

Forma da densidade espectral ôhmica

Em nosso modelo, tínhamos visto a correspondência com o modelo de Caldeira & Leggett de uma partícula se movendo sobre o eixo x com um ambiente descrito por osciladores harmônicos. Nosso resultado deu:

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

A correspondência que surge no próprio modelo de Caldeira & Leggett quando passam a considerar σ_z no lugar de x é trocar assim:

$$x \leftrightarrow -\frac{1}{\zeta} \sigma_z,$$

onde ζ poderemos determinar depois. Logo, precisamos usar:

$$c_s \leftrightarrow \zeta g_s \sqrt{2m_s \hbar \omega_s}.$$

Na relação que tínhamos para a passagem ao contínuo,

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

agora obtemos:

$$\sum_s \frac{\zeta^2 g_s^2 2m_s \hbar \omega_s}{m m_s \omega_s^2} \delta(\omega - \omega_s) \leftrightarrow \frac{2\gamma_0}{\pi},$$

isto é,

$$\sum_s \frac{|g_s|^2}{\omega_s} \delta(\omega - \omega_s) = \frac{m\gamma_0}{\pi \hbar \zeta^2},$$

ou seja,

$$\sum_s \frac{|g_s|^2}{\omega} \delta(\omega - \omega_s) \leftrightarrow \frac{m\gamma_0}{\pi \hbar \zeta^2},$$

ou ainda,

$$\sum_s |g_s|^2 \delta(\omega - \omega_s) \leftrightarrow \frac{m\gamma_0}{\pi \hbar \zeta^2} \omega.$$

Como mencionamos a respeito do modelo acima, de descoerência pura, definimos a densidade espectral como

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

Assim, densidade espectral ôhmica, para nós, significa, simplesmente, tomarmos

$$J(\omega) = \frac{m\gamma_0}{\pi \hbar \zeta^2} \omega$$

e vemos que podemos definir uma constante multiplicativa:

$$\eta \equiv \frac{m\gamma_0}{\pi\hbar\zeta^2}$$

e, incluindo uma frequência de corte ω_c , isto é,

$$J(\omega) = \eta\omega \exp\left(-\frac{\omega}{\omega_c}\right),$$

como normalmente é feito, inclusive na teoria de Caldeira e Leggett.

Como o modelo da partícula sobre o eixo x pode ser mapeado no modelo de spin & bósons

Vamos considerar tunelamento de um potencial com dois mínimos de mesmo formato, mas em pontos diferentes no eixo x . Consideremos dois potenciais harmônicos:

$$V_L(x) \equiv \frac{1}{2}m\omega_{ext}^2(x+a)^2$$

e

$$V_R(x) \equiv \frac{1}{2}m\omega_{ext}^2(x-a)^2.$$

Consideremos também um terceiro potencial definido da seguinte forma:

$$V(x) \equiv \begin{cases} \min[V_L(x), \frac{1}{2}m\omega_{ext}^2n^2a_0^2], & \text{se } x < 0, \\ \min[V_R(x), \frac{1}{2}m\omega_{ext}^2n^2a_0^2], & \text{se } x \geq 0. \end{cases}$$

Vamos então considerar apenas os estados não perturbados fundamentais como sendo as funções de onda fundamentais dos potenciais $V_L(x)$ e $V_R(x)$. Como ambos os potenciais são idênticos, as energias são as mesmas. No entanto, dependendo dos valores de a e de ω_{ext} podemos ter ou não tunelamento quando considerarmos o potencial $V(x)$. Vamos supor, no entanto, a aproximação em que $\hbar\omega_{ext}$ é bem maior do que a energia dos potenciais têm quando $x=0$, isto é,

$$\hbar\omega_{ext} \gtrsim \frac{1}{2}m\omega_{ext}^2a^2.$$

Vamos tentar ver como é que isto modifica o resultado para a função de onda. Considerando a base em que temos o estado fundamental $\psi_L(x)$ para $V_L(x)$ e o estado fundamental $\psi_R(x)$ para $V_R(x)$ como base, podemos escrever uma matriz 2×2 para a hamiltoniana não interagente com o reservatório térmico e diagonalizá-la. Assim,

$$H_0 \leftrightarrow \begin{bmatrix} \langle \psi_L | \frac{p^2}{2m} + V | \psi_L \rangle & \langle \psi_L | V | \psi_R \rangle \\ \langle \psi_R | V | \psi_L \rangle & \langle \psi_R | \frac{p^2}{2m} + V | \psi_R \rangle \end{bmatrix}.$$

Vamos usar aqui, portanto,

$$\psi_L(x) = \left(\frac{m\omega_{ext}}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega_{ext}}{2\hbar}(x+a)^2\right]$$

e

$$\psi_R(x) = \left(\frac{m\omega_{ext}}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega_{ext}}{2\hbar}(x-a)^2\right].$$

Para facilitar cálculos numéricos, vamos usar unidades de distância dada por

$$u \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{ext}}}.$$

Sejam, portanto,

$$\bar{x} \equiv \frac{x}{u}$$

e

$$\bar{a} \equiv \frac{a}{u}.$$

Como, por exemplo,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_R^2(x) = 1,$$

segue que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \bar{\psi}_R^2(\bar{x}) = 1,$$

onde definimos:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_L(\bar{x}) &\equiv \sqrt{u}\psi_L(x) \\ &= \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ext}}\right)^{1/4} \left(\frac{m\omega_{ext}}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega_{ext}}{2\hbar}(x+a)^2\right] \\ &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\bar{x}+\bar{a})^2\right] \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_R(\bar{x}) &\equiv \sqrt{u}\psi_R(x) \\ &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\bar{x}-\bar{a})^2\right]. \end{aligned}$$

Para energia, vamos usar unidades de rydberg, isto é, vamos medir tudo em unidades de $e^2/2a_0$. Então, os potenciais agora ficam escritos como

$$\begin{aligned} \bar{V}_L(\bar{x}) &\equiv \frac{2a_0}{e^2} V_L(x) \\ &= \frac{a_0\hbar\omega_{ext}}{e^2} (\bar{x}+\bar{a})^2. \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \bar{V}_R(\bar{x}) &\equiv \frac{2a_0}{e^2} V_R(x) \\ &= \frac{a_0\hbar\omega_{ext}}{e^2} (\bar{x}-\bar{a})^2. \end{aligned}$$

Mas é óbvio que se o estado fundamental de cada um dos dois potenciais componentes de $V(x)$ for localizado o bastante, então podemos escrever

$$\left\langle \psi_L \left| \frac{p^2}{2m} + V \right| \psi_L \right\rangle \approx \left\langle \psi_L \left| \frac{p^2}{2m} + V_L \right| \psi_L \right\rangle$$

e

$$\left\langle \psi_R \left| \frac{p^2}{2m} + V \right| \psi_R \right\rangle \approx \left\langle \psi_R \left| \frac{p^2}{2m} + V_R \right| \psi_R \right\rangle,$$

já que as funções de onda, ao quadrado, na região em torno de $x = 0$ serão quadraticamente pequenas na diagonal, contribuindo apenas de forma apreciável, cada qual, em torno de onde cada uma está centrada. Logo, os potenciais contribuirão apenas nestes pontos de máxima contribuição das funções de onda. Já fora da diagonal, no entanto, tudo é pequeno e se queremos considerar a primeira contribuição não nula, podemos usar:

$$\langle \psi_L | V | \psi_R \rangle \approx \frac{1}{2} m \omega_{ext}^2 a^2 \langle \psi_L | \psi_R \rangle$$

e

$$\langle \psi_R | V | \psi_L \rangle \approx \frac{1}{2} m \omega_{ext}^2 a^2 \langle \psi_R | \psi_L \rangle,$$

explicitando a superposição das funções de onda. Logo, por simetria, já que os potenciais são idênticos, podemos escrever:

$$H_0 \leftrightarrow \begin{bmatrix} E_0 & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & E_0 \end{bmatrix},$$

escolhendo todas as funções de onda reais, como é comum. Tomando a origem da escala de energia em E_0 , podemos simplesmente escrever

$$\begin{aligned} H_0 &\leftrightarrow \hbar\Omega \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \hbar\Omega \sigma_x \end{aligned}$$

e aí está σ_x do modelo de spin & bósons.

Agora vem a parte em que temos o acoplamento com os osciladores harmônicos do reservatório térmico ambiental. O operador da partícula que está acoplado é x e, portanto, podemos escrever:

$$x \leftrightarrow \begin{bmatrix} \langle \psi_L | x | \psi_L \rangle & \langle \psi_L | x | \psi_R \rangle \\ \langle \psi_R | x | \psi_L \rangle & \langle \psi_R | x | \psi_R \rangle \end{bmatrix}.$$

Obviamente,

$$\langle \psi_L | x | \psi_L \rangle = -a$$

e

$$\langle \psi_R | x | \psi_R \rangle = a,$$

exatamente. Como $\psi_L(x)\psi_R(x)$ é uma função par, segue que

$$\langle \psi_L | x | \psi_R \rangle = 0$$

e

$$\langle \psi_R | x | \psi_L \rangle = 0.$$

Logo,

$$\begin{aligned} x &\leftrightarrow \begin{bmatrix} -a & 0 \\ 0 & a \end{bmatrix} \\ &= -a \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ &= -a\sigma_z \end{aligned}$$

e aí está σ_z do modelo de spin & bósons. Se esse é o resultado para x , então, obviamente, segue que

$$\begin{aligned} x^2 &\leftrightarrow a^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= a^2 \mathbb{I} \end{aligned}$$

e, portanto, o termo proporcional a x^2 , isto é, $x^2 \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s \omega_s^2}$, não afeta a partícula, pois será proporcional à identidade.

E se tivéssemos um potencial um pouco diferente do outro, de forma que um deles tivesse uma energia fundamental um pouco diferente da do outro? Aí vem o termo a mais proporcional a σ_z que só faz com que os níveis de energia sejam corrigidos. Ou seja, suponha que a energia fundamental da esquerda seja $E_0 + \varepsilon$ e o da direita seja $E_0 - \varepsilon$. Então, tudo o que fazemos é adicionar, a H_0 , isto é, a $\hbar\Omega\sigma_x$, um termo $\varepsilon\sigma_z$ e as respectivas correções nas posições dos níveis de energia serão levadas em conta. Eis a essência do modelo de Caldeira e Leggett para o sistema spin & bósons:

$$H \leftrightarrow \hbar\Omega\sigma_x + \varepsilon\sigma_z + \sum_s \left(\frac{p_s^2}{2m_s} + \frac{1}{2}m_s\omega_s^2 x_s^2 \right) + a\sigma_z \sum_s c_s x_s + a^2 \mathbb{I} \sum_s \frac{c_s^2}{2m_s \omega_s^2}.$$

Ou, então, usando operadores de criação e destruição para os bósons,

$$\begin{aligned} H &\leftrightarrow \hbar\Omega\sigma_x + \varepsilon\sigma_z + \sum_s \hbar\omega_s \left(b_s^\dagger b_s + \frac{1}{2} \right) + \\ &+ a\sigma_z \sum_s \zeta g_s \sqrt{2m_s \hbar\omega_s} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_s \omega_s}} (b_s + b_s^\dagger) + a^2 \mathbb{I} \sum_s \frac{\zeta^2 g_s^2 2m_s \hbar\omega_s}{2m_s \omega_s^2}, \end{aligned}$$

isto é,

$$\begin{aligned} H &\leftrightarrow \hbar\Omega\sigma_x + \varepsilon\sigma_z + \sum_s \hbar\omega_s \left(b_s^\dagger b_s + \frac{1}{2} \right) + \\ &+ \hbar a \sigma_z \sum_s \zeta g_s (b_s + b_s^\dagger) + a^2 \mathbb{I} \sum_s + \hbar a^2 \mathbb{I} \sum_s \zeta^2 \frac{g_s^2}{\omega_s}. \end{aligned}$$

Aqui podemos escolher

$$\zeta \equiv \frac{1}{a}$$

e obtemos:

$$H \leftrightarrow \hbar\Omega\sigma_x + \varepsilon\sigma_z + \sum_s \hbar\omega_s \left(b_s^\dagger b_s + \frac{1}{2} \right) + \hbar\sigma_z \sum_s g_s (b_s + b_s^\dagger) + \hbar\mathbb{I} \sum_s \frac{g_s^2}{\omega_s},$$

com todos os termos com a dimensão de energia, como deve ser mesmo. Veja que o último termo é apenas um deslocamento na escala da energia, que sempre podemos ignorar. É como um tipo de Lamb shift. Tipicamente, então, fazendo essa renormalização, usamos, ao invés, a hamiltoniana de spin & bósons:

$$H_{sb} = \hbar\Omega\sigma_x + \varepsilon\sigma_z + \sum_s \hbar\omega_s \left(b_s^\dagger b_s + \frac{1}{2} \right) + \hbar\sigma_z \sum_s g_s (b_s + b_s^\dagger).$$

Para obter nosso modelo de descoerência pura, vemos que precisamos escolher os parâmetros do potencial tais que o primeiro estado excitado seja ainda muito alto assim como a barreira energética em $x = 0$, enquanto o estado fundamental seja bem mais baixo do que a altura da barreira. Basta, para isso, apenas aumentar a distância a e podemos eliminar o tunelamento quanto quisermos. Nesse caso,

$$\hbar\Omega \approx 0$$

e ficamos com

$$H_{sb} = \sum_s \hbar\omega_s \left(b_s^\dagger b_s + \frac{1}{2} \right) + \hbar\sigma_z \sum_s g_s (b_s + b_s^\dagger),$$

se também escolhermos mínimos simétricos dos dois lados do potencial, isto é, $\varepsilon = 0$.