

---

TECNOLOGÍAS CUÁNTICAS  
Y LA FÍSICA DE NO EQUILIBRIO EN MECÁNICA CUÁNTICA

---

AUTOR:

RAÚL ALEGRE

*Universidad de Zaragoza*



SUPERVISOR:  
DAVID ZUECO  
*Universidad de Zaragoza*

TRABAJO DE FIN DE GRADO  
2016  
GRADO EN FÍSICA



# Índice general

<b>Índice general</b>	<b>III</b>
<b>I Introducción</b>	<b>1</b>
§1 Objetivos y metodología . . . . .	1
§2 Preliminares . . . . .	2
<b>II El modelo de Caldeira - Legget</b>	<b>4</b>
§1 Motivación . . . . .	4
§2 Descripción del modelo . . . . .	5
§3 Resolución del modelo . . . . .	6
§4 Cálculo de valores esperados . . . . .	8
<b>III El modelo Espín - Bosón</b>	<b>12</b>
§1 Motivación . . . . .	12
§2 Descripción del modelo . . . . .	13
§3 Resolución - Non Interacting Blip Approximation . . . . .	15
<b>IV Aplicaciones y resultados</b>	<b>20</b>
§1 Disipación Óhmica . . . . .	20
§2 Cristal fotónico . . . . .	22
<b>V Conclusiones</b>	<b>24</b>
<b>References</b>	<b>25</b>



# Introducción

---

Ningún sistema está completamente aislado de su entorno. Muchas veces es esencial comprender este acoplamiento y ahí es donde este trabajo pretende arrojar algo de luz. En este capítulo presentamos brevemente los objetivos que perseguimos y más adelante introducimos las principales herramientas de mecánica cuántica que serán necesarias para seguir nuestro desarrollo.

## §1. Objetivos y metodología

Resumimos aquí las principales metas de este trabajo.

- Comprender la importancia de la interacción de un sistema con su entorno.
- Revisión bibliográfica de los principales modelos para estudiar sistemas cuánticos abiertos.
- Desarrollar de forma independiente un conocido modelo hasta llegar a una ecuación que describa la dinámica de un sistema que sea resoluble de forma numérica.
- Resolver de forma numérica el modelo desarrollado y comparar con resultados existentes en la literatura.
- Aplicar el algoritmo a un problema de interés actual.

Para poder cumplirlas, vamos a comenzar estudiando un modelo ampliamente estudiado que describe de forma general el acoplamiento de un sistema a su entorno, conocido como *modelo de Caldeira - Legget*. Después estudiaremos un caso particular de este modelo, conocido como *modelo Espín - Bosón*, y deduciremos una ecuación que describe la dinámica del sistema en un régimen conocido como NIBA. Por último, resolveremos esta ecuación de forma numérica para un par de sistemas concretos. El primero de ellos es típico en la literatura, mientras que el segundo, por su novedad, intenta mostrar la aplicabilidad de nuestro modelo.

## §2. Preliminares

A continuación describimos los principales conceptos de mecánica cuántica que estaremos utilizando. Para una descripción más completa, [1] es una referencia magnífica.

### §2.1. Imagen de Heisenberg

Es habitual trabajar con un formalismo en el cuál los estados  $|\psi(t)\rangle$  varían con el tiempo gobernados por la ecuación de Schrödinger, mientras que los operadores suelen ser independientes del tiempo. En este caso decimos que estamos en la *imagen de Schrödinger*.

Sin embargo, podemos trabajar con un formalismo equivalente en el que los estados permanecen constantes, mientras que los operadores presentan una evolución temporal. En este caso diremos que estamos trabajando en la *imagen de Heisenberg*. Obviamente, la evolución de los operadores también se deduce de la ecuación de Schrödinger, obteniéndose:

$$i\hbar\dot{A}_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar\left(\dot{A}_S(t)\right)_H, \quad (\text{I.1})$$

donde  $A_S$  y  $A_H$  representan los operadores en la imagen de Schrödinger y Heisenberg respectivamente. En el caso de que los operadores  $A_S$  no dependan del tiempo podremos simplificar la expresión anterior, obteniendo

$$i\hbar\dot{A}(t) = [A, H](t). \quad (\text{I.2})$$

Nótese que hemos suprimido los subíndices para aligerar la notación, pues la dependencia temporal de los operadores ya indica con qué formalismo trabajamos.

### §2.2. Baño de osciladores armónicos

En los modelos que estudiaremos a continuación será común enfrentarnos a Hamiltonianos de la forma

$$H_B = \sum_n H_n, \quad \text{con} \quad H_n = \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}k_n x_n^2, \quad (\text{I.3})$$

que representa un baño de osciladores armónicos desacoplados. Es bien sabido que para estudiar estos sistemas es muy útil el uso de los llamados *operadores de creación y destrucción*, definidos como

$$\begin{aligned} a_n &= \sqrt{\frac{m_n\omega_n}{2\hbar}} \left( x_n + \frac{i}{m_n\omega_n} p_n \right), & x_n &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{1}{m_n\omega_n} (a_n^\dagger + a_n), \\ a_n^\dagger &= \sqrt{\frac{m_n\omega_n}{2\hbar}} \left( x_n - \frac{i}{m_n\omega_n} p_n \right), & p_n &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} m_n\omega_n (a_n^\dagger - a_n), \end{aligned} \quad (\text{I.4})$$

siendo  $\omega_n^2 = k_n/m_n$ . Se demuestra sin dificultad que estos operadores cumplen las siguientes relaciones de conmutación:

$$[a_n, a_n^\dagger] = 1, \quad [N_n, a_n^\dagger] = a_n^\dagger, \quad [N_n, a_n] = -a_n, \quad (\text{I.5})$$

siendo  $N_n = a_n^\dagger a_n$ . Es útil definir estos operadores ya que permiten reescribir el Hamiltoniano como

$$H_B = \sum_n H_n, \quad \text{con} \quad H_n = \left( N_n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_n. \quad (\text{I.6})$$

De lo anterior se deduce que los autoestados de este Hamiltoniano serán de la forma

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots = \bigotimes_m |n_m\rangle, \quad \text{con} \quad N_m |n_m\rangle = n_m |n_m\rangle, \quad (\text{I.7})$$

y que la energía  $E$  correspondiente será

$$E = \sum_i E_{n_i} \quad \text{con} \quad E_{n_i} = \left( n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_n. \quad (\text{I.8})$$

### §2.3. Operadores de Pauli

Más adelante trabajaremos en un espacio de Hilbert bidimensional, donde los endomorfismos son representados por matrices  $2 \times 2$ . En estos casos es común utilizar la base formada por la matriz identidad y las llamadas *matrices de Pauli*, definidas como:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.9})$$

Es útil notar que satisfacen la relación de conmutación

$$\boxed{[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z}, \quad (\text{I.10})$$

así como sus permutaciones cíclicas. Estrechamente relacionados encontramos los operadores escalera, definidos por medio de las matrices

$$\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{I.11})$$

que no son autoadjuntos, pero cumplen  $(\sigma_+)^\dagger = \sigma_-$ . Además cumplen las siguientes relaciones de conmutación:

$$\boxed{[\sigma_z, \sigma_+] = 2\sigma_+, \quad [\sigma_z, \sigma_-] = -2\sigma_-, \quad [\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_z}, \quad (\text{I.12})$$

las cuáles nos serán útiles más adelante.

# El modelo de Caldeira - Legget

---

En este capítulo estudiaremos la importancia que puede tener la interacción de un sistema con su entorno. Comenzaremos analizando cuáles son las consecuencias de este acoplamiento, tanto desde una perspectiva clásica como cuántica. Continuaremos describiendo un modelo que da cuenta de esta interacción. Más adelante lo resolveremos para ver si el modelo refleja el comportamiento observado.

## §1. Motivación

No hace falta situarse en el marco de la física moderna para apreciar las consecuencias del acoplamiento de un sistema con su entorno. Existen multitud de ejemplos cotidianos que reflejan perfectamente las principales características de este fenómeno, como se muestra a continuación.

Consideremos una partícula de polvo suspendida en el aire. Si pudiéramos monitorizar su movimiento, veríamos que se mueve de forma aparentemente aleatoria. Es la fuerza que el entorno ejerce sobre el sistema la que otorga esta naturaleza *fluctuante*. Imaginemos ahora que soplamos hacia donde está la partícula, aumentando su velocidad. Lógicamente, la partícula se frenará enseguida, entregando su energía al entorno de forma irreversible y volviendo a su baile errático, mostrando la naturaleza *dissipativa* del acoplamiento.

Cuando el sistema de interés puede ser considerado cuántico, existen nuevas consecuencias de esta interacción. El acoplamiento con el entorno provocará que aparezca entrelazamiento entre los grados de libertad del sistema y aquellos del entorno, dando lugar a un proceso llamado *decoherencia*, en el cual una superposición coherente de estados puede ser destruida. Este proceso es sumamente relevante en computación cuántica, donde la coherencia entre qubits  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$  es utilizada como recurso ([2]).

## §2. Descripción del modelo

En mecánica clásica, el acoplamiento con el entorno suele ser modelado introduciendo un término de rozamiento viscoso. Sin embargo, este acercamiento no es compatible con la mecánica cuántica, donde debemos operar con la ecuación de Schrödinger, que implica que la energía se conserva si el Hamiltoniano es independiente del tiempo.

Para resolver la situación, consideraremos nuestro sistema junto con el entorno como un gran sistema cerrado. Aunque la energía se disipe del sistema al entorno, globalmente se conserva. Después de tener la descripción global, trazaremos sobre los grados de libertad del entorno para obtener la física del sistema. El lector que quiera concretar más detalles debería consultar [3].

El modelo original de Caldeira - Leggett propone un Hamiltoniano de la forma

$$H = H_S + H_B + H_I, \quad (\text{II.1})$$

donde se separan las contribuciones correspondientes al sistema, al entorno y al acoplamiento que existe entre ambos. Veamos la forma explícita de cada una de estas contribuciones.

- Por simplicidad, supondremos que el sistema tiene un único grado de libertad, y que puede ser representado por una partícula de masa  $m$  y descrito por una coordenada  $q$  sujeto a un potencial  $V(q)$ . De esta manera,

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + V(q), \quad (\text{II.2})$$

siendo  $p$  el momento de la partícula. Por supuesto, ni la coordenada  $q$  necesita ser geométrica ni debe representar una partícula real.

- Para los grados de libertad del entorno se propone un baño de osciladores armónicos, de modo que

$$H_B = \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2} k_n x_n^2 \right), \quad (\text{II.3})$$

siendo  $k_n$  la constante elástica de cada oscilador, descrito por las coordenadas  $p_n$  y  $x_n$ . Como veremos más adelante, no es necesario estudiar la naturaleza microscópica del entorno para caracterizar estos osciladores, sino que bastará definir una densidad espectral basada en un enfoque fenomenológico.

- Por último, se define el acoplamiento como

$$H_I = -q \sum_n c_n x_n + q^2 \sum_n \frac{c_n^2}{2k_n}, \quad (\text{II.4})$$

siendo  $c_n$  las constantes de acoplamiento. El primer término puede ser entendido como una linealización de un Hamiltoniano de interacción. El segundo término se conoce como potencial de renormalización, y sirve para que el mínimo del Hamiltoniano siga estando caracterizado por  $V(q)$ .

### §3. Resolución del modelo

Con el modelo ya planteado, nuestro objetivo es aislar la dinámica del sistema, lo que equivale a hallar la ecuación que gobierna la evolución de  $q(t)$ . Como veremos, esta ecuación reproducirá la naturaleza fluctuante y disipativa del acoplamiento. Para estudiar la dinámica trabajaremos en la imagen de Heisenberg, donde la evolución de un operador viene dada por (I.2).

#### §3.1. Grados de libertad del entorno

Comenzaremos estudiando la dinámica del entorno, dada por  $p_n(t)$  y  $x_n(t)$ . Para ello, conviene recordar que

$$[g(x_m), p_m] = \delta_{nm} i\hbar g'(x_n), \quad [x_n, f(p_m)] = \delta_{nm} i\hbar f'(p_n).$$

Aplicando ahora (I.2) a los operadores momento encontramos:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{p}_m(t) &= [p_m, H_S + H_B + H_I](t) \\ &= \left[ p_m, \frac{p^2}{2m} + V(q) \right](t) + \left[ p_m, \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2} k_n x_n^2 \right) \right](t) + \left[ p_m, -q \sum_n c_n x_n + q^2 \sum_n \frac{c_n^2}{2k_n} \right](t) \\ &= \left[ p_m, \sum_n \frac{1}{2} k_n x_n^2 \right](t) + \left[ p_m, -q \sum_n c_n x_n \right](t) \\ &= -i\hbar k_n x_n(t) + i\hbar c_n q(t). \end{aligned}$$

Análogamente, los operadores de posición evolucionan como:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{x}_m(t) &= [x_m, H_S + H_B + H_I](t) \\ &= \left[ x_m, \frac{p^2}{2m} + V(q) \right](t) + \left[ x_m, \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2} k_n x_n^2 \right) \right](t) + \left[ x_m, -q \sum_n c_n x_n + q^2 \sum_n \frac{c_n^2}{2k_n} \right](t) \\ &= \left[ x_m, \sum_n \frac{p_n^2}{2m_n} \right](t) \\ &= i\hbar \frac{p_m(t)}{m_m}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, encontramos que los operadores  $x_n(t)$  y  $p_n(t)$  satisfacen el sistema:

$$\begin{aligned} \dot{p}_n(t) &= -k_n x_n(t) + c_n q(t), \\ \dot{x}_n(t) &= \frac{p_n(t)}{m_n}. \end{aligned} \tag{II.5}$$

Si pensamos en  $q(t)$  simplemente como una función del tiempo, no es difícil integrar el sistema. Para ello, es conveniente introducir  $\omega_n = \sqrt{k_n/m_n}$ , de modo que:

$$p_n(t) = -m_n \omega_n x_n(0) \sin(\omega_n t) + p_n(0) \cos(\omega_n t) + c_n \int_0^t ds \cos(\omega_n(t-s)) q(s), \tag{II.6}$$

$$x_n(t) = x_n(0) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) + \frac{c_n}{m_n \omega_n} \int_0^t ds \sin(\omega_n(t-s)) q(s). \tag{II.7}$$

### §3.2. Grados de libertad del sistema

Seguiremos el mismo procedimiento, hallando la dinámica de los operadores  $p(t)$  y  $q(t)$ .

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{p}(t) &= [p, H_S + H_B + H_I](t) \\
&= \left[ p, \frac{p^2}{2m} + V(q) \right](t) + \left[ p, \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}k_n x_n^2 \right) \right](t) + \left[ p, -q \sum_n c_n x_n + q^2 \sum_n \frac{c_n^2}{2k_n} \right](t) \\
&= [p, V(q)](t) + \left[ p, -q \sum_n c_n x_n \right](t) + \left[ p, q^2 \sum_n \frac{c_n^2}{2k_n} \right](t) \\
&= -i\hbar V'(q(t)) + i\hbar \sum_n c_n x_n(t) - i\hbar q(t) \sum_n \frac{c_n^2}{k_n}.
\end{aligned}$$

Análogamente para el operador  $q(t)$ :

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{q}(t) &= [q, H_S + H_B + H_I](t) \\
&= \left[ q, \frac{p^2}{2m} + V(q) \right](t) + \left[ q, \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}k_n x_n^2 \right) \right](t) + \left[ q, -q \sum_n c_n x_n + q^2 \sum_n \frac{c_n^2}{2k_n} \right](t) \\
&= \left[ q, \frac{p^2}{2m} \right](t) \\
&= i\hbar \frac{p(t)}{m}.
\end{aligned}$$

Por tanto, encontramos que los operadores  $p(t)$  y  $q(t)$  satisfacen el sistema:

$$\begin{aligned}
\dot{p}(t) &= -V'(q(t)) + \sum_n c_n x_n(t) - q(t) \sum_n \frac{c_n^2}{k_n}, \\
\dot{q}(t) &= \frac{p(t)}{m}.
\end{aligned} \tag{II.8}$$

En este caso el sistema no parece fácil de integrar, así que tendremos que hacer un poco de trabajo.

### §3.3. Eliminación de grados de libertad del entorno

Claramente (II.8) puede ser reescrito como una ecuación de segundo orden para  $q(t)$ , quedando:

$$m\ddot{q}(t) + V'(q(t)) + q(t) \sum_n \frac{c_n^2}{k_n} = \sum_n c_n x_n(t). \tag{II.9}$$

Donde hemos resaltado dónde aparece el acoplamiento con el entorno. Ahora bien, podemos sustituir la expresión para  $x_n(t)$  hallada en (II.6) y así eliminar los grados de libertad del entorno en la ecuación. Para ello es conveniente reescribir algunas fórmulas. En, primer lugar, es útil la siguiente identidad:

$$\int_0^t \underbrace{ds \sin(\omega_n(t-s))}_{dv} \underbrace{q(s)}_u = \frac{1}{\omega_n} [\cos(\omega_n(t-s)) q(s)]_{s=0}^{s=t} - \frac{1}{\omega_n} \int_0^t ds \cos(\omega_n(t-s)) \dot{q}(s)$$

$$= \frac{1}{\omega_n} [q(t) - \cos(\omega_n t) q(0)] - \frac{1}{\omega_n} \int_0^t ds \cos(\omega_n(t-s)) \dot{q}(s),$$

puesto que nos permite escribir el miembro derecho de (II.9) como:

$$\begin{aligned} \sum_n c_n x_n(t) &= \sum_n c_n \left[ x_n(0) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) + \frac{c_n}{m_n \omega_n} \int_0^t ds \sin(\omega_n(t-s)) q(s) \right] \\ &= \sum_n c_n \left[ \left( x_n(0) - \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} q(0) \right) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} q(t) - \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} \int_0^t ds \cos(\omega_n(t-s)) \dot{q}(s) \right]. \end{aligned} \quad (\text{II.10})$$

Para aligerar la notación definimos ahora

$$\begin{aligned} \xi(t) &= \sum_n c_n \left[ \left( x_n(0) - \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} q(0) \right) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) \right], \\ \gamma(t) &= \frac{1}{m} \sum_n \frac{c_n^2}{k_n} \cos(\omega_n t), \end{aligned}$$

de modo que (II.10) se escribe como:

$$\sum_n c_n x_n(t) = \xi(t) + q(t) \sum_n \frac{c_n^2}{k_n} - m \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s). \quad (\text{II.11})$$

Ahora, basta substituir (II.11) en (II.9) para obtener la expresión final que describe la dinámica del sistema.

$$\boxed{m\ddot{q}(t) + m \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s) + V'(q(t)) = \xi(t)}. \quad (\text{II.12})$$

Con esta notación, queda claro que  $\gamma(t)$  es un núcleo que representa la disipación de la energía hacia el entorno y  $\xi(t)$  es una fuerza que da cuenta de las fluctuaciones provocadas por el acoplamiento.

## §4. Cálculo de valores esperados

Hasta ahora hemos sido capaces de reproducir la naturaleza fluctuante y disipativa del acoplamiento del sistema con el entorno. Ahora estamos interesados en hacer un análisis más profundo, por ejemplo, viendo la estadística asociada a las fluctuaciones. En el próximo capítulo la utilidad de este acercamiento resultará evidente.

Para comenzar, rescatamos un resultado de mecánica cuántica estadística ([1]), que nos dice que cuando el baño es un reservorio de calor, el operador de densidad toma la forma

$$\rho_B = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_B},$$

siendo  $Z = \text{Tr}(e^{-\beta H_B})$ ,  $\beta = 1/k_B T$  y  $H_B$  el Hamiltoniano del baño. Con el operador de densidad establecido, estamos en condiciones de hacer trazas para hallar valores esperados.

### §4.1. Operadores de creación y destrucción

Nuestras magnitudes dependen de los operadores posición y momento, que según (I.4) están en correspondencia con los operadores de creación y destrucción. Por lo tanto, conviene empezar hallando los valores esperados para estos últimos.

No reproduciremos todas las cuentas en detalle, pero es trivial demostrar que  $\langle a_n \rangle = 0$  o que  $\langle a_n a_m \rangle = 0$ . Tomando adjuntos se sigue que  $\langle a_n^\dagger \rangle = 0$  y que  $\langle a_n^\dagger a_m^\dagger \rangle = 0$ . Con un poco más de trabajo se encuentra que  $\langle a_n^\dagger a_m \rangle = 0$  si  $n \neq m$ . Sin embargo, esto no es cierto para  $n = m$ , como se muestra a continuación.

$$\begin{aligned}
\langle a_m^\dagger a_m \rangle &= \text{Tr} \left( a_m^\dagger a_m \rho_B \right) = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left( a_m^\dagger a_m e^{-\beta H_B} \right) \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{i_1, i_2, \dots} \langle i_1, i_2, \dots | a_m^\dagger a_m e^{-\beta H_B} | i_1, i_2, \dots \rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{i_1, i_2, \dots} e^{-\beta \sum_k E_{i_k}} \langle i_1, i_2, \dots | a_m^\dagger a_m | i_1, i_2, \dots \rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{i_1, i_2, \dots} e^{-\beta \sum_k E_{i_k}} \langle i_m | a_m^\dagger a_m | i_m \rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{i_1, i_2, \dots} e^{-\beta \sum_k E_{i_k}} \cdot i_m.
\end{aligned} \tag{II.13}$$

Para evaluar esta suma, en primer lugar vamos a factorizar la función de partición, de modo que:

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Tr} \left( e^{-\beta H_B} \right) = \sum_{i_1, i_2, \dots} \langle i_1, i_2, \dots | e^{-\beta H_B} | i_1, i_2, \dots \rangle \\
&= \sum_{i_1, i_2, \dots} e^{-\beta \sum_k E_{i_k}} = \sum_{i_1, i_2, \dots} \prod_k e^{-\beta E_{i_k}} \\
&= \prod_k \left( \sum_{i_k} e^{-\beta E_{i_k}} \right) = \prod_k \left( \sum_{i_k} e^{-\beta (i_k + \frac{1}{2}) \hbar \omega_k} \right) \\
&= \prod_k \left( \sum_{i_k} e^{-\beta i_k \hbar \omega_k} e^{-\frac{1}{2} \hbar \omega_k} \right) = \prod_k \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_k}} e^{-\frac{1}{2} \hbar \omega_k} \right).
\end{aligned} \tag{II.14}$$

Operando de manera similar, pero aislando la suma en el oscilador  $m$ , encontramos:

$$\begin{aligned}
\sum_{i_1, i_2, \dots} e^{-\beta \sum_k E_{i_k}} \cdot i_m &= \left( \sum_{i_m} i_m e^{-\beta E_{i_m}} \right) \prod_{k \neq m} \left( \sum_{i_k} e^{-\beta E_{i_k}} \right) \\
&= \left( \sum_{i_m} i_m e^{-\beta i_m \hbar \omega_m} e^{-\frac{1}{2} \hbar \omega_m} \right) \prod_{k \neq m} \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_k}} e^{-\frac{1}{2} \hbar \omega_k} \right)
\end{aligned}$$

$$= \left( \frac{e^{-\beta\hbar\omega_m}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega_m})^2} e^{-\frac{1}{2}\hbar\omega_m} \right) \prod_{k \neq m} \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_k}} e^{-\frac{1}{2}\hbar\omega_k} \right). \quad (\text{II.15})$$

Finalmente, podemos sustituir (II.14) y (II.15) en (II.13) para obtener:

$$\langle a_m^\dagger a_m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{i_1, i_2, \dots} e^{\beta \sum_k E_{i_k}} \cdot i_m = \frac{e^{-\beta\hbar\omega_m}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_m}}.$$

Podemos simplificar la expresión anterior usando la identidad

$$\frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{1}{2} (\coth(x/2) - 1),$$

lo que nos permite resumir todas las cuentas anteriores en un solo resultado:

$$\boxed{\langle a_n^\dagger a_m \rangle = \delta_{nm} \frac{1}{2} (\coth[\beta\hbar\omega_m/2] - 1)}. \quad (\text{II.16})$$

Recordando las relaciones de conmutación para estos operadores, se obtiene inmediatamente:

$$\boxed{\langle a_n a_m^\dagger \rangle = \delta_{nm} \frac{1}{2} (\coth[\beta\hbar\omega_m/2] + 1)}. \quad (\text{II.17})$$

## §4.2. Operadores de posición y momento

Usando los resultados del apartado anterior y las relaciones (I.4), es inmediato comprobar que  $\langle x_n(0) \rangle = 0$  y  $\langle p_n(0) \rangle = 0$ . Por otra parte, los momentos de segundo orden no se anulan, encontrando para la posición:

$$\begin{aligned} \langle x_n(0)x_m(0) \rangle &= \left\langle \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{1}{m_n \omega_n} (a_n^\dagger + a_n) \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{1}{m_m \omega_m} (a_m^\dagger + a_m) \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{1}{m_n \omega_n} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{1}{m_m \omega_m} \langle a_n^\dagger a_m^\dagger + a_n^\dagger a_m + a_n a_m^\dagger + a_n a_m \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{1}{m_n \omega_n} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{1}{m_m \omega_m} \cdot \delta_{nm} \coth[\beta\hbar\omega_m/2] \\ &= \delta_{nm} \frac{\hbar}{2} \frac{1}{m_n \omega_n} \coth[\beta\hbar\omega_m/2]. \end{aligned}$$

De forma completamente análoga podemos calcular:

$$\begin{aligned} \langle p_n(0)p_m(0) \rangle &= \delta_{nm} \frac{\hbar}{2} m_n \omega_n \coth[\beta\hbar\omega_m/2], \\ \langle x_n(0)p_m(0) \rangle &= \delta_{nm} i \frac{\hbar}{2}. \end{aligned}$$

Podemos encapsular todos estos resultados en las siguientes relaciones:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle x_n(0)x_m(0) \rangle &= \frac{\langle p_n(0)p_m(0) \rangle}{(m_n \omega_n)^2} = \delta_{nm} \frac{\hbar}{2} \frac{1}{m_n \omega_n} \coth[\beta\hbar\omega_m/2], \\ \langle x_n(0)p_m(0) \rangle &= -\langle p_n(0)x_m(0) \rangle = \delta_{nm} i \frac{\hbar}{2}. \end{aligned}} \quad (\text{II.18})$$

### §4.3. Fuerza de acoplamiento

Ahora estamos en condiciones de estudiar la fuerza que ejerce el entorno sobre el sistema. Conviene separar el término transitorio, escribiendo  $\xi(t) = \zeta(t) - m\gamma(t)q(0)$ , de modo que

$$\zeta(t) = \sum_n c_n \left[ x_n(0) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) \right]. \quad (\text{II.19})$$

De los resultados anteriores se sigue que  $\langle \zeta(t) \rangle = 0$ . Por su parte, el comportamiento de la correlación  $\langle \zeta(t') \zeta(t) \rangle$  se muestra a continuación.

$$\begin{aligned} \langle \zeta(t') \zeta(t) \rangle &= \left\langle \left( \sum_n c_n \left[ x_n(0) \cos(\omega_n t') + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t') \right] \right) \left( \sum_m c_m \left[ x_m(0) \cos(\omega_m t) + \frac{p_m(0)}{m_m \omega_m} \sin(\omega_m t) \right] \right) \right\rangle \\ &= \sum_{m,n} c_n c_m \left[ \langle x_n(0) x_m(0) \rangle \cos(\omega_n t') \cos(\omega_m t) + \frac{\langle p_n(0) p_m(0) \rangle}{(m_n \omega_n)(m_m \omega_m)} \sin(\omega_n t') \sin(\omega_m t) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\langle x_n(0) p_m(0) \rangle}{m_m \omega_m} \cos(\omega_n t') \sin(\omega_m t) + \frac{\langle p_n(0) x_m(0) \rangle}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t') \cos(\omega_m t) \right] \\ &= \sum_n \frac{\hbar}{2} \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \left[ \coth(\beta \hbar \omega_n / 2) \cos(\omega_n t') \cos(\omega_n t) + \coth(\beta \hbar \omega_n / 2) \sin(\omega_n t') \sin(\omega_n t) \right. \\ &\quad \left. + i \cos(\omega_n t') \sin(\omega_n t) - i \sin(\omega_n t') \cos(\omega_n t) \right] \\ &= \sum_n \frac{\hbar}{2} \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \left[ \coth(\beta \hbar \omega_n / 2) \cos(\omega_n (t' - t)) - i \sin(\omega_n (t' - t)) \right]. \end{aligned}$$

Como vemos, aparece una parte imaginaria debido a que en general,  $\zeta(t')$  y  $\zeta(t)$  no conmutan. En estos casos suele estudiarse la función de correlación simetrizada, que en nuestro caso quedaría simplemente:

$$\boxed{\frac{1}{2} \langle \zeta(t') \zeta(t) + \zeta(t) \zeta(t') \rangle = \sum_n \frac{\hbar}{2} \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \coth(\beta \hbar \omega_n / 2) \cos(\omega_n (t' - t))}. \quad (\text{II.20})$$

Como veremos en el próximo capítulo, estos mismos desarrollos teóricos serán esenciales para llegar al resultado estrella de este trabajo. Conviene además escribir al menos una vez este tipo de cálculos porque en la literatura son siempre omitidos (salvo con la pequeña excepción de [4, 5]).

# El modelo Espín - Bosón

---

El capítulo anterior trataba de describir con cierta generalidad el acoplo de un sistema con su entorno. En ningún momento nos preocupamos por especificar la forma del potencial  $V(q)$  ni intentamos cuantificar el acoplo. En este capítulo nos centraremos en un caso particularmente simple y veremos cómo aplicar las ideas anteriores. Principalmente seguiremos el desarrollo de [6].

## §1. Motivación

La proyección de un espín  $1/2$ , la polarización de un fotón o la extrañeza de un mesón neutro  $K$  son ejemplos en los cuáles el grado de libertad del sistema puede tomar solo dos valores. Dicho de otra manera, el estado del sistema está restringido a un espacio de Hilbert *bidimensional*.

Una situación mucho más frecuente es la de aquellos sistemas con un grado de libertad  $q$  continuo, pero con un potencial  $V(q)$  como el mostrado en la figura III.1. Si la energía disponible no es suficiente para superar la barrera de potencial o para alcanzar un estado excitado, el grado de libertad estará confinado a tomar dos valores y, en la práctica, estaremos en la situación del párrafo anterior.

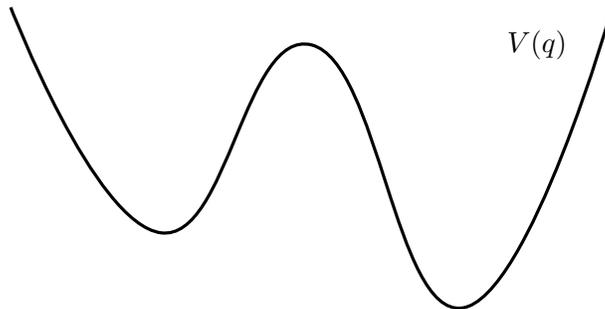


Figura III.1: Potencial con dos pozos.

¿Qué tienen de interesantes estos sistemas? Son suficientemente simples como para aplicar la teoría y obtener resultados, sin dejar de tener una riqueza que nos permita percibir la aplicabilidad del modelo de Caldeira - Legget. Tal es su importancia, que este caso particular tiene su propio nombre en la literatura, el modelo Espín - Bosón.

## §2. Descripción del modelo

Vamos a comenzar rescatando las principales ecuaciones del modelo de Caldeira-Legget. Recordemos que el Hamiltoniano toma la forma:

$$H = H_S + H_B + H_I.$$

Como el estado del sistema vive en un espacio de Hilbert bidimensional, podemos usar una base formada por los operadores de Pauli. En la siguiente tabla mostramos la correspondencia comúnmente adoptada en la literatura entre los dos modelos.

Modelo	$H_S$	$H_B$	$H_I$
Caldeira - Legget	$\frac{p^2}{2m} + V(q)$	$\sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}k_n x_n^2 \right)$	$-q \sum_n c_n x_n + q^2 \sum_n \frac{c_n^2}{2k_n}$
Espín - Bosón	$-\frac{1}{2}\hbar\Delta_0\sigma_x + \frac{1}{2}\varepsilon\sigma_z$	$\sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}k_n x_n^2 \right)$	$\frac{1}{2}\sigma_z \sum_n c_n x_n + \frac{1}{4} \sum_n \frac{c_n^2}{2k_n}$

Aquí  $\Delta_0$  representa la frecuencia asociada a las transiciones de efecto túnel entre los dos pozos del potencial, mientras que  $\varepsilon$  representa una energía que destruye la degeneración de los dos estados. Con todo lo anterior, el Hamiltoniano para el modelo Espín - Bosón queda:

$$H = -\frac{1}{2}\hbar\Delta_0\sigma_x + \frac{1}{2}\varepsilon\sigma_z + \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}k_n x_n^2 \right) + \frac{1}{2}\sigma_z \sum_n c_n x_n + \frac{1}{4} \sum_n \frac{c_n^2}{2k_n}.$$

Como se observa, el término correspondiente a la renormalización del potencial es ahora una constante, ya que  $\sigma_z^2 = \mathbb{1}$ , por lo que puede ser desechado. Sin embargo, es más conveniente absorber este término reescribiendo el Hamiltoniano de la siguiente forma:

$$H = -\frac{1}{2}\hbar\Delta_0\sigma_x + \frac{1}{2}\varepsilon\sigma_z + \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}k_n [x_n - \delta_n\sigma_z]^2 \right), \quad (\text{III.1})$$

donde  $\delta_n = -c_n/2k_n$ . De esta manera queda más clara la física del sistema, pues vemos que el acoplamiento depende de la distancia que haya entre la partícula y cada oscilador.

### §2.1. Operadores de desplazamiento

Visto lo anterior, podemos realizar una transformación unitaria  $\mathcal{U}$  que diagonalice casi todo el Hamiltoniano. Para ello, bastaría desplazar cada oscilador una distancia  $\delta_n\sigma_z$ , de modo que

$$\mathcal{U}x_n\mathcal{U}^\dagger = x_n + \delta_n\sigma_z \quad \text{para cada } x_n. \quad (\text{III.2})$$

Para ello, definamos los operadores de desplazamiento (ver [7]) como

$$D_n(\alpha_n) = e^{\alpha_n a_n^\dagger - \bar{\alpha}_n a_n} \quad \text{con} \quad \alpha_n \in \mathbb{C}.$$

¿Por qué son importantes? Resulta que la transformación anterior es unitaria, y cumple unas propiedades que nos serán muy convenientes. En concreto, satisfacen:

$$D_n(\alpha_n) a_n D_n^\dagger(\alpha_n) = a_n - \alpha_n, \quad D_n(\alpha_n) a_n^\dagger D_n^\dagger(\alpha_n) = a_n^\dagger - \bar{\alpha}_n.$$

Como el operador posición  $x_n$  se puede poner en función de  $a_n$  y  $a_n^\dagger$ , se comprueba sin dificultad que

$$D_n(\alpha_n) x_n D_n^\dagger(\alpha_n) = x_n - \sqrt{\frac{\hbar}{2 m_n \omega_n}} [\alpha_n + \bar{\alpha}_n]. \quad (\text{III.3})$$

Para que se cumpla (III.2), basta elegir el  $\alpha_n$  adecuado comparando con (III.3), de modo que finalmente podemos definir el operador

$$\mathcal{U} = \prod_n D_n(\alpha_n) \quad \text{con} \quad \alpha_n = -\frac{1}{2\sqrt{\frac{\hbar}{2 m_n \omega_n}}} \delta_n \sigma_z, \quad (\text{III.4})$$

que cumple las propiedades buscadas.

Vamos a reescribir las ideas que acabamos de introducir con la notación habitual en la literatura. Para ello, es conveniente notar que  $\alpha_n$  satisface

$$\alpha_n a_n^\dagger - \bar{\alpha}_n a_n = -\frac{1}{2} i \sigma_z \left( \frac{c_n}{\hbar k_n} \right) p_n, \quad \text{por lo que} \quad D_n(\alpha_n) = e^{-\frac{1}{2} i \sigma_z \frac{c_n}{\hbar k_n} p_n},$$

de modo que el operador  $\mathcal{U}$  se puede escribir como

$$\mathcal{U} = e^{-\frac{1}{2} i \sigma_z \Omega}, \quad \text{con} \quad \Omega = \sum_n \frac{c_n}{\hbar k_n} p_n. \quad (\text{III.5})$$

## §2.2. Transformación del Hamiltoniano

Hemos elegido la transformación unitaria  $\mathcal{U}$  dada por (III.5) para que el nuevo Hamiltoniano tenga diagonalizada la parte al acoplamiento. En concreto, partimos de una transformación de la forma

$$H' = \mathcal{U} H \mathcal{U}^\dagger, \quad (\text{III.6})$$

y sustituyendo la expresión de  $H$  dada en (III.1) encontramos

$$\begin{aligned} H' &= \mathcal{U} \left\{ -\frac{1}{2} \hbar \Delta_0 \sigma_x + \frac{1}{2} \varepsilon \sigma_z + \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2} k_n [x_n - \delta_n \sigma_z]^2 \right) \right\} \mathcal{U}^\dagger \\ &= \mathcal{U} \left\{ -\frac{1}{2} \hbar \Delta_0 \sigma_x + \frac{1}{2} \varepsilon \sigma_z \right\} \mathcal{U}^\dagger + \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2} k_n x_n^2 \right). \end{aligned}$$

Para calcular la transformación de esa primera contribución, aprovecharemos que las exponenciales de operadores de Pauli son conocidas, de modo que podemos poner

$$\mathcal{U} = e^{-\frac{1}{2}i\sigma_z\Omega} = \cos\left(\frac{\Omega}{2}\right) - i\sigma_z \sin\left(\frac{\Omega}{2}\right), \quad (\text{III.7})$$

$$\mathcal{U}^\dagger = e^{+\frac{1}{2}i\sigma_z\Omega} = \cos\left(\frac{\Omega}{2}\right) + i\sigma_z \sin\left(\frac{\Omega}{2}\right). \quad (\text{III.8})$$

Con la información anterior, es trivial que  $\mathcal{U}\sigma_z\mathcal{U}^\dagger = \sigma_z$  y que además:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}\sigma_x\mathcal{U}^\dagger &= \left(\cos\left(\frac{\Omega}{2}\right) - i\sigma_z \sin\left(\frac{\Omega}{2}\right)\right) \sigma_x \left(\cos\left(\frac{\Omega}{2}\right) + i\sigma_z \sin\left(\frac{\Omega}{2}\right)\right) \\ &= \sigma_x \cos^2\left(\frac{\Omega}{2}\right) + i\sigma_x\sigma_z \sin\left(\frac{\Omega}{2}\right) \cos\left(\frac{\Omega}{2}\right) - i\sigma_z\sigma_x \sin\left(\frac{\Omega}{2}\right) \cos\left(\frac{\Omega}{2}\right) + \sigma_z\sigma_x\sigma_z \sin^2\left(\frac{\Omega}{2}\right) \\ &= \sigma_x \left[\cos^2\left(\frac{\Omega}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\Omega}{2}\right)\right] + \sigma_y \left[2\sin\left(\frac{\Omega}{2}\right) \cos\left(\frac{\Omega}{2}\right)\right] \\ &= \sigma_x \cos\Omega + \sigma_y \sin\Omega. \end{aligned}$$

Una vez más encontramos que es común utilizar una notación ligeramente distinta, haciendo uso de los operadores escalera. Se comprueba sin dificultad que podemos escribir lo anterior como

$$U\sigma_x\mathcal{U}^\dagger = \sigma_x \cos\Omega + \sigma_y \sin\Omega = \sigma_+ e^{-i\Omega} + \sigma_- e^{i\Omega}. \quad (\text{III.9})$$

En cualquier caso, ya estamos en condiciones de expresar el Hamiltoniano transformado completamente, obteniendo la conocida expresión para el modelo Espín - Bosón en la base de osciladores desplazados:

$$\boxed{H' = -\frac{1}{2}\hbar\Delta_0 (\sigma_+ e^{-i\Omega} + \sigma_- e^{i\Omega}) + \frac{1}{2}\varepsilon\sigma_z + \sum_n \left(\frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}k_n x_n^2\right)}. \quad (\text{III.10})$$

### §3. Resolución - Non Interacting Blip Approximation

Nuestro siguiente objetivo es extraer la dinámica del sistema (dada por  $\sigma_z(t)$ ) a partir del Hamiltoniano encontrado en (III.10). Existen varias maneras de afrontar este problema, cada una con sus ventajas en su rango de aplicación y sus inconvenientes. Por ejemplo, podríamos suponer que el acoplamiento es muy débil y hacer uso de la teoría de perturbaciones. Nuestro enfoque es algo distinto, y funciona especialmente bien en el límite de bajas temperaturas para sistemas simétricos con  $\varepsilon = 0$  ([8]).

En particular, nosotros vamos a estudiar la conocida como *NIBA - Non Interacting Blip Approximation*. La motivación original que da lugar a esta aproximación es poco transparente ([6]) y por ello mostraremos aquí una explicación alternativa, propuesta por [9]. La idea es ir deduciendo ecuaciones del movimiento igual que hicimos en el capítulo anterior, y hacer ciertas aproximaciones físicamente plausibles cuando no podamos avanzar más.

Trabajaremos en el caso simétrico en el que no se aplica una excitación externa y por tanto  $\varepsilon = 0$ . Por referencia, escribimos el Hamiltoniano de interés para esta sección.

$$H' = -\frac{1}{2}\hbar\Delta_0 (\sigma_+ e^{-i\Omega} + \sigma_- e^{i\Omega}) + \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}k_n x_n^2 \right). \quad (\text{III.11})$$

### §3.1. Evolución de los operadores de Pauli

Al igual que hicimos en el capítulo anterior, vamos a comenzar estudiando la dinámica de algunos operadores utilizando (I.2). En concreto, para los operadores de Pauli encontramos

$$\dot{\sigma}_+(t) = i\frac{1}{2}\Delta_0 \sigma_z(t) e^{i\Omega(t)}. \quad (\text{III.12})$$

De nuevo, pensando en  $\sigma_z(t)$  como una función, podemos integrar (III.12) y hallar  $\sigma_+(t)$ . De aquí se deduce el valor de  $\sigma_-(t)$  sin más que tomar adjuntos:

$$\boxed{\sigma_+(t) = i\frac{1}{2}\Delta_0 \int_0^t dt' \sigma_z(t') e^{i\Omega(t')}, \quad \sigma_-(t) = -i\frac{1}{2}\Delta_0 \int_0^t dt' \sigma_z(t') e^{-i\Omega(t')}}. \quad (\text{III.13})$$

### §3.2. Evolución de $\sigma_z(t)$

Ahora vamos a aplicar el mismo enfoque a  $\sigma_z(t)$ . Su dinámica en este caso viene dada por

$$i\hbar\dot{\sigma}_z(t) = -\hbar\Delta_0 (\sigma_+(t)e^{-i\Omega(t)} - \sigma_-(t)e^{i\Omega(t)}),$$

por lo que introduciendo las relaciones (III.13) obtenemos:

$$\boxed{\dot{\sigma}_z(t) = -\frac{1}{2}\Delta_0^2 \int_0^t dt' (\sigma_z(t') e^{i\Omega(t')} e^{-i\Omega(t)} + \sigma_z(t') e^{-i\Omega(t')} e^{i\Omega(t)})}. \quad (\text{III.14})$$

Nótese que de momento todos los resultados son exactos. Las aproximaciones vendrán a continuación.

### §3.3. Dinámica del entorno - Primera aproximación

Hasta ahora no hemos prestado atención a  $\Omega(t)$ , operador que contiene toda la dinámica del entorno. En esta sección le dedicaremos nuestra atención y nos serviremos del trabajo realizado en el capítulo anterior. Recordemos que ya dedujimos las ecuaciones del movimiento de los operadores  $x_n$  y  $p_n$ , y las resolvimos en (II.6).

Sin embargo, en esa solución aparece el acoplamiento, por lo que no tenemos una solución explícita. Aquí es donde entra nuestra primera aproximación: supondremos que la dinámica del entorno viene gobernada exclusivamente por el Hamiltoniano del baño, de modo que

$$i\hbar\dot{p}_n(t) \approx [p_n, H_B](t). \quad (\text{III.15})$$

De esta manera podemos seguir los mismos pasos que nos llevaron a (II.6) encontrando esta vez que no aparece el término de acoplamiento. Es decir, obtenemos:

$$p_n(t) = -m_n \omega_n x_n(0) \sin(\omega_n t) + p_n(0) \cos(\omega_n t). \quad (\text{III.16})$$

¿Qué hemos ganado con esta aproximación? En primer lugar, podemos calcular explícitamente  $\Omega(t)$ :

$$\Omega(t) = \sum_n \frac{c_n}{\hbar k_n} p_n(t) = \sum_n \frac{c_n}{\hbar k_n} [-m_n \omega_n x_n(0) \sin(\omega_n t) + p_n(0) \cos(\omega_n t)]. \quad (\text{III.17})$$

A su vez, esto nos permite calcular el conmutador  $[\Omega(t'), \Omega(t)]$ . Para seguir la notación habitual en la literatura, es conveniente definir

$$Q_1(t) = \pi \sum_n \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^3} \sin(\omega_n t), \quad (\text{III.18})$$

de modo que el conmutador se expresa como

$$[\Omega(t'), \Omega(t)] = 2i \frac{Q_1(t-t')}{\pi \hbar}. \quad (\text{III.19})$$

¿Qué tiene de especial la expresión (III.19)? Nos muestra que los operadores  $\Omega(t')$  y  $\Omega(t)$  conmutan con su conmutador, es decir:

$$[\Omega(t'), [\Omega(t'), \Omega(t)]] = 0 = [\Omega(t), [\Omega(t'), \Omega(t)]],$$

lo que nos permite simplificar (III.14), ya que si dos operadores  $A$  y  $B$  conmutan con su conmutador, se tiene

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]} = e^{\frac{1}{2}[A,B]} e^{A+B},$$

por lo que podemos reescribir (III.14) como:

$$\dot{\sigma}_z(t) = -\frac{1}{2} \Delta_0^2 \int_0^t dt' \left( \sigma_z(t') e^{\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} e^{i(\Omega(t') - \Omega(t))} + e^{-i(\Omega(t') - \Omega(t))} e^{-\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} \sigma_z(t') \right). \quad (\text{III.20})$$

### §3.4. Eliminación de grados de libertad del entorno - Segunda aproximación

Al igual que hicimos en el modelo de Caldeira - Legget, nos interesa hacer un promedio sobre el baño, de modo que los grados de libertad del entorno desaparezcan y tengamos una ecuación que sólo involucre al grado de libertad del sistema,  $\sigma_z$ . Para ello, utilizaremos la expresión (III.20), que una vez promediada sobre el baño queda:

$$\langle \dot{\sigma}_z(t) \rangle = -\frac{1}{2} \Delta_0^2 \int_0^t dt' \left\langle \sigma_z(t') e^{\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} e^{i(\Omega(t') - \Omega(t))} + e^{-i(\Omega(t') - \Omega(t))} e^{-\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} \sigma_z(t') \right\rangle.$$

Para poder seguir adelante, vamos a suponer que estamos ante un acoplamiento débil, en el sentido de que el espín está desacoplado de las exponenciales del entorno. Explícitamente:

$$\langle \dot{\sigma}_z(t) \rangle \approx -\frac{1}{2} \Delta_0^2 \int_0^t dt' \langle \sigma_z(t') \rangle \left\langle e^{\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} e^{i(\Omega(t') - \Omega(t))} + e^{-i(\Omega(t') - \Omega(t))} e^{-\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} \right\rangle. \quad (\text{III.21})$$

Por lo tanto, el problema queda reducido a hallar promedios de exponenciales. ¿Qué podemos hacer al respecto? En estadística existe la técnica de los *cumulantes*, que nos permite atajar este problema de forma sencilla. Dada una variable aleatoria  $X$ , se define una función generatriz  $K(t)$  que satisface  $\langle e^{tX} \rangle = e^{K(t)}$ . En el caso de que  $X$  siga una distribución Gaussiana, resulta que  $K(t) = \mu t + \sigma^2 t^2/2$ , por lo que

$$\langle e^X \rangle = e^{\mu + \frac{1}{2}\sigma^2}. \quad (\text{III.22})$$

Nosotros tenemos que trasladar esta información a nuestro formalismo de operadores. En este caso tenemos que calcular el promedio de  $e^X$  con  $X \equiv i(\Omega(t') - \Omega(t))$ , que claramente sigue una distribución Gaussiana con

$$\mu = i(\langle \Omega(t') \rangle - \langle \Omega(t) \rangle), \quad \sigma^2 = -[\langle \Omega(t')^2 \rangle + \langle \Omega(t)^2 \rangle - \langle \Omega(t)\Omega(t') + \Omega(t)\Omega(t') \rangle] - \mu^2.$$

Afortunadamente, el cálculo de estos valores medios es un proceso completamente similar al realizado al final del capítulo anterior en (II.20). En resumidas cuentas,  $\Omega(t)$  no deja de ser combinación de los operadores  $x_n(0)$  y  $p_n(0)$ . En concreto, obtenemos  $\langle \Omega(t) \rangle = 0$  y

$$\langle \Omega(t)\Omega(t') + \Omega(t)\Omega(t') \rangle = \sum_n \frac{c_n^2}{\hbar m_n \omega_n^3} \coth(\beta \hbar \omega_n / 2) \cos(\omega_n(t' - t)),$$

por lo que ya tenemos la media y la varianza:

$$\mu = 0, \quad \sigma^2 = - \sum_n \frac{c_n^2}{\hbar m_n \omega_n^3} [1 - \cos(\omega_n(t' - t))] \coth(\beta \hbar \omega_n / 2). \quad (\text{III.23})$$

En este momento resulta aconsejable definir una función que aglutine esta información,

$$Q_2(t) = \pi \sum_n \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^3} [1 - \cos(\omega_n t)] \coth(\beta \hbar \omega_n / 2), \quad (\text{III.24})$$

con lo que podemos reescribir (III.22) como

$$\langle e^{i(\Omega(t') - \Omega(t))} \rangle = e^{-\frac{Q_2(t-t')}{\pi \hbar}}. \quad (\text{III.25})$$

Esto nos permite adentrarnos en (III.21), pues:

$$\begin{aligned} \langle e^{\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} e^{i(\Omega(t') - \Omega(t))} + e^{-i(\Omega(t') - \Omega(t))} e^{-\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} \rangle &= e^{-\frac{Q_2(t'-t)}{\pi \hbar}} \left[ e^{\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} + e^{-\frac{1}{2}[\Omega(t'), \Omega(t)]} \right] \\ &= e^{-\frac{Q_2(t'-t)}{\pi \hbar}} 2 \cos\left(\frac{Q_1(t-t')}{\pi \hbar}\right), \end{aligned}$$

por lo que obtenemos la expresión final para la NIBA:

$$\boxed{\langle \dot{\sigma}_z(t) \rangle = -\Delta_0^2 \int_0^t dt' \langle \sigma_z(t') \rangle e^{-\frac{Q_2(t'-t)}{\pi \hbar}} \cos\left(\frac{Q_1(t-t')}{\pi \hbar}\right)}. \quad (\text{III.26})$$

### §3.5. NIBA - Formulación Final

Vamos a cerrar este capítulo resumiendo las ideas principales que nos han traído hasta aquí. Hemos planteado un Hamiltoniano que representa un sistema con dos posibles estados y hemos realizado una transformación unitaria que lo ha expresado de forma más conveniente, casi diagonal.

Acto seguido hemos llegado a una ecuación para  $\sigma_z(t)$ , que describe la dinámica del sistema. Desafortunadamente, el acoplamiento con el entorno limita nuestras opciones, por lo que hacemos una traza parcial sobre el baño para eliminar los grados de libertad que no nos interesan. Para ello, hemos necesitado hacer un par de aproximaciones que nos permitan llegar a resultados analíticos.

Una vez hemos hecho la traza parcial, tenemos una ecuación integro-diferencial que describe la dinámica del sistema, en la que el acoplamiento aparece ya completamente promediado. De hecho, es suficiente con especificar dos funciones  $Q_1(t)$  y  $Q_2(t)$ . Sin embargo, podemos simplificar incluso un poco más. Se puede demostrar ([6]) que en un baño de este tipo es suficiente con especificar la llamada densidad espectral,

$$J(\omega) = \pi \sum_n \frac{c_n^2}{2m_n\omega_n} \delta(\omega - \omega_n), \quad (\text{III.27})$$

ya que ésta contiene toda la información del acoplamiento. Por ejemplo,  $Q_1$  y  $Q_2$  se pueden deducir a partir de la densidad espectral, pues:

$$Q_1(s) = \int_0^\infty d\omega \sin(\omega s) \frac{J(\omega)}{\omega^2}, \quad (\text{III.28})$$

$$Q_2(s) = \int_0^\infty d\omega [1 - \cos(\omega s)] \coth(\beta\hbar\omega/2) \frac{J(\omega)}{\omega^2}. \quad (\text{III.29})$$

En nuestro afán por compactar el problema, podemos definir la función

$$f(s) = \Delta_0^2 e^{-\frac{Q_2(s)}{\pi\hbar}} \cos \left[ \frac{Q_1(s)}{\pi\hbar} \right], \quad (\text{III.30})$$

que en consecuencia también se deduce de la densidad espectral.

Así, dado un sistema de dos estados, basta definir  $J(\omega)$ , lo que determinará  $Q_1$ ,  $Q_2$  y  $f$  y nos pone en situación de resolver la NIBA, escrita como

$$\langle \dot{\sigma}_z(t) \rangle + \int_0^t dt' f(t-t') \langle \sigma_z(t') \rangle = 0. \quad (\text{III.31})$$

En el siguiente capítulo veremos ejemplos concretos de cómo proceder en este último paso.

# Aplicaciones y resultados

En este capítulo utilizaremos la NIBA para analizar la dinámica de sistemas reales. En particular, estudiaremos un caso estándar en la literatura y terminaremos con un problema actual.

## §1. Disipación Óhmica

La expresión (III.31) ofrece un método relativamente sencillo para estudiar la dinámica del sistema. Para ello, sólo es necesario especificar la densidad espectral  $J(\omega)$  (lo que determinará las funciones  $Q_1(t)$ ,  $Q_2(t)$  y  $f(t)$ ) y efectuar una integración numérica.

Existen multitud de referencias en la literatura que enfocan este problema (comparando la NIBA con otros métodos) para diferentes dependencias funcionales de la densidad espectral (ver [2]). El caso más típico consiste en asumir que el número de osciladores es lo suficientemente grande como para suponer que  $J(\omega)$  es una función suave. De hecho, es común proponer una densidad espectral de la forma  $J(\omega) = A\omega^s$  por debajo de cierta frecuencia de corte  $\omega_c$ , necesaria para evitar que el sistema diverja. En [6] podemos encontrar una discusión de las dinámicas del sistema según el valor de  $s$ .

En concreto, nosotros nos centraremos en el caso óhmico,  $s = 1$ . En este caso la frecuencia espectral toma la forma

$$J(\omega) = A\omega e^{-\omega/\omega_c}, \quad (\text{IV.1})$$

donde ya hemos introducido la frecuencia de corte. Es común definir una constante adimensional  $\alpha = A/2\pi\hbar$  que cuantifique el acoplamiento. El siguiente paso es evaluar las funciones que aparecen en la expresión de la NIBA. Para el caso óhmico se encuentra:

$$Q_1(t) = 2\alpha\pi\hbar \tan^{-1}(\omega_c t), \quad (\text{IV.2})$$

$$Q_2(t) = \alpha\pi\hbar \log(1 + \omega_c^2 t^2) + 2\alpha\pi\hbar \log\left(\frac{\beta\hbar}{\pi t} \sinh\left(\frac{\pi t}{\beta\hbar}\right)\right), \quad (\text{IV.3})$$

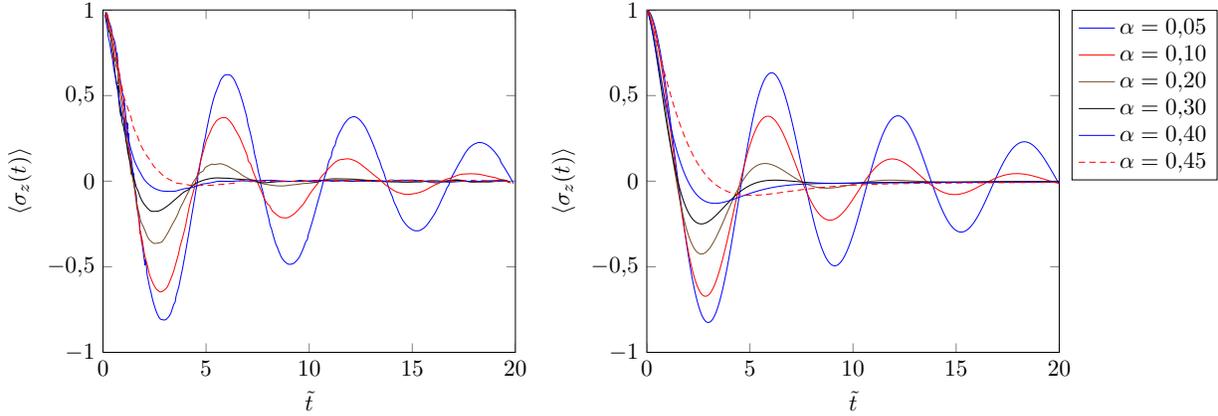


Figura IV.1: Evolución de la dinámica del sistema. Comparación entre los resultados de [2] (izquierda) y los nuestros (derecha). La elección de parámetros es  $\Delta t = 0,01$ ,  $\Delta = 1$  y  $T = 0$ .

y con esto ya estamos en condiciones de intentar resolver el problema.

### §1.1. Algoritmo de resolución

Hemos dicho que (III.31) nos sirve para estudiar la dinámica del sistema. Sin embargo, antes debemos dedicar unas líneas a especificar un método de integración numérica. Así pues, comenzamos discretizando el tiempo, buscando aproximar la solución en instantes  $t_n = n\Delta t$ . Asimismo, podemos discretizar la derivada como

$$\langle \dot{\sigma}_z(t_n) \rangle \approx \frac{\langle \sigma_z(t_{n+1}) \rangle - \langle \sigma_z(t_n) \rangle}{\Delta t}, \quad (\text{IV.4})$$

mientras que la integral puede ser aproximada de forma igualmente simple:

$$\int_0^{t_n} dt' f(t_n - t') \langle \sigma_z(t') \rangle \approx \sum_{i=0}^n \Delta t f(t_n - t_i) \langle \sigma_z(t_i) \rangle. \quad (\text{IV.5})$$

Estas dos aproximaciones junto con la expresión de la NIBA (III.31), proporcionan un algoritmo para hallar  $\langle \sigma_z(t_{n+1}) \rangle$  iterativamente. De hecho, podemos despejar y obtener:

$$\langle \sigma_z(t_{n+1}) \rangle = \langle \sigma_z(t_n) \rangle - (\Delta t)^2 \sum_{i=0}^n f(t_n - t_i) \langle \sigma_z(t_i) \rangle, \quad (\text{IV.6})$$

fácilmente implementable en el ordenador.

En la figura IV.1 podemos comprobar la exactitud de nuestro algoritmo, comparando la solución con la obtenida en [2], basada en resolver una ecuación de Schrödinger de tipo estocástico.

## §2. Cristal fotónico

Terminaremos este capítulo estudiando la aplicabilidad de la NIBA a un problema completamente nuevo. Podemos encontrar los detalles de la exposición en [10].

Un cristal fotónico es un material cuyo comportamiento óptico presenta periodicidad. Podemos pensar que un cristal fotónico afecta al movimiento de los fotones de la misma manera en que un cristal semiconductor afecta al movimiento de los electrones. Lo que vamos a hacer nosotros es considerar un emisor de fotones, como puede ser un átomo, que hará las veces de *sistema*. Este emisor estará acoplado a un cristal fotónico, que hará las veces de *entorno*.

El Hamiltoniano correspondiente puede separarse en tres contribuciones:

$$H = H_S + H_C + H_I, \quad (\text{IV.7})$$

que describimos a continuación.

- En este modelo no añadimos ninguna característica al sistema, por lo que

$$H_S = \frac{1}{2}\hbar\Delta_0\sigma_x + \frac{1}{2}\varepsilon\sigma_z. \quad (\text{IV.8})$$

- En cuanto al cristal, el modelo propone una cadena de osciladores (en este contexto se dice *resonador*) que presentan una interacción entre primeros vecinos. Por lo tanto:

$$H_C = \hbar \sum_{n=-N}^N \left( \omega_0 a_n^\dagger a_n - J \left( a_n^\dagger a_{n+1} + a_{n+1}^\dagger a_n \right) \right) \quad (\text{IV.9})$$

- Por último, establecemos un acoplo entre el sistema y el baño un tanto peculiar. En este caso, el emisor está acoplado únicamente a un resonador, por lo que escribimos

$$H_I = g\sigma_z \left( a_0^\dagger + a_0 \right) \quad (\text{IV.10})$$

Ahora bien, parece claro que esto no es exactamente nuestro modelo de Espín - Bosón. Sin embargo, podemos hacer una transformación que establezca de forma inmediata la relación. Para ello, vamos a hacer una transformada de Fourier discreta sobre los operadores  $a_k$ , de modo que tendremos las siguientes relaciones:

$$b_k = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{n=-N}^N a_n e^{-2\pi i k \frac{n}{2N+1}} \quad \text{para } k = -N, \dots, N \quad (\text{IV.11})$$

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{k=-N}^N b_k e^{2\pi i k \frac{n}{2N+1}} \quad \text{para } n = -N, \dots, N. \quad (\text{IV.12})$$

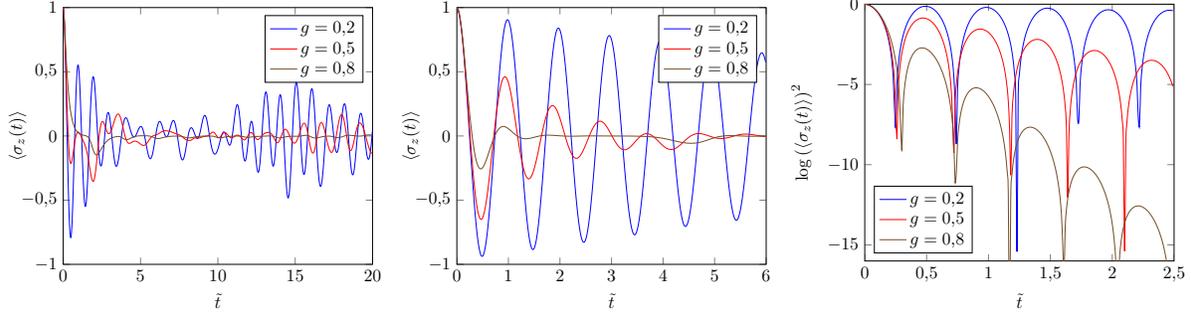


Figura IV.2: Evolución de la dinámica del sistema para  $N = 50$ ,  $\omega_0 = 2,5$ . Se observa que para  $\Delta_0 = 1$  (*bajo banda*) existe una dinámica fluctuante para valores bajos del acoplamiento (izquierda). Para  $\Delta_0 = 2,5$  (*mitad de banda*), aparece un decaimiento cuya rapidez crece con el acoplamiento (centro). De hecho, podemos comprobar que es un decaimiento exponencial (derecha).

Introduciendo ahora (IV.12) en (IV.9), se encuentra sin dificultad que

$$H_C = \hbar \sum_{k=-N}^N \omega_k b_k^\dagger b_k \quad \text{con} \quad \omega_k = \omega_0 - 2J \cos\left(\frac{2\pi}{2N+1}k\right), \quad (\text{IV.13})$$

mientras que por su parte, el Hamiltoniano de interacción se reescribe como

$$H_I = \frac{g}{\sqrt{2N+1}} \sigma_z \sum_{k=-N}^N (b_k^\dagger + b_k). \quad (\text{IV.14})$$

Ahora es inmediato formular el problema anterior en términos del modelo Espín - Bosón, pues sólo hay que reajustar las constantes para igualar las notaciones. De esta manera, se encuentra:

$$c_k = \frac{2g}{\sqrt{2N+1}} \sqrt{\frac{2}{\hbar} m_k \omega_k}, \quad (\text{IV.15})$$

lo que nos permite calcular  $Q_1(t)$  y  $Q_2(t)$ , necesarias para la NIBA.

$$Q_1(t) = \frac{\pi}{\hbar} \frac{4g^2}{2N+1} \sum_{k=-N}^N \frac{\sin(\omega_k t)}{\omega_k^2}, \quad (\text{IV.16})$$

$$Q_2(t) = \frac{\pi}{\hbar} \frac{4g^2}{2N+1} \sum_{k=-N}^N \frac{1 - \cos(\omega_k t)}{\omega_k^2} \coth(\beta \hbar \omega_k / 2). \quad (\text{IV.17})$$

En la figura IV.2 mostramos varios resultados obtenidos para este sistema. Observamos que la dinámica cambia cualitativamente con el valor relativo de  $\Delta_0$  y  $\omega_0$ , dando lugar a dinámicas fluctuantes o decaimientos exponenciales.

## Conclusiones

---

El problema de estudiar el acoplamiento de un sistema con su entorno es recurrente en ciencias. Para afrontarlo, hemos dedicado un capítulo completo a la elaboración de un modelo, conocido en la literatura como modelo de Caldeira - Legget. Ésta situación nos ha servido de marco teórico para ilustrar la idea de traza parcial como método para eliminar los grados de libertad del entorno y seleccionar la física relevante para nosotros, la del sistema.

En el siguiente capítulo hemos estudiado un caso particular del modelo de Caldeira - Legget, el conocido como modelo Espín - Bosón. En concreto, hemos estudiado un sistema que sólo tiene acceso a dos estados, lo que nos hace trabajar en un espacio bidimensional, donde los operadores de Pauli (junto con la identidad) forman una base conveniente. Siguiendo la misma filosofía del capítulo precedente, hemos hecho un promedio sobre el baño para hallar la física del sistema. En concreto, hemos trabajado en un régimen conocido como NIBA, que nos lleva a una ecuación integro-diferencial para la dinámica del sistema.

Por último, estudiamos la aplicabilidad de nuestro modelo. Para ello, comenzamos por comparar nuestros resultados con algunos ya contrastados en la literatura. En concreto, estudiamos los resultados que produce nuestro algoritmo para resolver la NIBA en el llamado caso óhmico, obteniendo los resultados que la teoría predice y que otros métodos confirman. Por último, vamos un paso más allá y aplicamos la NIBA a un problema actual que estudia la electrodinámica cuántica que tiene lugar en un cristal fotónico que tiene un emisor de fotones acoplado.

# Bibliografía

- [1] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Frank Laloe. *Quantum Mechanics, Vol. 1*. Wiley, 1991.
- [2] Peter P. Orth, Adilet Imambekov, and Karyn Le Hur. Nonperturbative stochastic method for driven spin-boson model. *Phys. Rev. B*, 87(1), jan 2013.
- [3] Gert-Ludwig Ingold. *Path Integrals and Their Application to Dissipative Quantum Systems*, pages 1–53. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2002.
- [4] G. W. Ford and M. Kac. On the quantum langevin equation. *Journal of Statistical Physics*, 46(5):803–810, 1987.
- [5] G. W. Ford, M. Kac, and P. Mazur. Statistical mechanics of assemblies of coupled oscillators. *J. Math. Phys.*, 6(4):504, 1965.
- [6] Sudip Chakravarty and Anthony J. Leggett. Dynamics of the two-state system with ohmic dissipation. *Phys. Rev. Lett.*, 52(1):5–8, jan 1984.
- [7] Reinhold A. Bertlmann. Theoretical physics t2, quantum mechanics, 2008.
- [8] Milena Grifoni and Peter Hänggi. Driven quantum tunneling. *Physics Reports*, 304(5–6):229 – 354, 1998.
- [9] H. Dekker. Noninteracting-blip approximation for a two-level system coupled to a heat bath. *Phys. Rev. A*, 35:1436–1437, Feb 1987.
- [10] Y. Liu and A. A. Houck. Quantum electrodynamics near a photonic band-gap. *ArXiv e-prints*, March 2016.
- [11] Ulrich Weiss. *Quantum Dissipative Systems*. World Scientific Pub Co Pte Lt, mar 2012.