os seus autovalores forem reais e não-negativos.

Se nós sabemos o operador densidade,  $\hat{\rho}(t)$ , para um sistema, podemos usar esse para obter o valor esperado de qualquer observável  $\hat{O}$  num tempo t. O valor esperado é definido como

$$\langle O(t) \rangle = Tr \hat{O} \hat{\rho}(t), \quad (3.1)$$

onde Tr é o traço da matriz. O operador densidade é normalizado, desta forma,

$$\text{Tr}\hat{\rho}(t) = 1. \quad (3.2)$$

Nas equações (3.1) e (3.2), o traço pode ser obtido usando qualquer conjunto de estados completos. Por exemplo, poderíamos usar os autoestados do operador  $\hat{O}$ , ou qualquer outro operador Hermitiano,  $\hat{A}$ , que pode comutar ou não com o operador  $\hat{O}$ . Deixaremos  $|o_i\rangle$  e  $|a_i\rangle$  denotar todo o conjunto ortonormal dos autoestados dos operadores,  $\hat{O}$  e  $\hat{A}$ , respectivamente, e faremos com que  $o_i$  e  $a_i$  corresponderem ao conjunto de autovalores ( $\hat{O}|o_i\rangle = o_i|o_i\rangle$  e  $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ ). Por simplicidade usamos a notação de Dirac. O traço pode ser avaliado em qualquer uma dessas duas bases. Desta forma, podemos escrever:

$$\langle O(t) \rangle = \sum_i o_i \langle o_i | \hat{\rho}(t) | o_i \rangle = \sum_i \sum_j \langle a_i | \hat{O} | a_j \rangle \langle a_j | \hat{\rho}(t) | a_i \rangle, \quad (3.3)$$

onde  $o_i = \langle o_i | \hat{O} | o_i \rangle$  e usamos a relação de completude  $\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = \hat{1}$ , onde  $\hat{1}$  é o operador unidade. O elemento diagonal da matriz,  $\langle o_i | \hat{\rho}(t) | o_i \rangle$  ( $\langle a_i | \hat{\rho}(t) | a_i \rangle$ ), fornece a probabilidade de encontrar o sistema no estado  $|o_i\rangle$  ( $|a_i\rangle$ ), num tempo t. A matriz densidade é uma matriz Hermitiana positivo definida. Os elementos que estão fora da diagonal da matriz,  $\langle a_j | \hat{\rho}(t) | a_i \rangle$  para  $i \neq j$ , não podem ser interpretados como uma probabilidade.

A introdução do operador densidade permite uma descrição mais geral do sistema quântico do que a equação de Schrödinger descreve [27]. Como principal objetivo, veremos que esse operador também pode descrever estados de equilíbrio de sistemas de muitos corpos. Para o entendimento deste é necessário saber distinguir entre estados puros e estados misturados.

Considerando um sistema quântico no estado  $|\psi(t)\rangle$ , onde sua evolução é prescrita pela equação de Schrödinger (1.1), o operador densidade que descreve este estado puro é simplesmente:

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (3.4)$$

Um estado misturado é definido por:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|, \quad (3.5)$$

onde  $p_i$  é a probabilidade de estar no estado  $|\psi_i(t)\rangle$ , e cada estado  $|\psi_i(t)\rangle$  satisfaz equação (1.1).

## 3.2 Aplicações do Operador Densidade: Sistema em Equilíbrio Termodinâmico

Um sistema em equilíbrio termodinâmico com um reservatório a uma temperatura absoluta T pode ser descrito pelo operador densidade:

$$\hat{\rho} = Z^{-1} e^{-\frac{\hat{H}}{kT}} \quad (3.6)$$

onde  $\hat{H}$  é o operador Hamiltoniano do sistema,  $k$  é a constante de Boltzmann, e  $Z$  é a função de partição que é um coeficiente de normalização escolhido para fazer com que o traço de  $\rho$  seja 1:

$$Z = Tr \left\{ e^{-\frac{\hat{H}}{kT}} \right\} \quad (3.7)$$

Para a partícula livre

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \quad (3.8)$$

## 3.3 Distribuição de Maxwell- Boltzmann

Como consideramos até agora um sistema termodinâmico simples em contato com um reservatório térmico, estamos trabalhando com um ensemble canônico, conforme a mecânica estatística. Utilizando esse formalismo podemos facilmente obter a distribuição de Maxwell-Boltzmann para a distribuição de probabilidade para uma distribuição térmica de velocidades [28]. Como a função de partição  $Z$  (3.7) se fatoriza, a probabilidade canônica de se encontrar uma partícula, que está em contato com um reservatório a temperatura T, com velocidade entre  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$  deve ser dada por

$$p(\mathbf{v})d\mathbf{v} = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\beta\mathbf{p}^2}{2m}\right) d\mathbf{p}, \quad (3.9)$$

onde

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (3.10)$$

e  $k$  é a constante de Boltzmann.

$$Z = \int d\mathbf{p} \exp\left(-\frac{\beta \mathbf{p}^2}{2m}\right) = \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{1/2} \quad (3.11)$$

Portanto,

$$p(\mathbf{v}) = \left(\frac{2\pi kT}{m}\right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT}\right). \quad (3.12)$$

A distribuição de probabilidade para uma partícula livre em equilíbrio térmico com o meio, mas acoplada tão fracamente, que podemos desprezar as dissipações, é dada fazendo a média da distribuição (2.27) sobre a distribuição térmica [20] de velocidade (3.12),

$$\begin{aligned} P_T(x; t) &\equiv \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp\left\{-\frac{mv^2}{2kT}\right\} P(x, t) \\ &= \frac{1}{2(1 + e^{-d^2/8\sigma^2})\sqrt{2\pi w^2}} \\ &\quad \times \left( \exp\left\{-\frac{(x - d/2)^2}{2w^2}\right\} \right. \\ &\quad \exp\left\{-\frac{(x + d/2)^2}{2w^2}\right\} \\ &\quad \left. + 2 \exp\left\{-\frac{x^2}{2w^2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{w^2 + \frac{kT}{m}t^2 \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma^2}\right)^2 d^2}{\left(\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^2}\right) 8} \right\} \right. \\ &\quad \left. \times \cos \frac{\hbar t d x}{4m\sigma^2 w^2} \right). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Usamos o subscrito T para enfatizar que é uma distribuição de probabilidade a uma temperatura finita e introduzimos [20]:

$$w^2(t) = \sigma^2 + \frac{kT}{m}t^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^2}t^2. \quad (3.14)$$

A distribuição de probabilidade (3.13) é a soma de três contribuições, correspondendo aos três termos dentro dos parênteses. Claramente os dois primeiros correspondem a um



par de pacotes de onda em expansão separadamente, onde  $w^2(t)$  é a largura de cada pacote, enquanto o terceiro termo, é o termo de interferência entre os dois pacotes.

Podemos definir o coeficiente de atenuação  $a(t)$ , como a divisão entre o fator que multiplica o cosseno e duas vezes a média geométrica dos dois primeiros termos. Desta forma

$$a(t) = \exp \left\{ -\frac{kT d^2}{8m\sigma^2 w^2} \right\} \\ = \exp \left\{ -\frac{\frac{kT}{m} t^2 d^2}{8\sigma^2 + 8\sigma^2 \frac{kT}{m} t^2 + \frac{2\hbar^2 t^2}{m^2}} \right\} \quad (3.15)$$

$$(3.16)$$

Em  $t = 0$ ,  $a(0) = 1$  correspondendo o máximo de coerência, que é o objetivo principal dos experimentos.

Porém, para tempos pequenos, o segundo e o terceiro termo do denominador de (3.15) são desprezíveis, assim  $a(t) \cong \exp \left\{ \frac{-t^2}{\tau_d^2} \right\}$ , onde o tempo de descoerência é

$$\tau_d = \frac{\sqrt{8}\sigma^2}{\bar{v}d} \quad (3.17)$$

onde  $\bar{v} = \sqrt{kT/m}$  é a velocidade térmica média.

### 3.4 Descoerência no Caso de uma Temperatura Finita

Como observamos em (3.17) quanto maior a temperatura, menor será o tempo em que ocorrerá a descoerência, ou seja, o pacote de onda irá se espalhar mais rapidamente. Para observarmos como esse espalhamento ocorre mais rapidamente para o caso da partícula num reservatório térmico do que a temperatura nula, simulamos a evolução da distribuição de probabilidade (3.13) numericamente utilizando os valores adimensionais  $m = 1, \hbar = 1, d = 5, \sigma = 0.5$ .

Primeiramente, analisaremos para  $T=0.1$ :

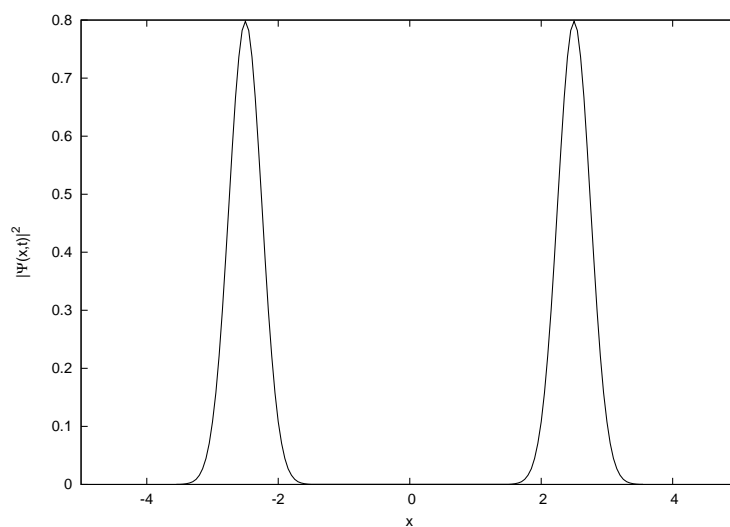


Fig. 3.1: Distribuição de Probabilidade para  $t=0$  e  $T=0.1$

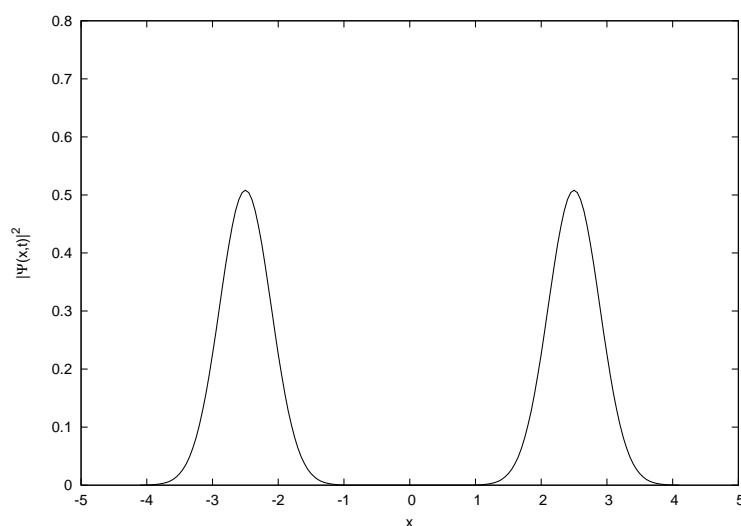
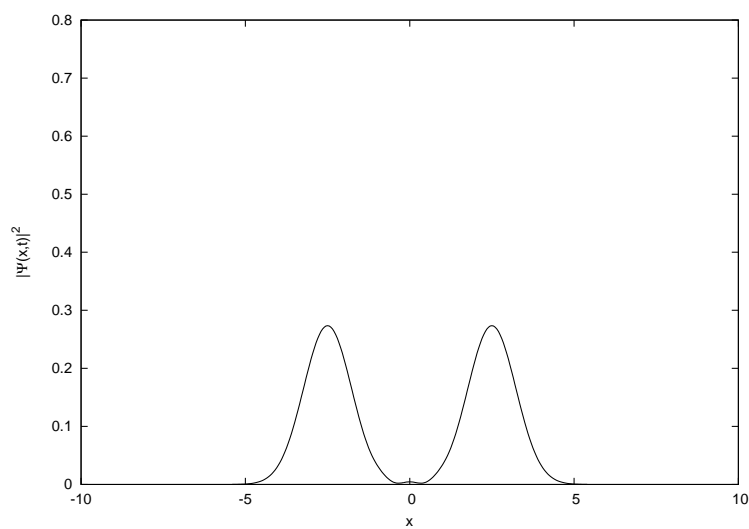
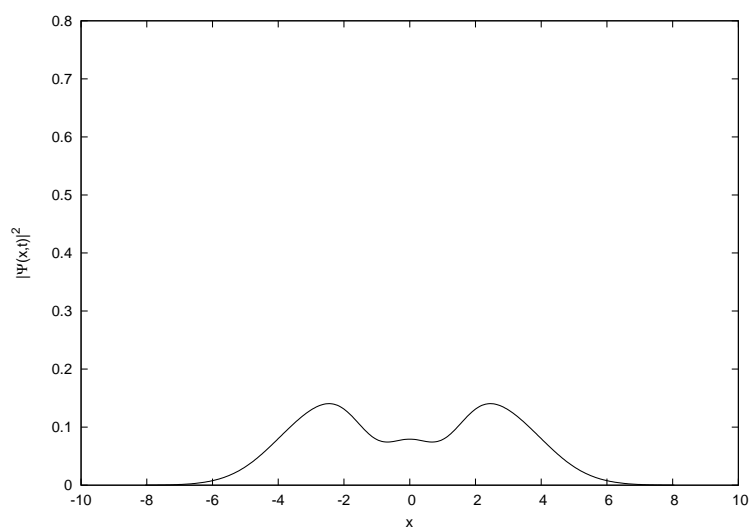


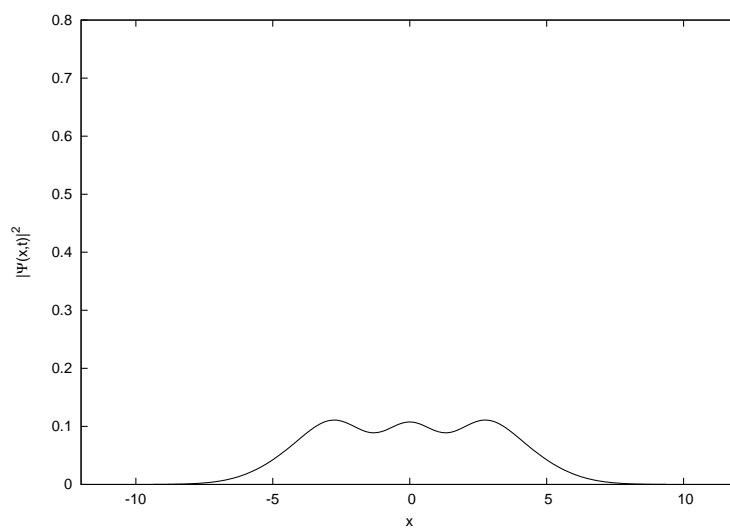
Fig. 3.2: Distribuição de Probabilidade para  $t=0.08$  e  $T=0.1$



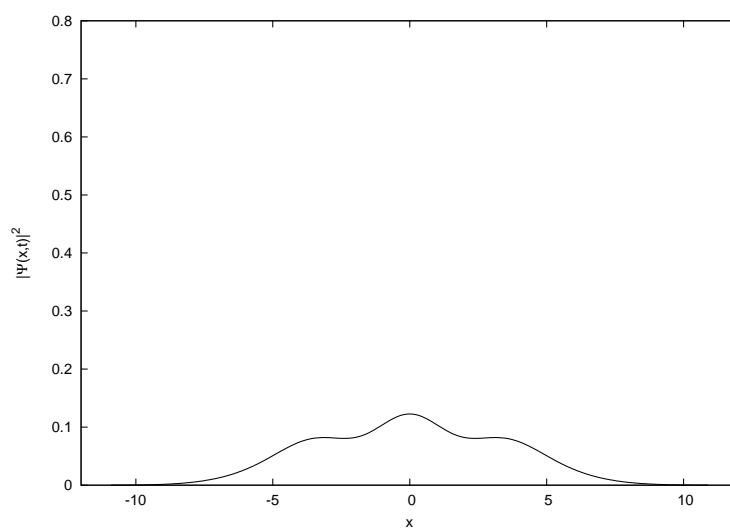
**Fig. 3.3:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.11$  e  $T=0.1$*



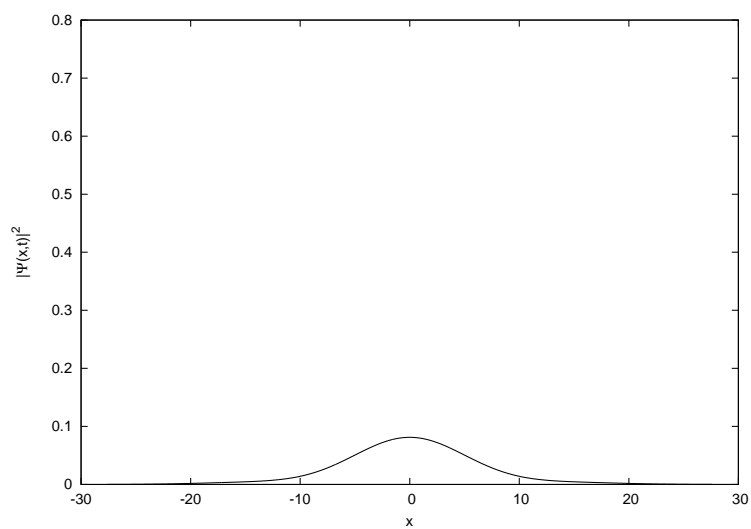
**Fig. 3.4:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.14$  e  $T=0.1$*



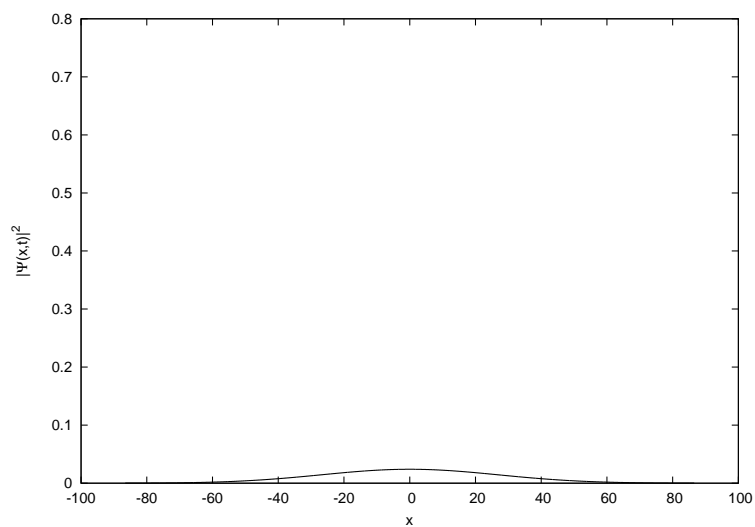
**Fig. 3.5:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.15$  e  $T=0.1$*



**Fig. 3.6:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.16$  e  $T=0.1$*

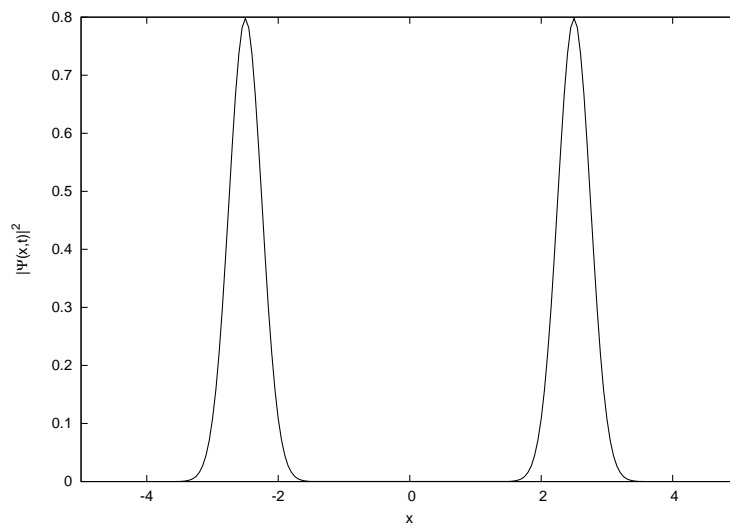


**Fig. 3.7:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.22$  e  $T=0.1$*

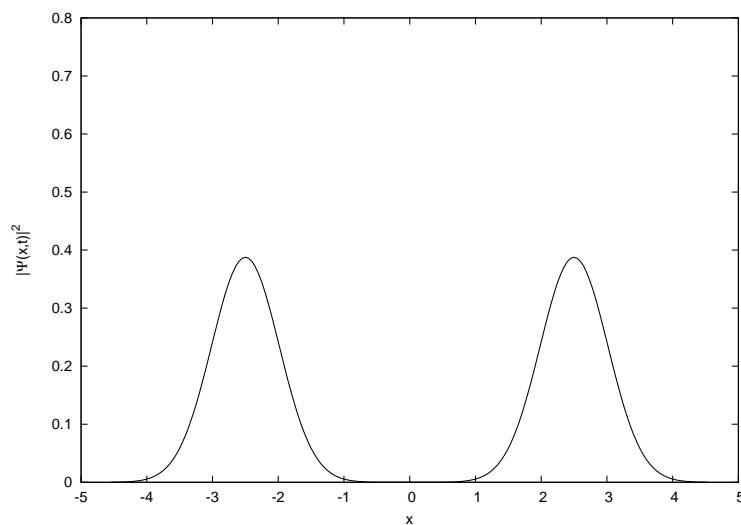


**Fig. 3.8:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.32$  e  $T=0.1$*

Fizemos também a simulação para  $T=5$ :



**Fig. 3.9:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0$  e  $T=5$*



**Fig. 3.10:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.06$  e  $T=5$*

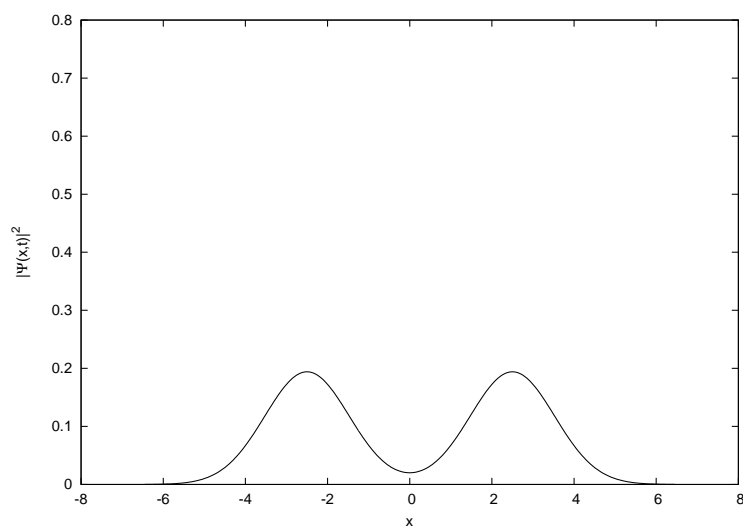


Fig. 3.11: Distribuição de Probabilidade para  $t=0.08$  e  $T=5$

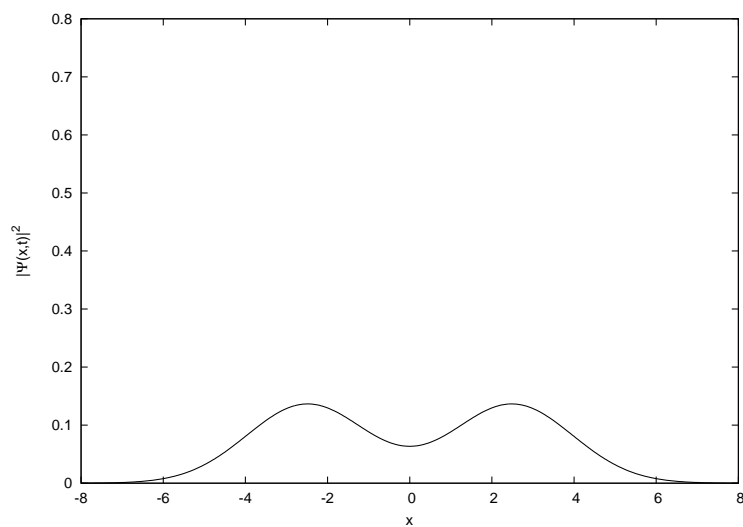
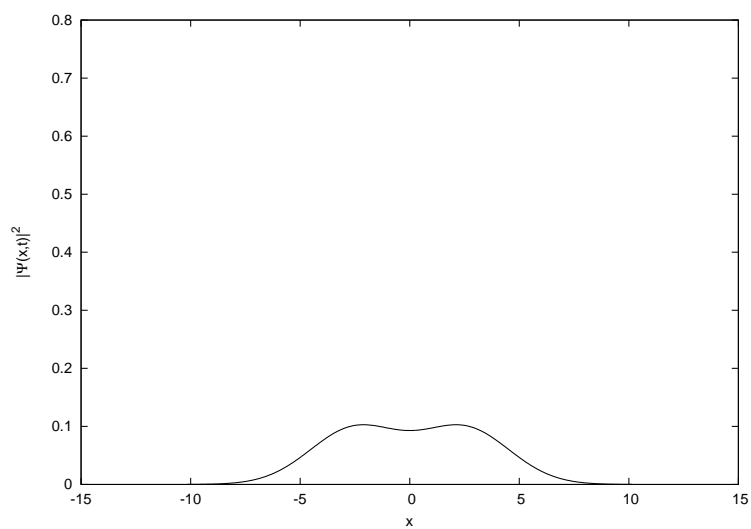
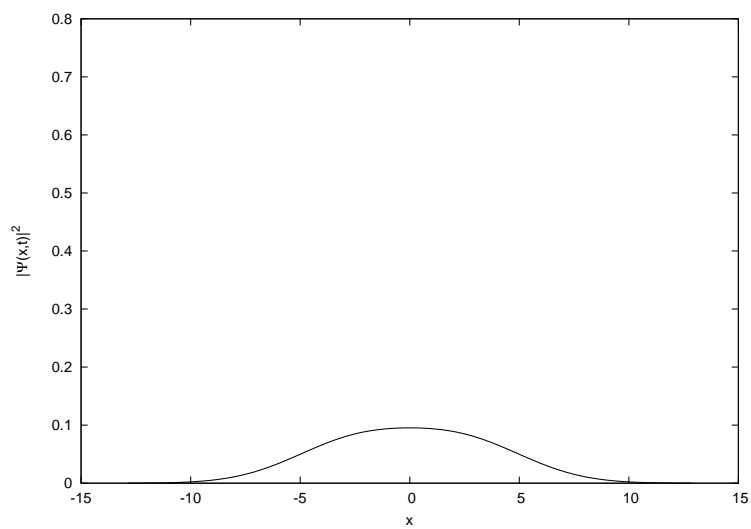


Fig. 3.12: Distribuição de Probabilidade para  $t=0.09$  e  $T=5$

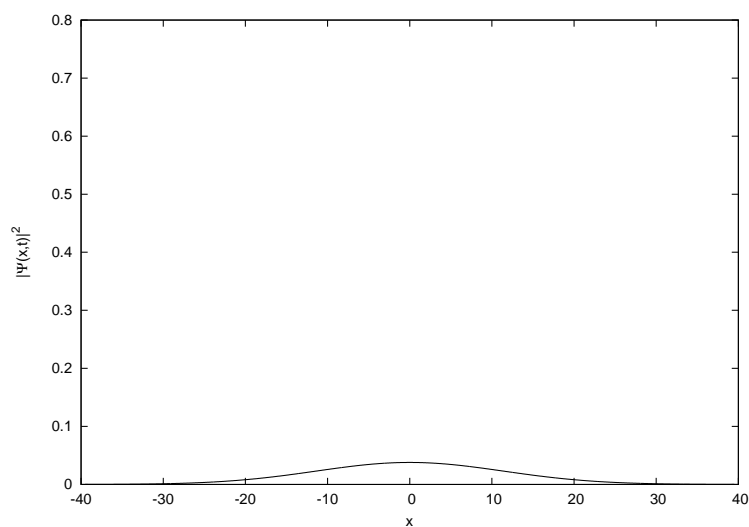


**Fig. 3.13:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.10$  e  $T=5$*



**Fig. 3.14:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.11$  e  $T=5$*





**Fig. 3.15:** *Distribuição de Probabilidade para  $t=0.16$  e  $T=5$*

Observando a evolução do pacote para  $T=0.1$  e  $T=5$ , notamos que este se espalha de maneira muito mais rápida do que para  $T=0$  (seção 2.7).



## Capítulo 4

# Considerações Finais

O presente trabalho teve como objetivo o estudo de como a descoerência ocorre para o caso de uma partícula livre, num estado inicial de superposição composto por dois pacotes gaussianos separados por uma distância  $d$ . E mostrar que a descoerência ocorre independentemente do acoplamento com o meio.

É importante trazer à tona uma reflexão sobre a interpretação quântica, e não ficarmos apenas satisfeitos com o fato de que ela funciona, mas entender melhor seus mecanismos. Em particular a manutenção da coerência é de fundamental importância na computação quântica, criptografia quântica e teletransporte quântico. Conhecer mais essa linha tênue que divide este mundo, tão fascinante e complexo, que é o quântico, do nosso habitual e intuitivo mundo clássico nos possibilitará uma exploração maior da aplicabilidade deste mundo estranho no nosso dia a dia.

Como a descoerência é definida como a destruição do padrão de interferência [1], existe ainda uma grande discussão em torno do que caracterizaria essa destruição: seria a descoerência, no caso da partícula livre, somente a consequência natural da Mecânica Quântica que é o espalhamento do pacote de onda com o tempo ou seria o fato de que num reservatório térmico observamos uma perda de coerência mais rápida? Como podemos ver a teoria quântica ainda está em construção e não há um consenso sobre ela. A maneira própria de se definir o acoplamento com o meio ainda não é certa.

Ao meu ver, analisando os casos para uma partícula livre a temperatura zero e a temperatura finita, o fenômeno da descoerência seria verdadeiramente observado para o segundo caso. O espalhamento da função de onda com o passar do tempo é uma consequência da Mecânica Quântica, este fato não denuncia um surgimento do mundo clássico a partir do quântico, já no caso para um temperatura  $T$  observamos uma mudança de como o processo ocorre, o que me faz concluir que seja um aspecto mais notável.

Muitas outras questões poderiam ter sido exploradas neste trabalho, como o estudo do

---

mesmo caso para meios dissipativos, uma visão mais minuciosa de todo o processo e para diferentes condições do meio. Porém, o objetivo do levantamento de certos aspectos como o comportamento do pacote de onda e os conceitos da Mecânica Quântica que estão por trás deste processo foram alcançados. O caso para a partícula livre não é muito enfatizado na graduação de Física, então meu principal intuito era despertar o interesse na área e também uma melhor compreensão desses conceitos que são de fundamental importância. De toda forma, muito ainda se tem que trabalhar para aperfeiçoar estas teorias e interpretações e, eventualmente, chegar-se a uma teoria mais consensual.





# Referências Bibliográficas

- [1] E.Joos, H.D.Zeh, C. Kiefer, D. Giulini, J.Kupsch, e I.-O. Stamatescu, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, 2nd ed. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 2003.
- [2] P. N. Nelson, *Teorias e Interpretações da Mecânica Quântica* (Ed. Livraria da Física, São Paulo, BR, 2010).
- [3] Wojciech H. Zurek, *Phys. Today* **44**, October, 36 (1991).
- [4] E.Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd ed., Wiley, New York, 1998.
- [5] M. Jammer *The conceptual development of quantum mechanics* (Los Angeles, CA: Tomash Publishers, American Institute of Physics, 1989).
- [6] Eisberg R M, *Fundamentals Of Modern Physics* (3Ed , Wiley, 1963).
- [7] M.Berry, Course 4 *Some Quantum-to-Classical Asymptotics*(Elsevier Science Publishers B.V, 1991).
- [8] B. Russel e A.N. Whitehead, *Principia Mathematica*(Cambridge University Press, 2nd. ed, 1927).
- [9] A.Einstein,B.Podolski e N.Rosen, *Physical Review* **47**, 777 (1935).
- [10] E. Schrödinger, *Proceedings of the American Philosophical Society* **124**, 323 (1980).
- [11] D.Bohm, *Physical Review* **85**, 166 (1952).
- [12] H.Everett III, *Review of Modern Physics* **29**,454 (1957).
- [13] J.S.Bell, *Physics* **1**,195 (1964).

- 
- [14] G.W. Ford, J.T. Lewis, and R.F. O'Connell, *Phys. Rev. A., Gen. Phys.*, vol.64, p. 032101, 2001.
- [15] O'Connell, R.F., *Decoherence in quantum systems*, Nanotechnology, IEEE Transactions on , vol.4, no.1, pp. 77- 82, Jan. 2005
- [16] S. Haroche, *Phys. Today* **51**(7), 36 (1998).
- [17] A. Zeilinger, *Sci. Am.* **282**(4), 32 (2000).
- [18] C. Bennett, *Phys. Today* **48**(10), 24 (1995).
- [19] *Phys. World* **11** (3) (1998), special issue on quantum information.
- [20] G. W. Ford e R.F. O'Connell, *Phys. Lett. A*, vol.286, p.87, 2001.
- [21] A.O. Caldeira, A.J. Legget, *Phys. Rev. A* 31 (1985) 1059.
- [22] D.V. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd ed., Pearson Education, 1995.
- [23] P. A. Tipler, *Física Moderna*. Rio de Janeiro: Guanabara Dois (1981).
- [24] D. Halliday e R. Resnick, *Fundamentos de Física 4* (Rio de Janeiro: LTC, 1991, 300p).
- [25] G.W. Ford and J.T. Lewis, in *Probability, Statical Mechanics, and Number Theory*, Vol.9 of *Advances in Mathematics Supplemental Studies*, (Academic Press, Orlando, FL, 1986).
- [26] W. Greiner, *Quantum Mechanics, An Introduction* (Springer Verlag Publishing, Fourth Edition, New York).
- [27] L.E. Reichl, *A modern course in statistical physics*,(Wiley, inc, 2nd ed., New York)
- [28] S. R. A. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (Editora da Universidade de São Paulo, 2.ed., São Paulo).