Digressão: densidade espectral ôhmica com frequência de corte à la Caldeira & Leggett

Vamos considerar uma partícula acoplada com um banho de osciladores harmônicos. Então, teremos

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

como a hamiltoniana da partícula e

$$H_B = \sum_s \left(\frac{p_s^2}{2m_s} + \frac{1}{2} m_s \omega_s^2 x_s^2 \right)$$

como a hamiltoniana dos osciladores harmônicos. Podemos tentar uma hamiltoniana de interação bem simples:

$$H_{int} = -x \sum_s c_s x_s,$$

onde c_s é a constante de acoplamento entre a partícula e o modo normal s dos osciladores harmônicos. Há um problema na forma da hamiltoniana total que é a soma dessas três hamiltonianas, segundo Caldeira & Leggett. Aparentemente o problema é que a hamiltoniana total tem que ser invariante por translação se o potencial $V(x)$ for nulo. Mas, se usarmos H_{int} como definimos, então isso não vai acontecer. O argumento que eles usam é como segue. Vamos considerar a lagrangeana total:

$$\mathscr{L} = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x) + \sum_s \left(\frac{m_s}{2}\dot{x_s}^2 - \frac{1}{2} m_s \omega_s^2 x_s^2 \right) + x \sum_s c_s x_s.$$

Qual é a mínima energial potencial desse sistema total, para um valor x fixo? Ora, ignorando as velocidades, teremos:

$$V_{ef}(x) = V(x) + \sum_s \frac{1}{2} m_s \omega_s^2 x_s^2 - x \sum_s c_s x_s,$$

que devemos minimizar para achar os valores de x_s do mínimo. Então, nesse caso, teremos:

$$\frac{\partial V_{ef}(x)}{\partial x_s} = m_s \omega_s^2 x_s - x c_s,$$

isto é,

$$x_s = \frac{c_s}{m_s \omega_s^2} x,$$

para cada s. Com isso,

$$\begin{aligned} V_{ef}(x) &= V(x) + x^2 \sum_s \frac{1}{2} m_s \frac{c_s^2}{m_s^2 \omega_s^2} - x \sum_s c_s \frac{c_s}{m_s \omega_s^2} x \\ &= V(x) + x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{2 m_s \omega_s^2} - x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{m_s \omega_s^2}, \end{aligned}$$

isto é,

$$V_{ef}(x) = V(x) - x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{2 m_s \omega_s^2}.$$

Então, quando escolhermos $V(x) = 0$, a energia da partícula ainda depende do ponto onde ela está. Para evitar isto, escolhemos, ao invés de H_{int} como acima, a nova hamiltoniana de interação:

$$H_{int} = -x\sum_s c_s x_s + x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s\omega_s^2},$$

que vai cancelar esse defeito na hora que calcularmos $V_{ef}(x)$. Temos, portanto, o sistema total descrito pela hamiltoniana:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_s \left(\frac{p_s^2}{2m_s} + \frac{1}{2}m_s\omega_s^2 x_s^2\right) - x\sum_s c_s x_s + x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s\omega_s^2}.$$

Só para confirmar, agora o que sobra depois de colocarmos as velocidades iguais a zero é uma energia potencial efetiva dada por

$$V_{ef}(x) = V(x) + \sum_s \frac{1}{2}m_s\omega_s^2 x_s^2 - x\sum_s c_s x_s + x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s\omega_s^2}.$$

Agora ficamos com

$$\frac{\partial V_{ef}(x)}{\partial x_s} = m_s\omega_s^2 x_s - x c_s,$$

como anteriormente e, com isso,

$$x_s = \frac{c_s}{m_s\omega_s^2}x$$

para a mínima energia efetiva. Assim,

$$\begin{aligned} V_{ef}(x) &= V(x) + \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s\omega_s^2}x^2 - x^2\sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2} + x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s\omega_s^2} \\ &= V(x), \end{aligned}$$

que não depende mais de onde a partícula está quando escolhemos $V(x) = 0$.

Mas o que isso tem a ver com nosso modelo de descoerência e com a ideia de que o que é densidade espectral ôhmica tem uma dependência com a frequência que é linear na frequência para baixas frequências? E aí precisamos escrever as equações de movimento tanto para nosso sistema acima como para o modelo de Drude e Lorentz e, também, para um circuito RLC.

Nosso sistema acima de partícula acoplada a um sistema de osciladores harmônicos

Vamos usar a representação de Heisenberg e escrever as equações de movimento para a partícula e, como tudo está acoplado, para os graus de liberdade dos osciladores harmônicos ambientais. Comecemos com a equação para p:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}p &= [p, H] \\ &= \left[p, \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_s \left(\frac{p_s^2}{2m_s} + \frac{1}{2}m_s\omega_s^2 x_s^2\right) - x\sum_s c_s x_s + x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s\omega_s^2}\right] \\ &= -i\hbar V'(x) + i\hbar\sum_s c_s x_s - 2i\hbar x\sum_s \frac{c_s^2}{2m_s\omega_s^2}, \end{aligned}$$

isto é,

$$\frac{d}{dt}p = -V'(x) + \sum_s c_s x_s - 2x \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s\omega_s^2},$$

que seria a força sobre a partícula no caso clássico. Para x, a equação de Heisenberg dá:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}x &= \left[x, \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_s \left(\frac{p_s^2}{2m_s} + \frac{1}{2}m_s\omega_s^2 x_s^2\right) - x\sum_s c_s x_s + x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s\omega_s^2}\right] \\ &= \left[x, \frac{p^2}{2m}\right] \\ &= i\hbar\frac{p}{m}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt}x = \frac{p}{m},$$

que é análoga à velocidade clássica. Então, usando a equação anterior, temos a equação de movimento para o operador posição da partícula:

$$m\frac{d^2}{dt^2}x = -V'(x) + \sum_s c_s x_s - x\sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2}. \tag{1}$$

Claramente, para os modos dos osciladores,

$$\frac{d}{dt}x_s = \frac{p_s}{m_s}$$

e, também,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}p_s &= [p_s, H] \\ &= \left[p_s, \sum_r \frac{1}{2}m_r\omega_r^2 x_r^2 - x\sum_r c_r x_r\right] \\ &= -i\hbar m_s\omega_s^2 x_s + i\hbar x c_s, \end{aligned}$$

isto é,

$$\frac{d}{dt}p_s = -m_s\omega_s^2 x_s + x c_s.$$

Assim, as equações de movimento para as posições dos osciladores ambientais ficam:

$$\frac{d^2}{dt^2}x_s = -x_s\omega_s^2 + x\frac{c_s}{m_s}. \tag{2}$$

Eliminação das variáveis ambientais

Vamos resolver formalmente a Eq. (2). Escrevemos:

$$\left(\frac{d}{dt}+i\omega_s\right)\left(\frac{d}{dt}-i\omega_s\right) = \frac{d^2}{dt^2}+\omega_s^2.$$

Então, a Eq. (2) pode ser reescrita assim:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2}+\omega_s^2\right)x_s\left(t\right) = \frac{c_s}{m_s}x\left(t\right),$$

isto é,

$$\left(\frac{d}{dt}+i\omega_s\right)\left(\frac{d}{dt}-i\omega_s\right)x_s\left(t\right) = \frac{c_s}{m_s}x\left(t\right).$$

Seja, portanto,

$$h_s\left(t\right) \equiv \left(\frac{d}{dt}-i\omega_s\right)x_s\left(t\right). \tag{3}$$

Esta equação também pode ser reescrita como

$$h_s\left(t\right) = \frac{p_s\left(t\right)}{m_s}-i\omega_s x_s\left(t\right). \tag{4}$$

Logo, queremos resolver

$$\left(\frac{d}{dt}+i\omega_s\right)h_s\left(t\right) = \frac{c_s}{m_s}x\left(t\right).$$

Um fator integrante para esta equação é $\exp\left(i\omega_s t\right)$ e, com isso,

$$\exp\left(i\omega_s t\right)\left(\frac{d}{dt}+i\omega_s\right)h_s\left(t\right) = \frac{c_s}{m_s}\exp\left(i\omega_s t\right)x\left(t\right),$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt}\left[\exp\left(i\omega_s t\right)h_s\left(t\right)\right] = \frac{c_s}{m_s}\exp\left(i\omega_s t\right)x\left(t\right),$$

ou ainda,

$$\exp\left(i\omega_s t\right)h_s\left(t\right) = h_s\left(0\right)+\frac{c_s}{m_s}\int_0^t dt'\,\exp\left(i\omega_s t'\right)x\left(t'\right).$$

Logo,

$$h_s\left(t\right) = \exp\left(-i\omega_s t\right)h_s\left(0\right)+\frac{c_s}{m_s}\exp\left(-i\omega_s t\right)\int_0^t dt'\,\exp\left(i\omega_s t'\right)x\left(t'\right).$$

Usando Eq. (4), vem:

$$\begin{aligned} h_s(t) &= \exp(-i\omega_s t)\frac{p_s(0)}{m_s} - i\omega_s \exp(-i\omega_s t)\, x_s(0) \\ &\quad + \frac{c_s}{m_s}\exp(-i\omega_s t)\int_0^t dt' \, \exp(i\omega_s t')\, x(t') \,. \end{aligned}$$

Agora, da Eq. (3) vemos que queremos que resolver

$$\left(\frac{d}{dt} - i\omega_s\right) x_s(t) = h_s(t) \,.$$

De forma análoga ao que acabamos de fazer, mas usando o fator integrante $\exp(-i\omega_s t)$, obtemos:

$$x_s(t) = \exp(i\omega_s t)\, x_s(0) + \exp(i\omega_s t)\int_0^t dt'' \, \exp(-i\omega_s t'')\, h_s(t'') \,.$$

Usando a solução para $h_s(t)$ que obtivemos, a solução para $x_s(t)$ fica:

$$\begin{aligned} x_s(t) &= \exp(i\omega_s t)\, x_s(0) \\ &\quad + \exp(i\omega_s t)\int_0^t dt'' \, \exp(-i\omega_s t'')\left[\exp(-i\omega_s t'')\frac{p_s(0)}{m_s}\right] \\ &\quad + \exp(i\omega_s t)\int_0^t dt'' \, \exp(-i\omega_s t'')\left[-i\omega_s \exp(-i\omega_s t'')\, x_s(0)\right] \\ &\quad + \exp(i\omega_s t)\int_0^t dt'' \, \exp(-i\omega_s t'')\left[\frac{c_s}{m_s}\exp(-i\omega_s t'')\int_0^{t''} dt' \, \exp(i\omega_s t')\, x(t')\right], \end{aligned}$$

isto é,

$$\begin{aligned} x_s(t) &= \exp(i\omega_s t)\, x_s(0) \\ &\quad + \frac{p_s(0)}{m_s}\exp(i\omega_s t)\int_0^t dt'' \, \exp(-2i\omega_s t'') \\ &\quad - i\omega_s x_s(0)\exp(i\omega_s t)\int_0^t dt'' \, \exp(-2i\omega_s t'') \\ &\quad + \frac{c_s}{m_s}\exp(i\omega_s t)\int_0^t dt'' \, \exp(-2i\omega_s t'')\int_0^{t''} dt' \, \exp(i\omega_s t')\, x(t') \,, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} x_s(t) &= \exp(i\omega_s t)\, x_s(0) \\ &\quad - \frac{p_s(0)}{m_s}\exp(i\omega_s t)\frac{\exp(-2i\omega_s t) - 1}{2i\omega_s} \\ &\quad + i\omega_s x_s(0)\exp(i\omega_s t)\frac{\exp(-2i\omega_s t) - 1}{2i\omega_s} \\ &\quad + \frac{c_s}{m_s}\exp(i\omega_s t)\int_0^t dt'' \, \exp(-2i\omega_s t'')\int_0^{t''} dt' \, \exp(i\omega_s t')\, x(t') \,, \end{aligned}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}x_s(t) &= x_s(0)\frac{\exp(-i\omega_s t)+\exp(i\omega_s t)}{2}\\ &-\frac{p_s(0)}{m_s}\frac{\exp(-i\omega_s t)-\exp(i\omega_s t)}{2i\omega_s}\\ &+\frac{c_s}{m_s}\exp(i\omega_s t)\int_0^t dt''\,\exp(-2i\omega_s t'')\int_0^{t''} dt'\,\exp(i\omega_s t')\,x(t').\end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}x_s(t) &= x_s(0)\cos(\omega_s t)+\frac{p_s(0)}{m_s\omega_s}\mathrm{sen}(\omega_s t)\\ &+\frac{c_s}{m_s}\exp(i\omega_s t)\int_0^t dt''\,\exp(-2i\omega_s t'')\int_0^{t''} dt'\,\exp(i\omega_s t')\,x(t').\end{aligned}$$

Podemos escrever a dupla integral acima como

$$\begin{aligned}\int_0^t dt''\,\exp(-2i\omega_s t'')\int_0^{t''} dt'\,\exp(i\omega_s t')\,x(t') &=\\ \int_0^t dt''\,\exp(-2i\omega_s t'')\int_0^t dt'\theta(t''-t')\,\exp(i\omega_s t')\,x(t') &=\\ \int_0^t dt'\left[\int_0^t dt''\,\exp(-2i\omega_s t'')\,\theta(t''-t')\right]\exp(i\omega_s t')\,x(t').\end{aligned}$$

Mas,

$$\begin{aligned}\int_0^t dt''\,\exp(-2i\omega_s t'')\,\theta(t''-t') &= \int_{t'}^t dt''\,\exp(-2i\omega_s t'')\\ &= -\frac{\exp(-2i\omega_s t)-\exp(-2i\omega_s t')}{2i\omega_s}.\end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned}\int_0^t dt''\,\exp(-2i\omega_s t'')\int_0^{t''} dt'\,\exp(i\omega_s t')\,x(t') &=\\ -\int_0^t dt'\frac{\exp(-2i\omega_s t)-\exp(-2i\omega_s t')}{2i\omega_s}\,\exp(i\omega_s t')\,x(t') &=\\ -\int_0^t dt'\frac{\exp(-2i\omega_s t+i\omega_s t')-\exp(-i\omega_s t')}{2i\omega_s}\,x(t')\end{aligned}$$

e, assim,

$$\begin{aligned}x_s(t) &= x_s(0)\cos(\omega_s t)+\frac{p_s(0)}{m_s\omega_s}\mathrm{sen}(\omega_s t)\\ &-\frac{c_s}{m_s\omega_s}\exp(i\omega_s t)\int_0^t dt'\frac{\exp(-2i\omega_s t+i\omega_s t')-\exp(-i\omega_s t')}{2i}\,x(t')\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= x_s(0)\cos(\omega_s t) + \frac{p_s(0)}{m_s\omega_s}\mathrm{sen}(\omega_s t) \\
&\quad + \frac{c_s}{m_s\omega_s}\int_0^t dt' \frac{\exp(i\omega_s t - i\omega_s t') - \exp(-i\omega_s t + i\omega_s t')}{2i}\, x(t'),
\end{aligned}
$$

isto é,

$$
\begin{aligned}
x_s(t) &= x_s(0)\cos(\omega_s t) + \frac{p_s(0)}{m_s\omega_s}\mathrm{sen}(\omega_s t) \\
&\quad + \frac{c_s}{m_s\omega_s}\int_0^t dt'\mathrm{sen}(\omega_s t - \omega_s t')\; x(t').
\end{aligned}
$$

Podemos agora substituir esta solução na Eq. (1) e obter:

$$
\begin{aligned}
m\frac{d^2}{dt^2}x + V'(x) + x\sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2} &= \sum_s c_s x_s \\
&= \sum_s c_s\left[x_s(0)\cos(\omega_s t) + \frac{p_s(0)}{m_s\omega_s}\mathrm{sen}(\omega_s t)\right] \\
&\quad + \sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s}\int_0^t dt'\mathrm{sen}(\omega_s t - \omega_s t')\; x(t').
\end{aligned}
$$

Podemos ainda usar integração por partes e escrever:

$$
\begin{aligned}
\int_0^t dt'\mathrm{sen}(\omega_s t - \omega_s t')\; x(t') &= \frac{1}{\omega_s}\int_0^t dt'\, x(t')\, \frac{d}{dt'}\cos(\omega_s t - \omega_s t') \\
&= \frac{1}{\omega_s}\int_0^t dt'\, \frac{d}{dt'}\left[x(t')\cos(\omega_s t - \omega_s t')\right] \\
&\quad - \frac{1}{\omega_s}\int_0^t dt'\, \cos(\omega_s t - \omega_s t')\, \frac{d}{dt'}x(t') \\
&= \frac{1}{\omega_s}x(t) - \frac{1}{\omega_s}x(0)\cos(\omega_s t) \\
&\quad - \frac{1}{\omega_s}\int_0^t dt'\, \cos(\omega_s t - \omega_s t')\, \frac{d}{dt'}x(t').
\end{aligned}
$$

Logo,

$$
\begin{aligned}
m\frac{d^2}{dt^2}x + V'(x) + x\sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2} &= \sum_s c_s\left[x_s(0)\cos(\omega_s t) + \frac{p_s(0)}{m_s\omega_s}\mathrm{sen}(\omega_s t)\right] \\
&\quad + \sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2}x(t) - \sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2}x(0)\cos(\omega_s t) \\
&\quad - \sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2}\int_0^t dt'\, \cos(\omega_s t - \omega_s t')\, \frac{d}{dt'}x(t'),
\end{aligned}
$$

ou seja,

$$
\begin{aligned}
m\frac{d^2}{dt^2}x+V'(x) &= \sum_s c_s\left\{\left[x_s(0)-\frac{c_s}{m_s\omega_s^2}x(0)\right]\cos(\omega_s t)+\frac{p_s(0)}{m_s\omega_s}\mathrm{sen}(\omega_s t)\right\} \\
&\quad -\int_0^t dt'\left[\sum_s\frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2}\cos(\omega_s t-\omega_s t')\right]\frac{d}{dt'}x(t'),
\end{aligned}
$$

Sejam

$$
\mathscr{E}(t) \equiv \sum_s c_s\left\{\left[x_s(0)-\frac{c_s}{m_s\omega_s^2}x(0)\right]\cos(\omega_s t)+\frac{p_s(0)}{m_s\omega_s}\mathrm{sen}(\omega_s t)\right\}
$$

e

$$
\gamma(t) \equiv \frac{1}{m}\sum_s\frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2}\cos(\omega_s t).
$$

Portanto,

$$
m\frac{d^2}{dt^2}x+m\int_0^t dt'\,\gamma(t-t')\frac{d}{dt'}x(t')+V'(x) = \mathscr{E}(t). \tag{5}
$$

O modelo de Drude & Lorentz

O modelo de Drude-Lorentz para a matéria é uma simplificação. Supomos um núcleo fixo e um elétron preso harmonicamente ao núcleo. O modelo de Drude trata de um gás de elétrons na banda de condução, enquanto que o de Lorentz trata o caso de elétrons harmonicamente ligados aos seus respectivos átomos. Como a presente formulação pode descrever ambos os casos, é chamada de modelo de Drude-Lorentz. Além disso, também supomos que o elétron sofra uma força de fricção proporcional à sua velocidade. De acordo com a Segunda Lei de Newton, na presença de um campo eletromagnético a derivada temporal do momentum linear do elétron é igual à força de Lorentz, somada à força harmônica que prende o elétron ao núcleo e à força dissipativa proporcional à velocidade do elétron. Assim, a equação de movimento do elétron, considerando um movimento não relativístico, é dada por

$$
m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -e\mathbf{E}-\frac{e}{c}\frac{d\mathbf{r}}{dt}\times\mathbf{B}-m\gamma\frac{d\mathbf{r}}{dt}-m\omega_0^2\mathbf{r},
$$

onde a carga eletrônica é dada por $-e<0$, γ é uma constante positiva e ω_0 é a frequência natural de oscilação do elétron em torno do núcleo, de acordo com o presente modelo. Aqui, vamos desprezar a força magnética por considerarmos o valor absoluto da velocidade do elétron muito menor do que o módulo da velocidade da luz. Em outras palavras, se compararmos as magnitudes das forças magnética e elétrica, teremos

$$
\frac{\left|\frac{e}{c}\frac{d\mathbf{r}}{dt}\times\mathbf{B}\right|}{|e\mathbf{E}|} \sim \frac{1}{c}\left|\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right|\frac{|\mathbf{B}|}{|\mathbf{E}|}
$$

e, como para uma onda plana, por exemplo,

$$
\boldsymbol{\epsilon} = -\frac{1}{\sqrt{\mu\varepsilon}}\hat{\mathbf{k}}\times\boldsymbol{\beta},
$$

segue que, no vácuo,

$$\boldsymbol{\epsilon} = -\hat{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\beta},$$

pois

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\beta} &= i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\beta} \\ &= 0 \end{aligned}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{\epsilon}| &= \left|\hat{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\beta}\right| \\ &= \left|\hat{\mathbf{k}}\right| |\boldsymbol{\beta}| \\ &= |\boldsymbol{\beta}| \,. \end{aligned}$$

Com isso,

$$\frac{|\mathbf{B}|}{|\mathbf{E}|} \sim 1$$

e concluímos que

$$\frac{\left|\frac{e}{c}\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}\right|}{|e\mathbf{E}|} \sim \frac{1}{c}\left|\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right| \ll 1$$

para um elétron não relativístico.

Agora suponhamos que uma onda plana monocromática incida sobre o átomo. A onda pode ser representada por seu campo elétrico complexo como

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos\left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t\right).$$

Para frequências ópticas, da ordem de 10^{15}Hz, e para $r \approx 1$Å,

$$kr = \frac{\omega}{c} r \sim 2\pi \frac{10^{15}}{3 \times 10^8} \times 10^{-10} \ll 1.$$

Logo,

$$\mathbf{E} \approx \mathbf{E}_0 \cos\left(\omega t\right)$$

é uma boa aproximação para frequências ópticas. Com essa aproximação e ignorando qualquer efeito transiente, um ansatz para a equação

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -e\mathbf{E} - m\gamma\frac{d\mathbf{r}}{dt} - m\omega_0^2\mathbf{r},$$

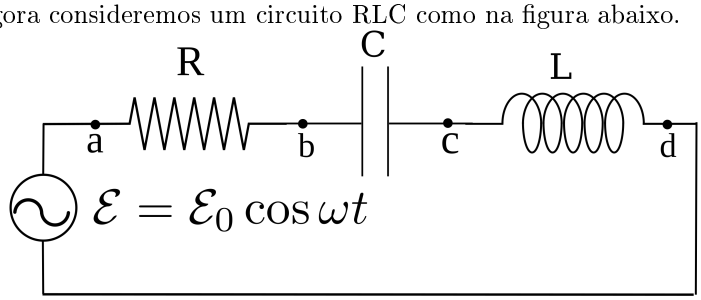
isto é,

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} + m\gamma\frac{d\mathbf{r}}{dt} + m\omega_0^2\mathbf{r} = -e\mathbf{E},$$

que lembra bem nossa equação acima, a Eq. (5).

Um circuito RLC

Agora consideremos um circuito RLC como na figura abaixo.



A ideia aqui é encontrarmos a equação diferencial para este circuito que dá, por exemplo, a carga no capacitor C como função do tempo. Nesse caso, usando as leis de Kirchhoff, vemos que, com o sentido da corrente escolhido como positivo se for horário, temos:

$$\mathcal{E}(t) - RI(t) - \frac{Q(t)}{C} - L\frac{dI(t)}{dt} = 0.$$

Mas, usando

$$I(t) = \frac{dQ(t)}{dt},$$

segue que

$$\frac{d^2}{dt^2}Q(t) = \frac{1}{L}\mathcal{E}(t) - \frac{R}{L}\frac{d}{dt}Q(t) - \frac{1}{LC}Q(t),$$

ou seja,

$$L\frac{d^2}{dt^2}Q(t) + L\gamma_{RL}\frac{d}{dt}Q(t) + L\omega_{LC}^2 Q(t) = \mathcal{E}(t),$$

onde definimos

$$\gamma_{RL} \equiv \frac{R}{L}$$

e

$$\omega_{LC} \equiv \frac{1}{\sqrt{LC}}.$$

Mas esta é essencialmente a mesma equação que tínhamos acima para a posição do elétron e, claro, parecida com nossa Eq. (5).

Conexão entre c_s e g_s

Como vimos no começo do curso, podemos usar

$$b_s \equiv \sqrt{\frac{m_s\omega_s}{2\hbar}}x_s + i\frac{1}{\sqrt{2m_s\hbar\omega_s}}p_s$$

e, portanto,

$$b_s^\dagger = \sqrt{\frac{m_s\omega_s}{2\hbar}}x_s - i\frac{1}{\sqrt{2m_s\hbar\omega_s}}p_s,$$

onde estamos só escolhendo ζ do começo do curso como sendo um parâmetro m_s para cada modo só para termos uma analogia com um sistema de osciladores harmônicos, cada um com uma massa m_s. Assim,

$$b_s + b_s^\dagger = \sqrt{\frac{2m_s\omega_s}{\hbar}}x_s$$

e, com isso,

$$x_s = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_s\omega_s}}\left(b_s + b_s^\dagger\right).$$

Consideremos o modelo cuja hamiltoniana é dada por

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \hbar\sum_s \omega_s\left(b_s^\dagger b_s + \frac{1}{2}\right) \\ &\quad + \hbar\sigma_z\sum_s\left(g_s b_s + g_s^* b_s^\dagger\right), \end{aligned}$$

onde agora estamos incluindo novamente a energia infinita do vácuo bosônico. Aqui ainda é um pouco cedo para colocarmos σ_z ou outra matrizes de Pauli na história, mas vemos que o acoplamento se dá através de um termo que tem um operador da partícula, σ_z, e aqui no nosso contexto teríamos x, multiplicado por algo que é proporcional a x_s se fizermos a simplificação escolhendo as constantes de acoplamento como sendo reais, ou seja,

$$g_s^* = g_s.$$

Assim, no modelo acima:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \hbar\sum_s \omega_s\left(b_s^\dagger b_s + \frac{1}{2}\right) \\ &\quad + \hbar\sigma_z\sum_s g_s\left(b_s + b_s^\dagger\right) \\ &= H_0 + \hbar\sum_s \omega_s\left(b_s^\dagger b_s + \frac{1}{2}\right) \\ &\quad + \sigma_z\sum_s g_s\sqrt{2m_s\hbar\omega_s}x_s. \end{aligned}$$

Nossa conexão tem que ser algo assim:

$$-x\sum_s c_s x_s \quad\leftrightarrow\quad \sigma_z\sum_s g_s\sqrt{2m_s\hbar\omega_s}x_s.$$

Seja a densidade espectral dada por

$$J(\omega) \equiv \sum_s |g_s|^2\,\delta(\omega-\omega_s).$$

Vemos então que $J(\omega)$ satisfaz a propriedade:

$$\int_0^\infty d\omega\, J(\omega) = \sum_s |g_s|^2.$$

Nosso coeficiente de fricção

Vimos acima que

$$\gamma(t) \equiv \frac{1}{m}\sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2}\cos(\omega_s t)\,.$$

Então, escrevemos:

$$\begin{aligned}\gamma(t) &= \frac{1}{m}\int_0^\infty d\omega\left[\sum_s \frac{c_s^2}{m_s\omega_s^2}\delta(\omega-\omega_s)\right]\cos(\omega t)\\ &= \int_0^\infty d\omega\left[\sum_s \frac{c_s^2}{m m_s\omega_s^2}\delta(\omega-\omega_s)\right]\cos(\omega t)\,.\end{aligned}$$

Para termos nossa equação de movimento coincidindo com aquela do modelo de Drude & Lorentz ou com a do circuito RLC, precisamos impor

$$\int_0^t dt'\,\gamma(t-t')\frac{d}{dt'}x(t') = \gamma_0\frac{d}{dt}x(t)\,,$$

com γ_0 independente do tempo. O que queremos, portanto, é que

$$\gamma(t) = \lambda\delta(t)\,.$$

Aí, se usarmos a representação da delta tal que

$$\delta(x) \equiv \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{1}{\varepsilon}\theta(x-\varepsilon/2)\,\theta(x+\varepsilon/2)\right]$$

$$\begin{aligned}\int_0^t dt'\,\gamma(t-t') &= \lambda\int_0^t dt'\,\delta(t-t')\\ &= \lambda\int_0^t dt'\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{1}{\varepsilon}\theta(t-t'-\varepsilon/2)\,\theta(t-t'+\varepsilon/2)\right]\\ &= \lambda\lim_{\varepsilon\to 0}\int_0^t dt'\,\frac{1}{\varepsilon}\theta(t-t'-\varepsilon/2)\\ &= \lambda\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{t-\varepsilon/2}^t dt'\,\frac{1}{\varepsilon}\\ &= \frac{\lambda}{2}\end{aligned}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned}\int_0^t dt'\,\gamma(t-t')\frac{d}{dt'}x(t') &= \lambda\int_0^t dt'\,\delta(t-t')\frac{d}{dt'}x(t')\\ &= \frac{\lambda}{2}\frac{d}{dt}x(t)\,.\end{aligned}$$

Com isso, escolhemos, portanto,

$$\gamma(t) = 2\gamma_0 \delta(t).$$

Como vimos acima, queremos também que

$$\gamma(t) = \int_0^\infty d\omega \left[\sum_s \frac{c_s^2}{m m_s \omega_s^2} \delta(\omega - \omega_s) \right] \cos(\omega t).$$

Logo, impondo que

$$\mathcal{J}(\omega) \equiv \sum_s \frac{c_s^2}{m m_s \omega_s^2} \delta(\omega - \omega_s),$$

queremos

$$\int_0^\infty d\omega\, \mathcal{J}(\omega) \cos(\omega t) = 2\gamma_0 \delta(t).$$

Notando que

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty d\omega\, \cos(\omega t) &= \frac{1}{2}\int_0^\infty d\omega\, \exp(i\omega t) + \frac{1}{2}\int_0^\infty d\omega\, \exp(-i\omega t) \\
&= -\frac{1}{2}\int_0^{-\infty} d\omega\, \exp(-i\omega t) + \frac{1}{2}\int_0^\infty d\omega\, \exp(-i\omega t) \\
&= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \exp(-i\omega t) \\
&= \pi \delta(t),
\end{aligned}$$

vemos que escolhendo

$$\mathcal{J}(\omega) = \frac{2\gamma_0}{\pi}$$

teremos

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty d\omega\, \mathcal{J}(\omega) \cos(\omega t) &= \frac{2\gamma_0}{\pi} \int_0^\infty d\omega\, \cos(\omega t) \\
&= 2\gamma_0 \delta(t),
\end{aligned}$$

como desejado. Logo,

$$\sum_s \frac{c_s^2}{m m_s \omega_s^2} \delta(\omega - \omega_s) = \frac{2\gamma_0}{\pi}.$$