

Sistemas cuánticos abiertos

November 23, 2023

1 El modelo de Caldeira y Leggett

En esta nota vamos a hacer un repaso de la teoría de sistemas cuánticos abiertos tomando como hilo conductor el *modelo de Caldeira y Leggett*, que consiste de un oscilador armónico, el sistema, acoplado bilinealmente a un medio ambiente formado por (muchos) osciladores armónicos. Ya que siempre podemos describir al medio ambiente en términos de sus modos normales, no hay pérdida de generalidad en suponer que los osciladores del medio ambiente están desacoplados entre sí. El Hamiltoniano del modelo es

$$H = H_S + H_B + H_I \quad (1)$$

donde H_S es el Hamiltoniano del sistema

$$H_S = \frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2 X^2 \quad (2)$$

H_B es el Hamiltoniano del medio ambiente

$$H_B = \sum_{\alpha} H_{\alpha} \quad (3)$$

$$H_{\alpha} = \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2}m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 q_{\alpha}^2 \quad (4)$$

y H_I el Hamiltoniano de interacción

$$H_I = X \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} q_{\alpha} \quad (5)$$

Por sencillez, vamos a asumir que $m_{\alpha} = m[\omega_{\alpha}]$ y $\lambda_{\alpha} = \lambda[\omega_{\alpha}]$. Como todo es lineal, las ecuaciones de Heisenberg coinciden con las ecuaciones clásicas, es decir

$$\begin{aligned} M\ddot{X} + M\Omega^2 X + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} q_{\alpha} &= 0 \\ m_{\alpha}\ddot{q}_{\alpha} + m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 q_{\alpha} + \lambda_{\alpha} X &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

La solución para los osciladores del medio ambiente es

$$q_{\alpha}(t) = q_{\alpha}^h(t) - \frac{\lambda_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \int_0^t dt' \sin \omega_{\alpha}(t-t') X(t') \quad (7)$$

donde

$$q_{\alpha}^h(t) = q_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{p_{\alpha}(0)}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \quad (8)$$

es la solución homogénea, es decir el operador de Heisenberg del oscilador armónico libre.

Reemplazando en la ecuación para el sistema encontramos

$$M\ddot{X} + M\Omega^2 X - \sum_{\alpha} \frac{\lambda_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \int_0^t dt' \sin \omega_{\alpha} (t - t') X (t') = -j (t) \quad (9)$$

con

$$j (t) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} q_{\alpha}^h (t) \quad (10)$$

Es conveniente escribir la ecuación para el sistema en términos de su transformada de Fourier. La transformada de $f (t) = \sin \omega_{\alpha} t \theta (t)$ es

$$\begin{aligned} g (\omega) &= \int_0^{\infty} dt \sin \omega_{\alpha} t e^{i\omega t} \\ &= -\frac{\omega_{\alpha}}{[(\omega + i\epsilon)^2 - \omega_{\alpha}^2]} \end{aligned} \quad (11)$$

Y por lo tanto

$$\left[-\omega^2 + \Omega^2 + \sum_{\alpha} \frac{\lambda_{\alpha}^2}{Mm_{\alpha}} \frac{1}{[(\omega + i\epsilon)^2 - \omega_{\alpha}^2]} \right] X (\omega) = -\frac{1}{M} j (\omega) \quad (12)$$

Es conveniente pasar al límite del continuo introduciendo la densidad de osciladores

$$\sum_{\alpha} \rightarrow \int_0^{\infty} d\omega \rho [\omega] \quad (13)$$

Entonces

$$-\omega^2 X (\omega) + \frac{1}{M} \Gamma [\omega] (-i\omega X (\omega)) + \Omega_{ren}^2 [\omega] X (\omega) = -\frac{1}{M} j (\omega) \quad (14)$$

donde

$$\begin{aligned} \Gamma [\omega] &= \pi \int_0^{\infty} d\omega' \frac{\rho \lambda^2}{m\omega'} (\omega') \delta [\omega^2 - \omega'^2] = \frac{\pi \rho \lambda^2}{2m\omega^2} \\ \Omega_{ren}^2 [\omega] &= \Omega^2 + \frac{1}{M} VP \int_0^{\infty} d\omega' \frac{\rho \lambda^2}{m} (\omega') \frac{1}{[\omega^2 - \omega'^2]} \end{aligned} \quad (15)$$

Vemos que la ecuación para el sistema se reduce a una ecuación de Langevin, con disipación Γ y forzado j . Si $\Gamma = \text{constante}$ decimos que el medio ambiente es *ohmico*.

Respecto del forzado $j (t)$, supongamos que el estado inicial es un estado térmico, y escribamos

$$q_{\omega}^h (t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[a_{\omega} e^{-i\omega t} + a_{\omega}^{\dagger} e^{i\omega t} \right] \quad (16)$$

Entonces $\langle j (t) \rangle = 0$ pero

$$N (t - t') = \frac{1}{2} \langle \{ j (t), j (t') \} \rangle = \int_0^{\infty} d\omega \frac{\rho \lambda^2 \hbar}{m\omega} \left(N_{\omega} + \frac{1}{2} \right) \cos \omega (t - t') \quad (17)$$

N es el *núcleo de ruido*. Transformando Fourier

$$N[\omega] = \Gamma[\omega] \hbar\omega (2N_\omega + 1) \quad (18)$$

Esta relación entre Γ y N expresa el teorema de fluctuación-disipación, e implica que, en aquellas frecuencias para las cuales $\rho\lambda^2 \neq 0$, el sistema termaliza a la temperatura del medio ambiente (que en este caso tiene capacidad infinita).

2 El modelo de Caldeira y Leggett en representación de interacción

Para describir la evolución de la matriz densidad del sistema, entendida como la traza de Landau de la matriz densidad total sobre las variables del medio ambiente, es natural adoptar la representación de interacción. Entonces los operadores evolucionan como los operadores de Heisenberg para el sistema desacoplado, mientras que la matriz densidad total obedece

$$i\hbar\dot{\rho} = [H_I(t), \rho] \quad (19)$$

Escribamos las matrices reducidas

$$\begin{aligned} \rho_S &= \text{tr}_B \rho \\ \rho_B &= \text{tr}_S \rho \end{aligned} \quad (20)$$

En general el estado total no es un estado producto, pero podemos escribir

$$\rho = \rho_S \otimes \rho_B + \rho_C \quad (21)$$

con

$$\text{tr}_B \rho_C = \text{tr}_S \rho_C = 0 \quad (22)$$

ρ_C describe el entrelazamiento entre los dos subsistemas. Entonces

$$i\hbar[\dot{\rho}_S \otimes \rho_B + \rho_S \otimes \dot{\rho}_B + \dot{\rho}_C] = [H_I(t), \rho_S \otimes \rho_B] + [H_I(t), \rho_C] \quad (23)$$

donde

$$[H_I(t), \rho_S \otimes \rho_B] = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \{ [X, \rho_S] \otimes \{q_{\alpha}, \rho_B\} + \{X, \rho_S\} [q_{\alpha}, \rho_B] \} \quad (24)$$

La idea es hacer un desarrollo perturbativo en potencias de las λ_{α}

$$\begin{aligned} \rho_B &= \rho_B^0 + \rho_B^1 + \dots \\ \rho_C &= \rho_C^1 + \dots \end{aligned} \quad (25)$$

Supongamos por simplicidad que

$$\text{tr}_B \rho_B^0 q_{\alpha} = 0 \quad (26)$$

Entonces tomando trazas parciales obtenemos

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\rho}_S &= \text{tr}_B [H_I(t), \rho_S \otimes \rho_B^1 + \rho_C^1] \\ i\hbar\dot{\rho}_B^1 &= \text{tr}_S [H_I(t), \rho_S \otimes \rho_B^0] \end{aligned} \quad (27)$$

y por diferencia

$$i\hbar\dot{\rho}_C^1 = [H_I(t), \rho_S \otimes \rho_B^0] - \rho_S \otimes \text{tr}_S [H_I(t), \rho_S \otimes \rho_B^0] \quad (28)$$

Entonces

$$\begin{aligned} \rho_B^1 &= \frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} (\text{tr}_S X \rho_S) [q_{\alpha}, \rho_B^0] \\ \rho_C^1 &= \frac{-i}{2\hbar} \int_0^t dt' \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \{ [X, \rho_S] \otimes \{q_{\alpha}, \rho_B^0\} + (\{X, \rho_S\} - 2\rho_S \text{tr}_S X \rho_S) [q_{\alpha}, \rho_B^0] \} \end{aligned} \quad (29)$$

y

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\rho}_S &= \text{tr}_B [H_I(t), \rho_S \otimes \rho_B^1 + \rho_C^1] \\ &= \frac{-i}{2\hbar} \int_0^t dt' \sum_{\alpha, \alpha'} \lambda_{\alpha} \lambda_{\alpha'} \{ 2 [X(t), \rho_S(t')] (\text{tr}_S X \rho_S)(t') (\text{tr}_B q_{\alpha}(t) [q_{\alpha'}, \rho_B^0](t')) \\ &\quad + [X(t), [X, \rho_S](t')] (\text{tr}_B q_{\alpha}(t) \{q_{\alpha'}, \rho_B^0\}(t')) \\ &\quad + [X(t), (\{X, \rho_S\} - 2\rho_S \text{tr}_S X \rho_S)(t')] (\text{tr}_B q_{\alpha}(t) [q_{\alpha'}, \rho_B^0](t')) \} \end{aligned} \quad (30)$$

Dos términos se cancelan dejando

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\rho}_S &= \frac{-i}{2\hbar} \int_0^t dt' \sum_{\alpha, \alpha'} \lambda_{\alpha} \lambda_{\alpha'} \{ [X(t), [X, \rho_S](t')] (\text{tr}_B q_{\alpha}(t) \{q_{\alpha'}, \rho_B^0\}(t')) \\ &\quad + [X(t), \{X, \rho_S\}(t')] (\text{tr}_B q_{\alpha}(t) [q_{\alpha'}, \rho_B^0](t')) \} \end{aligned} \quad (31)$$

Asumimos que si $\alpha \neq \alpha'$, entonces

$$\text{tr}_B \rho_B^0 q_{\alpha} q_{\alpha'} = 0 \quad (32)$$

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\rho}_S &= \frac{-i}{2\hbar} \int_0^t dt' \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 \{ [X(t), [X, \rho_S](t')] (\text{tr}_B q_{\alpha}(t) \{q_{\alpha}, \rho_B^0\}(t')) \\ &\quad + [X(t), \{X, \rho_S\}(t')] (\text{tr}_B q_{\alpha}(t) [q_{\alpha}, \rho_B^0](t')) \} \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} X(t) &= X(t) \cos \Omega(t-t') - \frac{P(t)}{M\Omega} \sin \Omega(t-t') \\ q_{\alpha}(t) &= q_{\alpha}(t) \cos \omega_{\alpha}(t-t') - \frac{p_{\alpha}(t)}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha}(t-t') \end{aligned} \quad (34)$$

Asumiendo que

$$\text{tr}_B \rho_B^0 \{q_{\alpha}, p_{\alpha'}\} = 0 \quad (35)$$

Encontramos

$$\begin{aligned}
\text{tr}_B q_\alpha(t) \{q_\alpha, \rho_B^0\}(t') &= \text{tr}_B \rho_B^0 \{q_\alpha(t), q_\alpha(t')\} \\
&= 2 (\text{tr}_B \rho_B^0 q_\alpha^2(t)) \cos \omega_\alpha(t-t') \\
\text{tr}_B q_\alpha(t) [q_\alpha, \rho_B^0](t') &= \text{tr}_B \rho_B^0 [q_\alpha(t), q_\alpha(t')] \\
&= \frac{(-i)\hbar}{m_\alpha \omega_\alpha} \sin \omega_\alpha(t-t')
\end{aligned} \tag{36}$$

Definimos

$$\text{tr}_B \rho_B^0 q_\alpha^2(t) = \frac{\hbar}{m_\alpha \omega_\alpha} \left(n_\alpha + \frac{1}{2} \right) \tag{37}$$

Hasta ahora

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{\rho}_S &= \frac{-i}{2} \int_0^t dt' \sum_\alpha \frac{\lambda_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha} \{ (2n_\alpha + 1) [X(t), [X, \rho_S](t')] \cos \omega_\alpha(t-t') \\
&\quad - i [X(t), \{X, \rho_S\}(t')] \sin \omega_\alpha(t-t') \}
\end{aligned} \tag{38}$$

Hacemos la *aproximación de Markov* $\rho_S(t') \approx \rho_S(t)$ y usamos que

$$\begin{aligned}
[X(t), [X, \rho_S](t')] &= [X, [X, \rho_S]](t) \cos \Omega(t-t') \\
&\quad - \frac{1}{M\Omega} [X, [P, \rho_S]](t) \sin \Omega(t-t') \\
[X(t), \{X, \rho_S\}(t')] &= [X, \{X, \rho_S\}](t) \cos \Omega(t-t') \\
&\quad - \frac{1}{M\Omega} [X, \{P, \rho_S\}](t) \sin \Omega(t-t')
\end{aligned} \tag{39}$$

A tiempos largos podemos aproximar

$$\begin{aligned}
\int_0^t dt' \cos \Omega(t') \cos \omega_\alpha(t') &\approx \int_0^t dt' \sin \Omega(t') \sin \omega_\alpha(t') \approx \frac{\pi}{2} \delta(\Omega - \omega_\alpha) \\
\int_0^t dt' \sin \Omega(t') \cos \omega_\alpha(t') &\approx - \int_0^t dt' \cos \Omega(t') \sin \omega_\alpha(t') \approx \frac{1}{2} VP \frac{1}{(\Omega - \omega_\alpha)}
\end{aligned} \tag{40}$$

Y entonces obtenemos

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{\rho}_S &= \frac{1}{2} \frac{\Gamma[\Omega]}{M} [X, \{P, \rho_S\}](t) + \frac{1}{2} M [\Omega_{ren}^2 - \Omega^2] [X, \{X, \rho_S\}](t) \\
&\quad - \frac{i}{2\hbar} N[\Omega] [X, [X, \rho_S]](t) + \frac{i}{2M\Omega\hbar} \tilde{N}[\Omega] [X, [P, \rho_S]](t)
\end{aligned} \tag{41}$$

donde Γ , Ω_{ren} y N fueron definidos previamente (ecuaciones 15, 17 y 18). y

$$\tilde{N} = \hbar VP \int_0^\infty d\omega' \frac{\rho\lambda^2}{2m\omega'}(\omega') (2N(\omega') + 1) \frac{1}{[\Omega - \omega']} \tag{42}$$

Como chequeo vamos a obtener las ecuaciones de movimiento para los valores medios de X y P . Usando que

$$\text{tr} A [B, C] = \text{tr} [A, B] C \tag{43}$$

Obtenemos

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle X \rangle &= \frac{\langle P \rangle}{M} \\ \frac{d}{dt} \langle P \rangle &= -M\Omega^2 \langle X \rangle - \frac{\Gamma[\Omega]}{M} \langle P \rangle - M [\Omega_{ren}^2 - \Omega^2] \langle X \rangle\end{aligned}\quad (44)$$

3 La ecuación de Lindblad

Lindblad demostró que todo operador local que preserve la traza y la positividad puede escribirse como una suma de términos de la forma

$$L\rho L^\dagger - \frac{1}{2} \{L^\dagger L, \rho\} \quad (45)$$

, donde el operador L no es necesariamente hermítico. Para ver qué efecto físico tiene cada término, supongamos una ecuación con un único *Linbladiano* y una matriz densidad diagonal (por ejemplo, en la base de energía). Entonces

$$\dot{\rho}_{nn} = \sum_m \left\{ |\langle n|L|m\rangle|^2 \rho_{mm} - |\langle m|L|n\rangle|^2 \rho_{nn} \right\} \quad (46)$$

Vemos que los módulos al cuadrado de los elementos de matriz del Linbladiano pueden interpretarse como las probabilidades de transición entre los estados respectivos. Una ecuación con esta estructura se denomina una *ecuación maestra*.

Como ejemplo, vamos a intentar llevar la ecuación que encontramos para el modelo de Caldeira y Leggett a la forma de Lindblad. Como cabía esperar, el término

$$[X, \{X, \rho_S\}] = [X^2, \rho_S] \quad (47)$$

sólo renormaliza el Hamiltoniano, mientras que

$$[X, [X, \rho_S]] = -2 \left(X\rho_S X - \frac{1}{2} \{X^2, \rho_S\} \right) \quad (48)$$

ya está en forma de Lindblad con $L = X$. Para reducir los otros términos introducimos operadores de creación y destrucción

$$\begin{aligned}X &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (A + A^\dagger) \\ P &= (-i) \sqrt{\frac{\hbar M\Omega}{2}} (A - A^\dagger)\end{aligned}\quad (49)$$

Entonces

$$[X, \{P, \rho_S\}] = \hbar \left\{ \left[\frac{(-i)}{2} (A^2 - A^{\dagger 2}), \rho_S \right] + i \left(A\rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^\dagger A, \rho_S\} \right) - i \left(A^\dagger \rho_S A - \frac{1}{2} \{AA^\dagger, \rho_S\} \right) \right\} \quad (50)$$

$$[X, [P, \rho_S]] = i\hbar \left\{ A\rho_S A - \frac{1}{2} \{A^2, \rho\} - \left(A^\dagger \rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^{\dagger 2}, \rho\} \right) \right\} \quad (51)$$

Reuniendo todos estos términos, descartando los que sólo renormalizan el Hamiltoniano del sistema, obtenemos

$$\begin{aligned}
2M\Omega\hbar\dot{\rho}_S &= \hbar\Omega\Gamma \left\{ \left(A\rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^\dagger A, \rho_S\} \right) - \left(A^\dagger \rho_S A - \frac{1}{2} \{AA^\dagger, \rho_S\} \right) \right\} \\
+ N &\left(A\rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^\dagger A, \rho_S\} + A^\dagger \rho_S A - \frac{1}{2} \{AA^\dagger, \rho_S\} + A\rho_S A - \frac{1}{2} \{A^2, \rho\} + A^\dagger \rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^{\dagger 2}, \rho\} \right) \\
+ i\tilde{N} &\left\{ A\rho_S A - \frac{1}{2} \{A^2, \rho\} - \left(A^\dagger \rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^{\dagger 2}, \rho\} \right) \right\} \quad (52)
\end{aligned}$$

o bien

$$\begin{aligned}
2M\hbar\Omega\dot{\rho}_S &= (N + \hbar\Omega\Gamma) \left(A\rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^\dagger A, \rho_S\} \right) \\
+ (N - \hbar\Omega\Gamma) &\left(A^\dagger \rho_S A - \frac{1}{2} \{AA^\dagger, \rho_S\} \right) \\
+ (N + i\tilde{N}) &\left(A\rho_S A - \frac{1}{2} \{A^2, \rho\} \right) \\
+ (N - i\tilde{N}) &\left(A^\dagger \rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^{\dagger 2}, \rho\} \right) \quad (53)
\end{aligned}$$

Esta ecuación NO tiene la estructura de una ecuación de Lindblad. Sin embargo, si aceptamos que $A \propto e^{-i\Omega t}$, vemos que los últimos dos términos son oscilatorios, y presumiblemente es posible despreciarlos en el límite en que $\Omega t \gg 1$. En este límite obtenemos una ecuación de Lindblad, que apelando al teorema de fluctuación - disipación 18 se convierte en

$$\dot{\rho}_S = \frac{\Gamma}{M} \left\{ (N[\Omega] + 1) \left(A\rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^\dagger A, \rho_S\} \right) + N[\Omega] \left(A^\dagger \rho_S A - \frac{1}{2} \{AA^\dagger, \rho_S\} \right) \right\} \quad (54)$$

Si el medio ambiente se encuentra en un estado térmico, entonces

$$N^{-1}[\Omega] \dot{\rho}_S = \frac{\Gamma}{M} \left\{ e^{\beta\hbar\Omega} \left(A\rho_S A^\dagger - \frac{1}{2} \{A^\dagger A, \rho_S\} \right) + A^\dagger \rho_S A - \frac{1}{2} \{AA^\dagger, \rho_S\} \right\} \quad (55)$$

que admite al estado térmico $e^{-\beta H_S}$ como solución estacionaria.

4 Comentarios finales

La dificultad de llevar la ecuación maestra para el modelo de Caldeira y Leggett a la forma de Lindblad muestra que ésta no es una ecuación fundamental, y por lo tanto debe usarse con cuidado de permanecer dentro de su zona de validez. Como la evolución de la matriz densidad debe conservar traza y positividad, la conclusión es que la hipótesis crítica es la markovianidad. En general, ecuaciones de tipo Lindblad son válidas cuando los tiempos de relajación del sistema son extremadamente cortos.

Muchos de los temas de esta nota están discutidos en mi libro, especialmente la deducción de la ecuación de Langevin (capítulo 2) y termalización (capítulo 12) [1]. Breuer y Petruccione [2] y Gardiner y Zoller [3] son dos monografías clásicas. Ver también Percival [4]. Manzano [5] es una introducción breve a lo más importante de la ecuación de Lindblad.

References

- [1] E. Calzetta y B-L. Hu, *Nonequilibrium Quantum Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).

- [2] Heinz-Peter Breuer and Francesco Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford, 2002).
- [3] C. W. Gardiner y P. Zoller, *Quantum Noise* (Springer, Berlín, 2000).
- [4] Ian Percival, *Quantum State Diffusion* (Cambridge University Press, Cambridge, 2003).
- [5] Daniel Manzano, A short introduction to the Lindblad master equation, *AIP Advances* 10, 025106 (2020).