

Tesis de Posgrado

Estocasticidad en sistemas armónicos cuánticos bajo interacciones lineales y no lineales con termostatos extensos

Despósito, Marcelo Arnaldo

1991

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Despósito, Marcelo Arnaldo. (1991). Estocasticidad en sistemas armónicos cuánticos bajo interacciones lineales y no lineales con termostatos extensos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.

http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2494_Desposito.pdf

Cita tipo Chicago:

Despósito, Marcelo Arnaldo. "Estocasticidad en sistemas armónicos cuánticos bajo interacciones lineales y no lineales con termostatos extensos". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1991.

http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2494_Desposito.pdf

EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física



ESTOCASTICIDAD
EN SISTEMAS ARMONICOS CUANTICOS
BAJO INTERACCIONES LINEALES Y NO LINEALES
CON TERMOSTATOS EXTENSOS

por

MARCELO ARNALDO DESPÓSITO

Directora de Tesis: *Prof. Dra. E.S. Hernández*

Lugar de Trabajo: *Departamento de Física, FCEN, UBA*

Trabajo de Tesis para optar por el título de Doctor en Ciencias Físicas

Diciembre de 1991

Tesis
2494
y. 2.

a María José

a mis viejos Hermanos del Sur

Agradecimientos

Deseo expresar mi más profundo agradecimiento a la Dra. Susana Hernández por su dirección y guía durante todos estos años, desde mis comienzos como tesista de Licenciatura. Sus cualidades humanas y profesionales, como así también su estímulo constante, han sido de invaluable ayuda para la elaboración de esta Tesis.

Quisiera también agradecer a mis compañeros del Grupo de Física Estadística y Nuclear (los que están y los que se fueron) por el agradable clima de trabajo, y en particular al Dr. Horacio Cataldo por las provechosas discusiones que hemos mantenido.

Asimismo, vaya mi agradecimiento a Silvina y Mario por el soporte técnico-habitacional.

Por último, agradezco profundamente a mi madre por el apoyo brindado durante todos estos años (en particular los difíciles), sin el cual no hubiera podido continuar esta tarea.

Indice

1	Introducción	3
2	Los sistemas cuánticos disipativos	10
2.1	Ecuación maestra generalizada	11
2.1.1	Construcción de las ecuaciones maestras	11
2.1.2	Ecuación maestra asintótica	18
2.2	Formalismo de Langevin	21
2.2.1	Ecuaciones de Langevin cuánticas	21
2.2.2	Relación de fluctuación-disipación cuántica	25
3	Propiedades del reservorio térmico	27
3.1	Disipación Ohmica	28
4	Movimiento armónico cuántico bajo distintas interacciones	31
4.1	Análisis general	31
4.2	Acoplamiento lineal	34
4.3	Acoplamiento cuadrático	55
4.4	Acoplamiento general	66
5	Aplicación de las representaciones semiclásicas	73
5.1	Representación de Wigner	74
5.2	Ecuación de Kramers cuántica	76
5.3	Ecuación de Kramers-Moyal	81
5.4	Límite de baja fricción	83

6	Método de expansión para las ecuaciones maestras	86
6.1	Descripción del método	86
6.2	Obtención de las ecuaciones de Fokker-Planck	88
6.3	Transformación a ecuaciones de Schrödinger	97
7	Conclusiones	104
	Apéndices	107
A	Coefficientes intervinientes en las ecuaciones maestras	107
A.1	Acoplamiento lineal	107
A.2	Acoplamiento cuadrático	109
B	Reservorio bosónico y disipación Ohmica	110
B.1	Función de correlación	110
B.2	Evaluación de los coeficientes	112
C	Segundos momentos en el régimen no Markoviano	113
D	Transformación de variables y coeficientes	116
E	Resolución de las ecuaciones diferenciales (5.18) y (6.31)	119
E.1	Acoplamiento lineal en la aproximación de onda rotante	119
E.2	Acoplamiento cuadrático en la aproximación de difusión	120
	Bibliografía	123

Capítulo 1

Introducción

A principios de siglo, P.Langevin obtuvo las posteriormente denominadas “ecuaciones de Langevin” [Wax54] que sirvieron de base para la teoría del movimiento Browniano. A partir de ese trabajo, la descripción de la relajación de sistemas en interacción con reservorios térmicos ha sido de interés primordial dentro del marco de la Mecánica Estadística. Sin embargo, durante los comienzos de la Mecánica Cuántica no existió una motivación aparente para desarrollar un formalismo que incluyera a la disipación. Este hecho se debió, fundamentalmente, a que la disipación es un concepto de origen macroscópico mientras que los tratamientos mecánico-cuánticos se concentran en fenómenos microscópicos. El interés concreto surgió alrededor de 30 años atrás con los primeros trabajos que describían el comportamiento del laser [Se60, Hak64], y continuó ampliándose a fin de analizar una amplia gama de fenómenos provenientes de diversas ramas de la física, principalmente materia condensada, óptica cuántica y física nuclear. La característica común a estos fenómenos consiste en la presencia de una o más coordenadas colectivas de un sistema cuántico de N cuerpos que interactúa con los restantes grados de libertad, dando origen a un movimiento macroscópico amortiguado y sujeto a fluctuaciones térmicas. La importancia de deducir ecuaciones de movimiento explícitas para este

tipo de sistemas tiene por lo menos dos razones fundamentales:

- comprender el papel que juega el reservorio y su interacción con el sistema en la evolución de este último.
- establecer condiciones para la validez de las ecuaciones fenomenológicas que generalmente se utilizan en la descripción de sistemas complicados.

En este sentido, se han desarrollado una variedad de métodos que permiten tratar a los sistemas cuánticos disipativos, los cuales pueden encuadrarse en dos categorías principales:

- ecuaciones de Schrödinger modificadas.
- tratamientos con Hamiltonianos tipo sistema más reservorio.

Dentro de la primera categoría podemos mencionar el tratamiento mediante Hamiltonianos dependientes del tiempo [Ka48]; la utilización de ecuaciones de Schrödinger no lineales [Ko72, Ya78]; y el procedimiento de cuantización canónica en variables complejas [Dek77]. Estas descripciones, que generalmente son justificadas a posteriori al demostrar que reproducen resultados conocidos, presentan ciertas dificultades. Por ejemplo, en el primer método mencionado se introducen problemas debido a que se viola el principio de incerteza, en el segundo de ellos no se satisface el principio de superposición y presenta resultados contradictorios, mientras que al último se le han hecho serias objeciones debido a que es necesario introducir hipótesis ad hoc, como por ejemplo fuentes explícitas de ruido en la ecuación para la posición del sistema. Las desventajas que presentan estos tratamientos se deben a que las hipótesis básicas con las cuales se trabaja no son claras y, fundamentalmente, no introducen a la disipación como un efecto intrínseco.

Dentro de la segunda categoría se encuentran aquellos métodos que incluyen en la descripción a los restantes grados de libertad con los cuales se vincula el sistema, de modo tal de tener en cuenta en forma explícita el acoplamiento del sistema con un reservorio. Entre ellos podemos mencionar al trabajo pionero de Senitzky [Se60], en el cual se analizaba el decaimiento de un modo del campo electromagnético en una cavidad. Utilizando la representación de Heisenberg y eliminando los operadores del

reservorio se obtenían ecuaciones de movimiento para los operadores del sistema. Esta metodología fue mejorada y generalizada por Mori [Mor65] con la obtención de ecuaciones de Langevin generalizadas para operadores. La forma más conocida de estas ecuaciones, correspondiente a una partícula moviéndose bajo un potencial $V(Q)$ e interactuando linealmente con un reservorio, es

$$m\ddot{Q} + \int_0^t d\tau \mu(t-\tau)\dot{Q}(\tau) + V'(Q) = F(t) , \quad (1.1)$$

donde el acoplamiento con el reservorio está descrito por dos términos: un operador aleatorio $F(t)$ y un núcleo de memoria disipativo $\mu(t)$.

Trabajando en la representación de Schrödinger, e introduciendo la técnica de operadores de proyección, Zwanzig [Zw60] y Nakajima [Na58] obtuvieron las denominadas ecuaciones maestras para el operador densidad del sistema relevante. Estas son ecuaciones dinámicas de la forma

$$\dot{\rho}(t) = \Lambda\rho(t) , \quad (1.2)$$

donde el generador de la evolución Λ incluye, además de las contribuciones reversibles, contribuciones irreversibles provenientes del acoplamiento con el reservorio. Debido a que ésta es una ecuación en operadores, su tratamiento puede involucrar considerables dificultades matemáticas, como por ejemplo diagonalizar operadores de dimensión infinita. Generalmente en estos casos deben realizarse cálculos numéricos haciendo uso de una base truncada del espacio de Hilbert correspondiente. Sin embargo, la comprensión intuitiva de un problema físico concreto que nos brinda el formalismo de la matriz densidad es limitado, siendo poco claro cómo introducir hipótesis simplificadoras del problema que sean consistentes con los requerimientos de la ecuación maestra. En este sentido, es posible hacer uso de distintos tipos de representaciones escalares de la ecuación (1.2), las cuales nos permiten obtener una imagen intuitiva del problema físico tratado, como así también un formalismo semejante al de la Física Estadística clásica. A partir de estas representaciones podemos hallar:

- Ecuaciones de transporte generalizadas.
- Ecuaciones maestras tipo ganancia menos pérdida.
- Ecuaciones de Fokker-Planck o Kramers-Moyal.

Las primeras se obtienen a partir de la ecuación (1.2) mediante la prescripción usual para hallar el valor medio de un operador. Estas consisten en ecuaciones de evolución macroscópicas que rigen la relajación al equilibrio de los valores medios de los observables de interés [Gra82].

Por otro lado, si consideramos que en las cercanías del equilibrio el operador densidad es diagonal en una base de Fock, la evolución temporal de sus elementos diagonales se describirá mediante una ecuación maestra del tipo ganancia menos pérdida, la cual se halla regida por adecuadas probabilidades de transición [He84]. A excepción de unos pocos casos concretos, estas ecuaciones no son resolubles analíticamente. A tal fin se han elaborado una serie de métodos aproximados, entre los que se destaca el desarrollado por van Kampen (“expansión $1/\Omega$ ”) [vKa81] que permite obtener ecuaciones del tipo de Fokker-Planck a partir de la elección de un parámetro adecuado que gobierne las fluctuaciones.

Por último, mediante el uso de las representaciones semiclásicas [Mis68, Hi84], es posible describir un sistema cuántico mediante un lenguaje clásico, el cual incluye una correspondencia entre funciones clásicas y operadores cuánticos; como así también una función densidad de cuasiprobabilidad. Aplicando estas representaciones a la ecuación (1.2) es posible llevar a ésta a la forma de una ecuación en derivadas parciales para la función de cuasiprobabilidad, del tipo de una expansión de Kramers-Moyal.

En la Figura 1.1 hemos esquematizado todos estos tipos de aproximaciones al problema del estudio de los sistemas cuánticos disipativos que parten de una descripción microscópica completa del sistema.

La parte principal de esta Tesis se centra en el análisis del comportamiento de un oscilador cuántico inmerso en un reservorio térmico extenso. Este sistema, además de posibilitar un tratamiento relativamente sencillo, ha permitido modelar diversos fenómenos físicos como por ejemplo el comportamiento del laser [Hak70, Lo73], la relajación vibracional [Ni73] y el decaimiento de modos colectivos nucleares [He84,

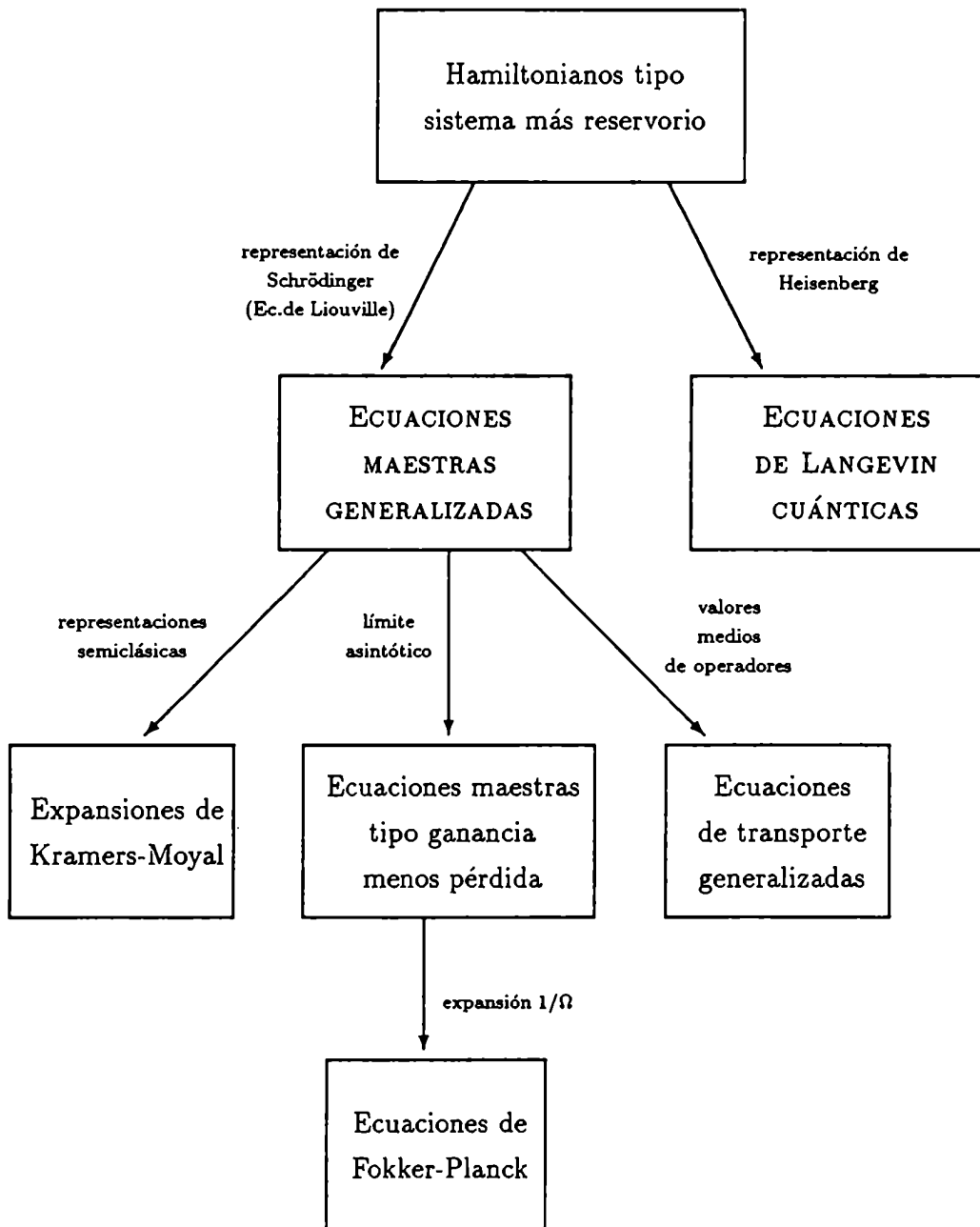


Figura 1.1: Esquema de las distintas técnicas que permiten abordar el estudio de un sistema cuántico disipativo partiendo de una descripción microscópica completa.

Do84, He85, Ca87]. Es por este motivo que el estudio de este sistema ha tenido un interés creciente en la literatura [Ul66, Bo67, Ha73, Ag74, Cal83b, Lin84, Ha85, Ris85, Li86, Fo88]. Si bien estos trabajos encaran este problema desde distintos puntos de vista, todos se han concentrado en reservorios de osciladores y acoplamientos lineales en las coordenadas del sistema y del reservorio.

En este trabajo presentaremos la mayoría de los resultados sin especificar las características del reservorio. Sin embargo, debido a que en el formalismo de Langevin es necesario especificar a priori un modelo del mismo, haremos uso de un modelo bosónico con el fin de poder comparar los resultados hallados mediante las ecuaciones maestras generalizadas. En este sentido, fijaremos los alcances y equivalencias entre ambos métodos y la naturaleza de los parámetros intervinientes.

Por otro lado, nos centraremos en la situación de acoplamientos no lineales en la coordenada del oscilador, cuyos antecedentes en la literatura son muy escasos. Abordaremos este problema mediante todas las técnicas expuestas en la Figura 1.1, comparando y analizando los resultados obtenidos. La elección de este tipo de acoplamiento está dirigida a avanzar en el estudio de los sistemas cuánticos disipativos que se realiza dentro de nuestro grupo de trabajo, debido a que los mismos introducen en el sistema un ruido intrínseco de tipo multiplicativo (en contraste al aditivo que surge al considerar acoplamientos lineales), el cual es una fuente relevante de ruido que aparece naturalmente en una variedad de sistemas físicos [Sch89].

La presente Tesis se halla estructurada como se indica a continuación. En el Capítulo 2 se realiza un análisis general de los sistemas cuánticos disipativos mediante la técnica de ecuaciones maestras generalizadas y el formalismo de Langevin. En el Capítulo 3 estudiamos las propiedades de un reservorio bosónico y en particular analizamos el modelo que provee una disipación Ohmica. Los resultados obtenidos en los dos capítulos anteriores son aplicados en el Capítulo 4 para el caso en que el sistema cuántico a considerar corresponda a un movimiento armónico. En particular nos centramos en dos tipos de acoplamiento con el reservorio: lineal y cuadrático en las posición del oscilador, en su versión completa y bajo la aproximación de onda rotante. En el Capítulo 5 implementamos la transformación de Wigner a las ecuaciones maestras generalizadas halladas anteriormente, obteniendo expansiones de Kramers-Moyal y en el Capítulo 6 hallamos las ecuaciones de Fokker-Planck que

surgen al aplicar la expansión $1/\Omega$ a las ecuaciones maestras asintóticas. Por último, se presenta un resumen de las conclusiones obtenidas en esta Tesis. Los apéndices contienen algunos detalles matemáticos requeridos y, en particular, en el Apéndice B se evalúan los coeficientes intervinientes en las ecuaciones maestras halladas, al considerar un reservorio bosónico y una disipación de tipo Ohmica.

Capítulo 2

Los sistemas cuánticos disipativos

En este capítulo analizaremos dos de los métodos usuales que permiten estudiar el comportamiento irreversible de un sistema cuántico abierto \mathcal{S} bajo la influencia de un reservorio térmico \mathcal{B} . En ambos procedimientos se parte de una descripción microscópica completa del sistema $\mathcal{S} \oplus \mathcal{B}$ a partir de la cual, e implementando alguna técnica que permita eliminar de las ecuaciones de movimiento las coordenadas del reservorio \mathcal{B} , es posible inferir el comportamiento del sistema \mathcal{S} . A tal fin, consideraremos que el Hamiltoniano del sistema total es de la forma

$$H = H(\mathcal{S}) + H(\mathcal{B}) + H' , \quad (2.1)$$

donde $H(\mathcal{S})$ y $H(\mathcal{B})$ corresponden, respectivamente, al Hamiltoniano del sistema \mathcal{S} aislado y del reservorio \mathcal{B} aislado, y H' corresponde a la interacción entre ambos subsistemas. Para este último supondremos una forma sumamente general del tipo

$$H' = \lambda \sum_k S_k B_k , \quad (2.2)$$

donde λ es una constante que da idea de la magnitud promedio de la interacción y los operadores S_k y B_k , pertenecientes al espacio de Hilbert de \mathcal{S} y \mathcal{B} respectivamente, son tales que preservan la hermiticidad de H . Hasta que no especifiquemos lo contrario, estos operadores son totalmente arbitrarios. La suma sobre k indica la presencia de distintos términos en el Hamiltoniano de interacción.

Asumiremos además que el número de grados de libertad del reservorio \mathcal{B} tiende a infinito. Esta hipótesis, la cual estará implícita en el reemplazo de sumatorias por integrales, nos permite asegurar que la energía transferida al reservorio por el oscilador no es devuelta nunca. Esto es equivalente a asumir que el tiempo de recurrencia de Poincaré es mucho mayor que cualquier escala temporal de interés físico.

2.1 Ecuación maestra generalizada

Uno de los métodos mencionados anteriormente permite eliminar las coordenadas del sistema irrelevante \mathcal{B} mediante el uso de operadores de proyección [Na58, Zw60, Gra82]. De esta forma, es posible extraer la dinámica de interés del sistema \mathcal{S} considerado mediante la proyección de las variables dinámicas del espacio de Hilbert en su subespacio correspondiente.

2.1.1 Construcción de las ecuaciones maestras

El estado estadístico del sistema total $\mathcal{S} \oplus \mathcal{B}$ está caracterizado por el operador densidad ρ , cuya evolución temporal se halla regida por la ecuación de Liouville-von Neumann

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] = -iL\rho, \quad (2.3)$$

donde $L = (1/\hbar)[H, \dots]$ es el operador Liouvilliano hermitico (estrictamente hablando L es un superoperador). En nuestro caso, debido a la forma de H dada en la

ecuación (2.1), podemos escribir al Liouvilliano total como

$$L = L_0 + L' = L_S + L_B + L' . \quad (2.4)$$

Los operadores densidad reducidos ρ_S y ρ_B , correspondientes a los subsistemas \mathcal{S} y \mathcal{B} respectivamente, están relacionados con el operador densidad total ρ mediante las expresiones

$$\rho_S = Tr_B \rho , \quad (2.5)$$

$$\rho_B = Tr_S \rho , \quad (2.6)$$

donde Tr_i indica la operación de traza sobre el espacio de Hilbert correspondiente.

Con el fin de hallar las ecuaciones de movimiento de interés, definimos dos superoperadores de proyección hermíticos y ortogonales \mathcal{P} y $\mathcal{Q} = (1 - \mathcal{P})$, tales que \mathcal{P} sea de la forma

$$\mathcal{P} = G Tr_B . \quad (2.7)$$

Debido a que debe cumplirse que $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$, el operador G debe ser tal que satisfaga la condición $Tr_B G = 1$. La forma de dicho operador vendrá dada por el problema físico en cuestión y la condición inicial [Ha73]. En nuestro caso, y sin pérdida de generalidad, elegiremos la condición inicial como la correspondiente a un estado de no-equilibrio en el cual \mathcal{S} y \mathcal{B} son preparados en forma independiente, de modo tal que inicialmente no existan correlaciones entre ambos subsistemas. En ese caso

$$\rho(0) = \rho_S(0)\rho_B(0) . \quad (2.8)$$

De las ecuaciones (2.7) y (2.5) es claro que

$$\mathcal{P}\rho(t) = G\rho_S(t) , \quad (2.9)$$

y por lo tanto, a $t = 0$ se cumple que

$$\mathcal{P}\rho(0) = G\rho_S(0) , \quad (2.10)$$

$$\mathcal{Q}\rho(0) = (\rho_B(0) - G)\rho_S(0) . \quad (2.11)$$

Si elegimos al operador G tal que $G = \rho_B(0)$, entonces

$$\mathcal{P}\rho(t) = \rho_B(0)\rho_S(t) , \quad (2.12)$$

$$\mathcal{Q}\rho(0) = 0 , \quad (2.13)$$

de forma tal que podemos escribir a los operadores densidad reducidos como

$$\rho_S(t) = Tr_B \mathcal{P}\rho(t) , \quad (2.14)$$

$$\rho_B(t) = \rho_B(0) + Tr_S \mathcal{Q}\rho(t) . \quad (2.15)$$

Dado que $\rho = \mathcal{P}\rho + \mathcal{Q}\rho$, usando la ecuación (2.3) escribimos que

$$\mathcal{P}\dot{\rho} = -i\mathcal{P}L(\mathcal{P}\rho + \mathcal{Q}\rho) , \quad (2.16)$$

$$\mathcal{Q}\dot{\rho} = -i\mathcal{Q}L(\mathcal{P}\rho + \mathcal{Q}\rho) . \quad (2.17)$$

La ecuación (2.17) puede ser integrada formalmente, de modo tal que

$$\mathcal{Q}\rho(t) = e^{-i\mathcal{Q}L(t)}\mathcal{Q}\rho(0) - i \int_0^t d\tau e^{-i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}\tau} \mathcal{Q}L\mathcal{P}\rho(t - \tau) . \quad (2.18)$$

Al reemplazar esta expresión en la ecuación (2.16) obtenemos que

$$\mathcal{P}\dot{\rho} = -i\mathcal{P}L\mathcal{P}\rho - i\mathcal{P}L\left\{e^{-i\mathcal{Q}L(t)}\mathcal{Q}\rho(0) - i \int_0^t d\tau e^{-i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}\tau} \mathcal{Q}L\mathcal{P}\rho(t - \tau)\right\}$$

$$= -i\mathcal{P}L\mathcal{P}\rho - i\mathcal{P}L \int_0^t d\tau e^{-i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}\tau} \mathcal{Q}L\mathcal{P}\rho(t-\tau) , \quad (2.19)$$

donde hemos utilizado la propiedad (2.13) en la segunda igualdad. Teniendo en cuenta la invariancia cíclica del operador traza y la conmutatividad de las operaciones en los espacios de \mathcal{S} y \mathcal{B} , puede demostrarse que

$$\mathcal{P}L_{\mathcal{S}} = L_{\mathcal{S}}\mathcal{P} , \quad (2.20)$$

$$\mathcal{P}L_{\mathcal{B}} = L_{\mathcal{B}}\mathcal{P} = 0 , \quad (2.21)$$

y, dado que siempre podemos escribir H de forma tal de considerar a H' como no-diagonal en las coordenadas del reservorio, se cumple que

$$\mathcal{P}L'\mathcal{P} = 0 . \quad (2.22)$$

Utilizando las ecuaciones (2.20) a (2.22) en la (2.19), arribamos finalmente a la ecuación integrodiferencial inhomogénea en el tiempo

$$\dot{\rho}_{\mathcal{S}}(t) + iL_{\mathcal{S}}\rho_{\mathcal{S}}(t) + \int_0^t d\tau T r_{\mathcal{B}}\{L'e^{-i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}\tau} \mathcal{Q}L'\rho_{\mathcal{B}}(0)\}\rho_{\mathcal{S}}(t-\tau) = 0 , \quad (2.23)$$

que describe cómo el sistema abierto \mathcal{S} evoluciona bajo la influencia de \mathcal{B} . El conjunto de ecuaciones (2.23) y (2.18) es estrictamente equivalente a la ecuación de Liouville-von Neumann (2.3). En el caso trivial en que no exista interacción entre los sistemas \mathcal{S} y \mathcal{B} , ésta se reduce a la ecuación de Liouville-von Neumann $\dot{\rho} = -iL_{\mathcal{S}}\rho$ para el sistema cerrado \mathcal{S} . Si bien la ecuación (2.23) es exacta, no es demasiado útil en esta forma debido a la estructura sumamente compleja del superoperador de evolución $U(\tau) = \exp(-i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}\tau)$.

En este sentido, y con el fin de extraer mayor información de la ecuación (2.23), supondremos que la interacción entre los sistemas \mathcal{S} y \mathcal{B} es débil, de forma tal de poder reemplazar el operador L por L_0 en el operador de evolución. Esta es la

llamada *aproximación de Born* o *hipótesis de acoplamiento débil* y es equivalente a tratar la interacción a segundo orden. Si reemplazamos entonces al superoperador de evolución $U(\tau)$ por el propagador libre

$$U_0(\tau) = \exp\{-i\tau(L_S + L_B)\} , \quad (2.24)$$

obtenemos finalmente la *ecuación maestra generalizada*

$$\dot{\rho}_S(t) + iL_S\rho_S(t) + \int_0^t d\tau K(t-\tau)\rho_S(\tau) = 0 , \quad (2.25)$$

donde

$$K(t-\tau) = \text{Tr}_B\{L'e^{-iL_0(t-\tau)}L'\rho_B(0)\} \quad (2.26)$$

es el denominado superoperador de colisiones.

Observemos que el segundo término de la ecuación (2.25) representa al movimiento propio de S con su Hamiltoniano sin perturbar y el tercer término al movimiento inducido por la interacción con el reservorio térmico B . Este término es justamente el que provee la disipación al sistema S .

Notemos además que la técnica de los operadores de proyección nos permite eliminar completamente las variables del reservorio a cambio de introducir el término de memoria $K(t-\tau)$.

A partir de ahora, supondremos que inicialmente el reservorio B se halla en equilibrio térmico. En consecuencia, el operador densidad $\rho_B(0)$ será de la forma

$$\rho_B(0) \equiv \rho_B^e = \frac{e^{-\beta H_B}}{\text{Tr}_B(e^{-\beta H_B})} , \quad (2.27)$$

donde $\beta = (k_B T)^{-1}$, T es la temperatura del reservorio y k_B es la constante de Boltzman.

A continuación especializaremos los resultados anteriores al problema de la evolución irreversible del sistema S acoplado a un reservorio B a través del Hamiltoniano

de interacción definido en la ecuación (2.2). Para ello, es útil introducir la función de correlación

$$\begin{aligned}\Phi_{A,B}(t) &\equiv Tr_B(A(t)B\rho_B^e) = Tr_B(AB(-t)\rho_B^e) \\ &= Tr_B(e^{iH_B t/\hbar} A e^{-iH_B t/\hbar} B \rho_B^e)\end{aligned}\quad (2.28)$$

para los operadores A y B que evolucionan temporalmente con H_B .

Introduciendo el Hamiltoniano de interacción (2.2) en la ecuación (2.25), y utilizando el hecho de que

$$\Phi_{B_j, B_i}(-\tau) = (\Phi_{B_i, B_j}(\tau))^* , \quad (2.29)$$

se arriba a la ecuación maestra generalizada

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_S(t) + iL_S \rho_S(t) = & \\ & -\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \sum_{i,j} [S_i, e^{-iH_S \tau/\hbar} [S_j, \rho_S(t-\tau)] e^{iH_S \tau/\hbar}] \Re \{ \Phi_{B_i, B_j}(\tau) \} \\ & -\frac{i\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \sum_{i,j} [S_i, e^{-iH_S \tau/\hbar} [S_j, \rho_S(t-\tau)]_+ e^{iH_S \tau/\hbar}] \Im \{ \Phi_{B_i, B_j}(\tau) \} ,\end{aligned}\quad (2.30)$$

donde $[\dots]$ ($[\dots]_+$) representa la operación de conmutación (anticonmutación), y \Re e \Im la parte real e imaginaria respectivamente.

A partir de la ecuación maestra (2.30) es posible obtener ecuaciones de evolución para los observables macroscópicos de interés. Esto se logra teniendo en cuenta que el valor medio de un operador arbitrario A , perteneciente al subespacio de \mathcal{S} , se calcula como

$$\langle A \rangle_t = Tr_S \{ A \rho_S(t) \} , \quad (2.31)$$

y por lo tanto, de acuerdo a (2.30) podemos escribir que

$$\begin{aligned}
 \langle \dot{A} \rangle_t - \frac{i}{\hbar} \langle [H_S, A] \rangle_t = & \\
 -\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \sum_{i,j} \langle [e^{iH_S\tau/\hbar} [A, S_i] e^{-iH_S\tau/\hbar}, S_j] \rangle_{t-\tau} \Re\{\Phi_{B_i, B_j}(\tau)\} & \\
 -\frac{i\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \sum_{i,j} \langle [e^{iH_S\tau/\hbar} [A, S_i] e^{-iH_S\tau/\hbar}, S_j]_+ \rangle_{t-\tau} \Im\{\Phi_{B_i, B_j}(\tau)\} . & (2.32)
 \end{aligned}$$

Si asumimos que el tiempo τ_B en el que decaen las correlaciones del reservorio es mucho menor que el tiempo característico τ_S del sistema ($\tau_B \ll \tau_S$), podemos utilizar la aproximación

$$\rho_S(t - \tau) \approx e^{iH_S(t-\tau)/\hbar} \rho_S(t) e^{-iH_S(t-\tau)/\hbar} \quad (2.33)$$

dentro de la integral de la ecuación (2.30) y llevar su límite superior a ∞ . Esta es la denominada *aproximación de Markov*, a partir de la cual obtenemos que

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_S(t) + iL_S \rho_S(t) = & \\
 -\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_{i,j} [S_i, [S_j(-\tau), \rho_S(t)]] \Re\{\Phi_{B_i, B_j}(\tau)\} & \\
 -\frac{i\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_{i,j} [S_i, [S_j(-\tau), \rho_S(t)]_+] \Im\{\Phi_{B_i, B_j}(\tau)\} , & (2.34)
 \end{aligned}$$

donde $S(-\tau) = e^{-iH_S\tau/\hbar} S e^{iH_S\tau/\hbar}$. En este punto cabe acotar que τ_B posee dos orígenes claramente diferenciados: uno proveniente de la densidad de estados del reservorio y el otro de origen puramente térmico, lo cual se analizará en mayor detalle al tratar un reservorio bosónico.

Insertando la aproximación (2.33) en la ecuación (2.31), podemos escribir que

$$\langle A \rangle_{t-\tau} \approx \langle e^{-iH_S\tau/\hbar} A e^{iH_S\tau/\hbar} \rangle_t, \quad (2.35)$$

y en consecuencia, la evolución del valor medio del operador A en el régimen Markoviano estará regida por la ecuación

$$\begin{aligned} \langle \dot{A} \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle [H_S, A] \rangle = & \\ -\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_{i,j} \langle [[A, S_i], S_j(-\tau)] \rangle_t \Re\{\Phi_{B_i, B_j}(\tau)\} & \\ -\frac{i\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \sum_{i,j} \langle [[A, S_i], S_j(-\tau)]_+ \rangle_t \Im\{\Phi_{B_i, B_j}(\tau)\}. & \end{aligned} \quad (2.36)$$

Las ecuaciones Markovianas (2.34) y (2.36) son más sencillas de tratar que las (2.30) y (2.32), dado que estas últimas son integrodiferenciales, mientras que las primeras sólo son diferenciales.

2.1.2 Ecuación maestra asintótica

La matriz densidad reducida $\rho_S(t)$ posee una representación espectral de la forma

$$\rho_S(t) = \sum_{NN'} \rho_{NN'}(t) |N'\rangle \langle N|, \quad (2.37)$$

donde los elementos $|N\rangle$ representan a los autoestados de H_S con energía ϵ_N .

Se ha demostrado que el tiempo de decaimiento de los elementos de matriz no diagonales de dicha matriz es menor que el tiempo característico de evolución de sus elementos diagonales [Do82]. En consecuencia, en el régimen cercano al equilibrio

podemos escribir (2.37) como

$$\rho_S(t) = \sum_N \rho_N(t) |N\rangle\langle N| . \quad (2.38)$$

Introduciendo la representación espectral (2.38) en la ecuación maestra generalizada (2.30), obtenemos la ecuación de movimiento para la parte diagonal de $\rho_S(t)$ en la representación de energía

$$\dot{\rho}_N(t) = \int_0^t d\tau \sum_P \{w_{NP}(\tau)\rho_P(t-\tau) - w_{PN}(\tau)\rho_N(t-\tau)\} . \quad (2.39)$$

Esta ecuación nos indica que la variación temporal de la parte diagonal $\rho_N(t)$ de la desidad reducida $\rho_S(t)$ está regida por una ecuación maestra no Markoviana del tipo ganancia menos pérdida [Ha73, He87, Ca90], con probabilidades de transición instantáneas

$$w_{NP}(\tau) = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{ij} (S_j)_{NP} (S_i)_{PN} \{e^{-i\tau\Omega_{NP}} \Phi_{B_i, B_j}(\tau) + e^{i\tau\Omega_{NP}} \Phi_{B_i, B_j}(-\tau)\} , \quad (2.40)$$

$$w_{PN}(\tau) = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{ij} (S_i)_{NP} (S_j)_{PN} \{e^{-i\tau\Omega_{NP}} \Phi_{B_i, B_j}(-\tau) + e^{i\tau\Omega_{NP}} \Phi_{B_i, B_j}(\tau)\} , \quad (2.41)$$

donde $\hbar\Omega_{NP} = \epsilon_N - \epsilon_P$ y $(S)_{NP}$ denota a los elementos de matriz $\langle N|S|P\rangle$.

Tomando el límite Markoviano en la ecuación maestra (2.39), o equivalentemente partiendo de (2.34), se arriba a la ecuación maestra Markoviana [Hak77, vKa81]

$$\dot{\rho}_N(t) = \sum_P \{W_{NP} \rho_P(t) - W_{PN} \rho_N(t)\} , \quad (2.42)$$

siendo en este caso las probabilidades de transición

$$W_{NP} = \int_0^\infty d\tau w_{NP}(\tau) = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{i,j} (S_j)_{NP} (S_i)_{NP} \Phi_{B_i, B_j}[\Omega_{NP}] , \quad (2.43)$$

$$W_{PN} = \int_0^{\infty} d\tau w_{PN}(\tau) = e^{\beta\hbar\Omega_{NP}} W_{NP} , \quad (2.44)$$

donde la transformada de Fourier

$$\Phi_{B_i, B_j}[\omega] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \Phi_{B_i, B_j}(t) \quad (2.45)$$

denota al espectro de las funciones de correlación $\Phi_{B_i, B_j}(t)$. Al escribir la ecuación (2.44) hemos usado la igualdad

$$\Phi_{B_i, B_j}[-\omega] = e^{\beta\hbar\omega} \Phi_{B_j, B_i}[\omega] . \quad (2.46)$$

De la ecuación maestra (2.42) y utilizando las probabilidades de transición (2.43) y (2.44), puede verse que el operador densidad

$$\rho_S^e = \frac{e^{-\beta H_S}}{\text{Tr}_S e^{-\beta H_S}} \quad (2.47)$$

la satisface en la situación estacionaria. Por lo tanto, esta ecuación tiene por solución de equilibrio a la densidad canónica del sistema S aislado. Esto es consecuencia de la hipótesis de acoplamiento débil ya que en el caso general, si la interacción con el reservorio no es débil, esta provee modificaciones a la forma canónica [Fo65, Cal81, Ma84, Lin84]. Asimismo, es necesario destacar que la aproximación (2.38) sólo es válida bajo esta hipótesis. Este punto será analizado con mayor detalle más adelante.

Cabe agregar que en el caso no Markoviano descrito por la ecuación (2.39) pueden aparecer comportamientos no Gibbsianos en la distribución de equilibrio, en la que el sistema S se termaliza a una temperatura distinta a la del reservorio B [Ca88, Ca88b].

Utilizando la relación (2.44), puede demostrarse que la ecuación maestra Markoviana (2.42) satisface la condición de *balance detallado* [Hak77]

$$W_{NP} \rho_P^e = W_{PN} \rho_N^e , \quad (2.48)$$

la cual es consecuencia de la suposición de régimen asintótico (cercanía del equilibrio). Notemos que para hallar esta relación no se requiere un conocimiento detallado del reservorio, sino solamente propiedades termodinámicas generales.

2.2 Formalismo de Langevin

2.2.1 Ecuaciones de Langevin cuánticas

Analizaremos a continuación otra metodología usual para abordar el problema planteado en el inicio del presente capítulo. En lugar de utilizar como ecuación de partida la ecuación de Liouville-von Neumann (2.3), lo que es análogo a trabajar en la representación de Schrödinger, utilizaremos las ecuaciones de movimiento que surgen al trabajar en la representación de Heisenberg. En este caso, sin embargo, no es posible hallar resultados totalmente generales y es necesario explicitar la forma de los operadores pertenecientes al subespacio del reservorio \mathcal{B} . A tal fin, utilizaremos el modelo de reservorio de osciladores independientes, los cuales representan modos normales del reservorio térmico, y un acoplamiento que sea lineal en las coordenadas del mismo. Este modelo ha sido extensamente utilizado en la literatura [Fo65, Ul66, Bo67, Ha73] y, en particular, en la Ref. [Cal83] puede hallarse una discusión acerca de la validez de dicho modelo.

En este caso, escribimos el Hamiltoniano (2.2) como

$$H = H_S + \sum_{\alpha} \hbar \omega_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} + \lambda \sum_{i\alpha} \gamma_{i\alpha} S_i (b_{\alpha}^{\dagger} + b_{\alpha}) , \quad (2.49)$$

donde b_{α}^{\dagger} y b_{α} son, respectivamente, operadores de creación y destrucción de un cuanto del modo α del reservorio, y $\gamma_{i\alpha}$ son constantes reales de acoplamiento.

En la representación de Heisenberg, la ecuación de movimiento para un operador

arbitrario A perteneciente al subespacio de \mathcal{S} es

$$\dot{A}(t) = \frac{i}{\hbar}[H_S, A(t)] + \frac{i\lambda}{\hbar} \sum_{i\alpha} \gamma_{i\alpha} [S_i(t), A(t)] (b_\alpha^\dagger(t) + b_\alpha(t)) , \quad (2.50)$$

mientras que para los operadores reservorio b_α y b_α^\dagger es

$$\dot{b}_\alpha(t) = -i\omega_\alpha b_\alpha(t) - \frac{i\lambda}{\hbar} \sum_i \gamma_{i\alpha} S_i(t) \quad (2.51)$$

y la respectiva ecuación hermítica conjugada para b_α^\dagger .

Dado que las ecuaciones para los operadores del reservorio son lineales, las mismas pueden ser formalmente integradas, de forma tal que

$$\begin{aligned} (b_\alpha^\dagger(t) + b_\alpha(t)) &= [e^{-i\omega_\alpha t} b_\alpha(0) + e^{i\omega_\alpha t} b_\alpha^\dagger(0)] \\ &\quad - \sum_i \frac{2\lambda\gamma_{i\alpha}}{\hbar} \int_0^t d\tau \sin \omega_\alpha(t - \tau) S_i(\tau) . \end{aligned} \quad (2.52)$$

En este punto podemos señalar una posible “ventaja” del tratamiento mediante ecuaciones maestras: no es necesario hacer suposiciones acerca de la forma de los operadores del reservorio intervinientes en el Hamiltoniano de interacción, excepto pedir que se cumpla la condición (2.22). Por el contrario, si el acoplamiento fuera no lineal en dichos operadores no es sencillo obtener una ecuación del tipo (2.52) y será necesario realizar algún tipo de expansión con el fin de poder obtener una ecuación de movimiento para el operador A [Co85].

Si queremos realizar una interpretación correcta de los términos que aparecerán en la ecuación de movimiento de A , es necesario que la integral de la ecuación (2.52) sea hecha por partes [Lin84]. De este modo, llevamos dicha ecuación a la forma

$$(b_\alpha^\dagger(t) + b_\alpha(t)) = [e^{-i\omega_\alpha t} b_\alpha(0) + e^{i\omega_\alpha t} b_\alpha^\dagger(0)]$$

$$\begin{aligned}
 & - \sum_i \frac{2\lambda\gamma_{i\alpha}}{\hbar\omega_\alpha} S_i(t) + \sum_i \frac{2\lambda\gamma_{i\alpha}}{\hbar\omega_\alpha} \cos\omega_\alpha t S_i(0) \\
 & + \sum_i \frac{2\lambda\gamma_{i\alpha}}{\hbar\omega_\alpha} \int_0^t d\tau \cos\omega_\alpha(t-\tau) \dot{S}_i(\tau) . \quad (2.53)
 \end{aligned}$$

Finalmente, si sustituimos la ecuación (2.53) en la (2.50) podemos eliminar las variables del reservorio en esta última. De este modo, arribamos a la ecuación de evolución

$$\begin{aligned}
 \dot{A}(t) &= \frac{i}{\hbar} [H_S, A] + i \sum_i [S_i(t), A(t)] F_i(t) \\
 & - i\hbar \sum_{ij} K_{ij}(0) [S_i(t), A(t)] S_j(t) + i\hbar \sum_{ij} K_{ij}(t) [S_i(t), A(t)] S_j(0) \\
 & + i\hbar \int_0^t d\tau \sum_{ij} K_{ij}(t-\tau) [S_i(t), A(t)] \dot{S}_j(\tau) , \quad (2.54)
 \end{aligned}$$

donde hemos introducido las cantidades

$$K_{ij}(t) = \sum_\alpha \frac{2\lambda^2}{\hbar^3\omega_\alpha} \gamma_{i\alpha}\gamma_{j\alpha} \cos\omega_\alpha(t) , \quad (2.55)$$

$$F_i(t) = \sum_\alpha \frac{\lambda\gamma_{i\alpha}}{\hbar} [e^{-i\omega_\alpha t} b_\alpha(0) + e^{i\omega_\alpha t} b_\alpha^\dagger(0)] . \quad (2.56)$$

Es *importante* notar que al escribir la ecuación de evolución (2.54) hemos mantenido siempre el orden de los operadores, dado que los términos individuales que aparecen en (2.53) en general no conmutarán con $[S, A]$. Por lo tanto, es imprescindible considerar la ecuación (2.54) en su forma equivalente totalmente simetrizada.

Notemos que los operadores $F_i(t)$ definidos en la ecuación (2.56) dependen únicamente de los valores iniciales de los operadores del reservorio. Por lo tanto, podemos identificar a esta cantidad con las fluctuaciones debidas a la incerteza en dichos valores iniciales.

Si elegimos como condición inicial la situación de no equilibrio, en la cual la distribución inicial del reservorio está dada por la ecuación (2.27), hallamos que los operadores estocásticos $F_i(t)$ están centrados en cero

$$\langle F_i(t) \rangle = 0 , \quad (2.57)$$

y que las funciones de correlación de las fluctuaciones adoptan la forma

$$\langle F_i(t) F_j(t') \rangle = \sum_{\alpha} \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \gamma_{i\alpha} \gamma_{j\alpha} \{ n_{\alpha} e^{i\omega_{\alpha}(t-t')} + (n_{\alpha} + 1) e^{-i\omega_{\alpha}(t-t')} \} , \quad (2.58)$$

donde

$$n_{\alpha} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{\alpha}} - 1} \quad (2.59)$$

es el valor medio del número de ocupación del modo α del reservorio en equilibrio.

Debido a que los operadores F_i pertenecen al subespacio B , los valores medios en (2.57) y (2.58) deben ser tomados sobre las coordenadas del reservorio mediante la expresión $\langle B \rangle = \text{Tr}_B \{ B(t) \rho_B^e \}$. Asimismo, a partir de la definición (2.56), es posible demostrar que estos operadores estocásticos poseen una distribución de tipo gaussiana [Fo65].

La ecuación (2.54) es del tipo de las ecuaciones de Langevin cuánticas [Hak70, Gra82]. De acuerdo al valor que tomen los conmutadores $[S_i, A]$ en dicha ecuación, podremos distinguir dos comportamientos distintos:

- *Procesos estocásticos aditivos*: si los conmutadores son c-números, las fuerzas fluctuantes intervendrán solo en forma aditiva en la ecuación, de modo tal que las fluctuaciones no dependerán de los valores de las variables colectivas, y los correspondientes términos disipativos, representados por el último término de (2.54), serán lineales en las coordenadas del sistema.
- *Procesos estocásticos multiplicativos*: si algún conmutador es un operador del sistema, la respectiva fuerza fluctuante intervendrá en forma multiplicativa y

por lo tanto las fluctuaciones dependerán del estado del sistema. El término disipativo que aparece para compensar dichas fluctuaciones multiplicativas será necesariamente no lineal en las coordenadas del sistema.

2.2.2 Relación de fluctuación-disipación cuántica

Las fluctuaciones y la disipación, representadas respectivamente por los operadores $F_i(t)$ y $K_{ij}(t-\tau)$, son manifestaciones de la interacción del sistema \mathcal{S} con el reservorio térmico, las cuales se hallan vinculadas mediante las denominadas relaciones de fluctuación-disipación (RFD). En los sistemas clásicos, esta relación es un principio general que asegura la equilibración térmica del sistema. Usualmente, en los sistemas cuánticos se asume su validez, pero debe tenerse en cuenta que en este caso dicha relación adopta una forma distinta.

La función de correlación simetrizada puede escribirse como

$$\frac{1}{2} \langle F_i(t)F_j(\tau) + F_i(\tau)F_j(t) \rangle = \sum_{\alpha} \varphi_{ij}^{\alpha}(t-\tau) , \quad (2.60)$$

donde, según (2.58), es

$$\varphi_{ij}^{\alpha}(t-\tau) = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \gamma_{i\alpha} \gamma_{j\alpha} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega_{\alpha}}{2}\right) \cos(\omega_{\alpha}(t-\tau)) . \quad (2.61)$$

A partir de las expresiones (2.55), (2.60) y (2.61), podemos escribir la relación de fluctuación-disipación cuántica (RFDC)

$$K_{ij}(t-\tau) = \sum_{\alpha} \frac{2}{\hbar \omega_{\alpha}} \tanh\left(\frac{\beta \hbar \omega_{\alpha}}{2}\right) \varphi_{ij}^{\alpha}(t-\tau) \quad (2.62)$$

para nuestro sistema. Esta relación ha sido hallada anteriormente para el caso de un sistema acoplado a un reservorio bosónico, siendo el acoplamiento lineal en las coordenadas del sistema y del reservorio [Lin84, Co85]; y para un sistema de dos

niveles acoplado a un reservorio bosónico en el caso de acoplamiento cuadrático en las coordenadas del sistema y lineal en las del reservorio [Wes85]. Debido al desarrollo efectuado, vemos que la validez de la relación (2.62) es más general, cumpliéndose para todo sistema \mathcal{S} en interacción con un reservorio de osciladores, en los casos de acoplamiento lineal en las coordenadas del reservorio y arbitrario en las coordenadas del sistema. Si el acoplamiento es no lineal en las coordenadas del reservorio, se ha demostrado que la RFDC se modifica [Co85].

En el límite clásico, la relación (2.62) se reduce a la expresión conocida

$$\langle F_i(t)F_j(\tau) + F_i(\tau)F_j(t) \rangle = 2k_B T K_{ij}(t - \tau) . \quad (2.63)$$

Vemos entonces que, mientras en el caso clásico la RFD depende solamente de la temperatura del reservorio, en el caso cuántico la RFDC depende además explícitamente del espectro en frecuencias del reservorio. En consecuencia, al formular un modelo cuántico fenomenológico se debe introducir una descripción detallada del reservorio.

Capítulo 3

Propiedades del reservorio térmico

En la sección 2.1 hemos obtenido la ecuación (2.30) que rige la evolución del operador densidad reducido del sistema S y su versión Markoviana (2.34). Es importante destacar que en dicha ecuación *sólo es necesario especificar la condición inicial del reservorio*. A partir de $t = 0$ el reservorio evoluciona de acuerdo a la ecuación (2.15). Introduciendo las ecuaciones (2.18) y (2.13) en la (2.15), obtenemos que

$$\rho_B(t) = \left\{ 1 - i \int_0^t d\tau Tr_S e^{-iQLQ\tau} L' \rho_S(t - \tau) \right\} \rho_B(0) . \quad (3.1)$$

Esta ecuación, en principio, nos permite determinar la evolución de $\rho_B(t)$ a partir del conocimiento de $\rho_S(t)$. Sin embargo, la ecuación (3.1) no es demasiado útil debido a la presencia del factor $e^{-iQLQ\tau}$ dentro de la integral. En este caso, la aproximación Markoviana para el operador densidad del reservorio claramente no es válida y la validez de la aproximación de Born es dudosa. En el caso de utilizar el formalismo de Langevin, la evolución de los operadores del reservorio está determinada a través de la ecuación (2.51) y su hermítica conjugada. Por lo tanto, concluimos que el efecto del sistema sobre el reservorio está *totalmente* incluido en la descripción, para

cualquiera de los dos métodos.

Respecto de lo expuesto en el párrafo anterior, podemos agregar que una suposición frecuente en la literatura es considerar al reservorio térmico en equilibrio a todo tiempo, lo cual implica despreciar la modulación del reservorio por el sistema en una escala temporal característica de este último o bien suponer que el acoplamiento es débil.

3.1 Disipación Ohmica

Con el fin de comparar los resultados obtenidos en la sección 2.1 con los obtenidos en la sección 2.2, calcularemos las funciones de correlación (2.28) para el modelo de reservorio bosónico definido a través del Hamiltoniano (2.49). En este caso, dado que los operadores B_k correspondientes al reservorio son de la forma

$$B_k = \sum_{\alpha} \gamma_{k\alpha} (b_{\alpha}^{\dagger} + b_{\alpha}) , \quad (3.2)$$

las mismas vienen dadas por la expresión

$$\Phi_{B_i B_j}(t) = 2 \sum_{\alpha} \gamma_{i\alpha} \gamma_{j\alpha} \{ (2n_{\alpha} + 1) \cos(\omega_{\alpha} t) - i \sin(\omega_{\alpha} t) \} , \quad (3.3)$$

donde n_{α} está dado por la expresión (2.59) y representa al valor medio del número de ocupación de cada modo del reservorio en la situación de equilibrio .

Observamos entonces que la parte imaginaria de la función de correlación sólo dependerá de las características del reservorio, mientras que la parte real dependerá además de la temperatura del mismo a través de las cantidades n_{α} .

De las ecuaciones (2.55), (2.60) y (2.61) puede demostrarse que

$$\frac{2\lambda^2}{\hbar^3} \Im m \{ \Phi_{B_i B_j}(t) \} = \frac{\partial}{\partial t} K_{ij}(t) , \quad (3.4)$$

$$\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \Re\{\Phi_{B_i B_j}(t-\tau)\} = \frac{1}{2} \langle F_i(t)F_j(\tau) + F_i(\tau)F_j(t) \rangle \quad (3.5)$$

En consecuencia, es importante destacar aquí que *la parte imaginaria de la función de correlación está relacionada con la disipación, mientras que su parte real con las fluctuaciones.*

Como indicamos anteriormente, para que el reservorio se comporte como tal, debemos reemplazar en las expresiones anteriores las sumatorias sobre los modos del reservorio por integrales. Para ello haremos el reemplazo

$$\sum_{\alpha} \gamma_{i\alpha} \gamma_{j\alpha} \longrightarrow \int_0^{\infty} d\omega g_{ij}(\omega) , \quad (3.6)$$

donde $g_{ij}(\omega)$ es la densidad de estados del reservorio. La denominada disipación de tipo Ohmico se obtiene utilizando una densidad del tipo [As85]

$$g_{ij}(\omega) = \mu_{ij} \frac{\hbar^2}{\pi} \omega h_c(\omega/\gamma) , \quad (3.7)$$

donde γ es, esencialmente, el ancho de banda bosónico, y $h_c(\omega/\gamma)$ es alguna función de corte que satisfaga la relación $h_c(0) = 1$ y sea decreciente en un rango de frecuencias del orden de γ . En nuestro caso utilizaremos una función de corte de tipo Lorentziana [Ul66, Cal83, Lin84, Ris85, Ta90], de modo tal que

$$g_{ij}(\omega) = \mu_{ij} \frac{\hbar^2}{\pi} \frac{\gamma^2 \omega}{\gamma^2 + \omega^2} . \quad (3.8)$$

En el Apéndice B puede verse que para este modelo de reservorio bosónico se cumplen las relaciones

$$\Im\{\Phi_{B_i B_j}(\tau)\} = -\mu_{ij} \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2} e^{-\gamma\tau} , \quad (3.9)$$

$$\Re\{\Phi_{B_i B_j}(\tau)\} = \mu_{ij} \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2} \left\{ \cot\left(\frac{\beta\hbar\gamma}{2}\right) e^{-\gamma\tau} \right.$$

$$-\sum_{k=1}^{\infty} \frac{8\pi k}{(\beta\hbar\gamma)^2 - (2\pi k)^2} e^{-(2\pi k\tau)/(\beta\hbar)} \} . \quad (3.10)$$

A partir de estas expresiones, puede demostrarse que que dichas funciones satisfacen que

$$\int_0^{\infty} dt \Re\{\Phi_{B_i B_j}(t)\} = \mu_{ij} \hbar k_B T , \quad (3.11)$$

$$\int_0^{\infty} dt \Im\{\Phi_{B_i B_j}(t)\} = \mu_{ij} \hbar \frac{\hbar\gamma}{2} , \quad (3.12)$$

de forma tal que la primera de estas integrales temporales representa a la temperatura del reservorio y la otra a la energía del estado fundamental máxima del reservorio bosónico.

De las expresiones (3.9) y (3.10) observamos que el tiempo característico de decaimiento de las correlaciones del reservorio asociadas a los procesos de disipación es la inversa γ^{-1} del ancho de banda . En cambio, en el caso de las fluctuaciones, el tiempo característico dependerá de la relación entre γ^{-1} y $\beta\hbar/(2\pi)$. Esto se debe a que el reservorio puede disipar excitaciones que se hallen en el rango $(0, \hbar\gamma)$ mientras que las fluctuaciones espontáneas ocurren en el intervalo $(0, k_B T)$. Por lo tanto, aunque el ancho de banda sea infinito (disipación δ -correlacionada), las fluctuaciones se mantendrán necesariamente correlacionadas en un tiempo finito que depende de la temperatura. En consecuencia, la disipación y las fluctuaciones generalmente tendrán distintas escales temporales [Lin84].

De lo dicho anteriormente concluimos que debe tenerse cuidado al tomar el límite Markoviano dado que, si bien el ancho de banda puede ser muy grande, si la temperatura es suficiente baja la aproximación puede no ser válida. En particular, si $T = 0$ la aproximación de Markov no es aplicable.

Capítulo 4

Movimiento armónico cuántico bajo distintas interacciones

4.1 Análisis general

En muchos campos de la física, y en especial en problemas relacionados con materia condensada, óptica cuántica y teoría nuclear, se encuentran sistemas describiendo un movimiento armónico, el cual es perturbado por alguna interacción estocástica con un sistema macroscópico. Esta situación corresponde típicamente al acoplamiento residual entre uno o varios modos normales de un fluido cuántico, un campo electromagnético o un sistema de muchos cuerpos, con los restantes grados de libertad microscópicos ocultos.

Por lo tanto, en este capítulo aplicaremos las técnicas formales desarrolladas en las secciones 2.1 y 2.2 al modelo que proviene de considerar que el sistema \mathcal{S} es un oscilador cuántico lineal de frecuencia natural ω_o , masa m y operadores de creación y destrucción Γ^\dagger y Γ respectivamente.

Supondremos que el oscilador se acopla al reservorio térmico de forma tal que el

Hamiltoniano (2.2) del sistema total es

$$H = \hbar\omega_o\Gamma^\dagger\Gamma + H_B + \lambda \sum_k f_k(Q)B_k , \quad (4.1)$$

donde las $f_k(Q)$ son funciones arbitrarias de la posición

$$Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_o}}(\Gamma^\dagger + \Gamma) \quad (4.2)$$

del oscilador, pero no de su momento

$$P = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_o}{2}}(\Gamma^\dagger - \Gamma) . \quad (4.3)$$

Cada uno de los operadores B_k debe ser hermítico, y contendrá una suma infinita sobre todos los grados de libertad del reservorio.

La elección del acoplamiento propuesto es una generalización del denominado *acoplamiento completo* [Lin84], el cual consiste en suponer una interacción proporcional a la posición del oscilador. La otra elección usual de acoplamiento es la utilización de la *aproximación de onda rotante* [Ag74, Fo88], cuya forma e implicancias se analizarán más adelante.

Si en vez de considerar un oscilador de masa m y frecuencia angular ω_o , analizamos un modo del campo electromagnético con frecuencia ω_o , basta reemplazar la masa m por el término $\hbar\omega_o/c^2$ en las ecuaciones utilizadas.

La ecuación de evolución para el valor medio de un operador A arbitrario perteneciente al subespacio del oscilador se obtiene reemplazando los términos correspondientes en la ecuación (2.32), de modo tal que

$$\begin{aligned} \langle \dot{A} \rangle_t - \frac{i}{\hbar} \langle [H_S, A] \rangle_t = \\ -\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \sum_{i,j} \langle [e^{iH_S\tau/\hbar} [A, f_i(Q)] e^{-iH_S\tau/\hbar}, f_j(Q)] \rangle_{t-\tau} \Re e \{ \Phi_{B_i, B_j}(\tau) \} \end{aligned}$$

$$-\frac{i\lambda^2}{\hbar^2} \int_0^t d\tau \sum_{ij} \langle [e^{iH_S\tau/\hbar} [A, f_i(Q)] e^{-iH_S\tau/\hbar}, f_j(Q)]_+ \rangle_{t-\tau} \Im m \{ \Phi_{B_i, B_j}(\tau) \} \quad (4.4)$$

A partir de esta ecuación, podemos ver que la evolución del valor medio de la posición Q del oscilador viene dada por

$$\langle \dot{Q} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle P \rangle_t, \quad (4.5)$$

que no es otra que la versión en operadores de la relación de Newton $\dot{q} = p/m$. Esta ecuación no sólo se satisface para los valores medios, sino también para los operadores mismos, según puede calcularse fácilmente a partir de la ecuación de Langevin (2.54).

Notemos que si el acoplamiento fuese una función de P además de Q (como ocurre al utilizar la aproximación de onda rotante), esta última relación no se satisface. Esto dificultará entre otras cosas, la identificación del término disipativo correcto en la ecuación de fuerzas, ya que éste debe asociarse con el término que es lineal en la velocidad [Lin84].

La ecuación correspondiente para la evolución del valor medio del momento P resulta ser

$$\begin{aligned} \langle \dot{P} \rangle_t + m\omega_0^2 \langle Q \rangle_t = & \\ & + \frac{i\lambda^2}{\hbar} \int_0^t d\tau \sum_{ij} \langle [f'_i(Q(-\tau)), f_j(Q)] \rangle_{t-\tau} \Re e \{ \Phi_{B_i, B_j}(\tau) \} \\ & - \frac{\lambda^2}{\hbar} \int_0^t d\tau \sum_{ij} \langle [f'_i(Q(-\tau)), f_j(Q)]_+ \rangle_{t-\tau} \Im m \{ \Phi_{B_i, B_j}(\tau) \}, \quad (4.6) \end{aligned}$$

donde usamos el hecho de que $[P, f_k(Q)] = -i\hbar f'_k(Q)$.

En las secciones siguientes estudiaremos y compararemos los resultados que se obtienen al proponer acoplamientos con distintas funciones $f_k(Q)$.

4.2 Acoplamiento lineal

Analizaremos en esta sección el caso en que la interacción es lineal en las coordenadas del oscilador, o sea

$$f_{AL}(Q) = Q . \quad (4.7)$$

A partir del trabajo de Ullersma [Ul66] este sistema ha sido extensamente discutido en la literatura mediante ecuaciones de Langevin cuánticas [Lin84, Ha85, Ris85, Fo88] e integrales de camino [Cal83, Ta90] y modelando el reservorio mediante uno de tipo bosónico. Contrariamente, los tratamientos basados en ecuaciones maestras generalizadas, si bien se han utilizado con reservorios bosónicos [Ha73, Ag74, Dr81, Li86] y fermiónicos [He84, Ca88], en todos ellos se implementa la aproximación de onda rotante. Existen dos formas convencionales de aplicar esta aproximación. La primera de ellas consiste en suponer que el Hamiltoniano de interacción sólo consta de procesos microscópicos elásticos. Por ejemplo, en el caso de reservorio de osciladores esta aproximación consiste en utilizar una interacción del tipo

$$H' = \lambda \sum_j \gamma_j (\Gamma^\dagger b_j + \Gamma b_j^\dagger) , \quad (4.8)$$

lo que corresponde a despreciar los términos inelásticos Γb_j y $\Gamma^\dagger b_j^\dagger$ que aparecen al considerar el acoplamiento completo, que en este caso es de la forma

$$H' = \lambda \sum_j \gamma_j Q q_j . \quad (4.9)$$

La otra aproximación [Ag74] consiste en partir del acoplamiento completo y despreciar luego los términos inelásticos en la ecuación maestra obtenida.

De lo expuesto anteriormente, resulta interesante implementar el método de la ecuación maestra al modelo de acoplamiento lineal completo y comparar los resultados con los obtenidos vía la ecuación de Langevin cuántica.

Si calculamos la evolución no Markoviana del valor medio del impulso a través

de la ecuación (4.6) y la insertamos en la (4.5), obtenemos que la ecuación

$$m\langle \ddot{Q} \rangle_t = -m\omega_o^2 \langle Q \rangle_t - \frac{2\lambda^2}{\hbar} \int_0^t d\tau \Im m\{\Phi(\tau)\} \langle Q \rangle_{t-\tau} \quad (4.10)$$

rige la evolución temporal del valor medio del desplazamiento del oscilador. Para abreviar notación, hemos puesto que $\Phi_{BB}(t) = \Phi(t)$.

El segundo término del miembro derecho es el que incluye los efectos del reservorio sobre el oscilador. Se podría decir entonces que éste es el término que introduce la disipación en el sistema. Esto, en rigor es incorrecto debido a que el reservorio origina otros efectos además de la disipación. Para obtener una interpretación correcta de este término debemos integrarlo por partes, de forma análoga a lo explicado en la sección 2.2.1. De esta forma, la evolución no Markoviana del valor medio del operador Q resulta ser

$$m\langle \ddot{Q} \rangle_t = -m\Omega^2 \langle Q \rangle_t - \hbar^2 \mu(t) \langle Q \rangle_0 - \hbar^2 \int_0^t d\tau \mu(t-\tau) \langle \dot{Q} \rangle_{t-\tau} , \quad (4.11)$$

donde la función $\mu(t)$ está definida a través de la relación

$$\frac{\partial}{\partial t} \mu(t) = \frac{2\lambda^2}{\hbar^3} \Im m\{\Phi(t)\} , \quad (4.12)$$

y la frecuencia Ω por

$$\Omega^2 = \omega_o^2 - \frac{\hbar^2}{m} \mu(0) . \quad (4.13)$$

De la definición (4.12), y según la relación (3.4), observamos que $\mu(t)$ coincide con el núcleo disipativo $K(t)$ del formalismo de Langevin en la situación de reservorio bosónico.

Vemos entonces que el término mencionado anteriormente se desdobra en tres contribuciones, las cuales producen efectos de distinto tipo en la evolución. El efecto

disipativo se halla representado por el término de memoria que incluye al valor medio de la velocidad $\langle \dot{Q} \rangle$. Otro de los términos introduce el valor inicial $\langle Q \rangle_0$ de la coordenada en su ecuación de movimiento. Este término es proporcional a $\mu(t)$ y por lo tanto solo será relevante en los primeros instantes de la evolución, cuando aún no han decaído las correlaciones del reservorio. Finalmente, el término restante introduce un corrimiento en la frecuencia de oscilación natural ω_0 del sistema. Más generalmente, de las ecuaciones de evolución (4.5) y (4.6) puede establecerse que el acoplamiento con un reservorio a través de un Hamiltoniano del tipo definido en la ecuación (4.1), introduce una corrección al potencial original $V(Q)$. En este caso, en que el acoplamiento es lineal en las coordenadas del sistema, $V(Q)$ adquiere un término extra negativo que juega el papel de una corrección al cuadrado de la frecuencia original ω_0 , de modo tal que el potencial efectivo será

$$V_{ef}^{AL} = \frac{1}{2}(m\omega_0^2 - \hbar^2\mu(0))Q^2 . \quad (4.14)$$

Este efecto, que puede ser importante de forma tal de volver inestable al potencial original, se lo suele denominar *renormalización del potencial* [Cal83]. Por lo tanto, pediremos que se cumpla la condición de positividad [Ha85]

$$m\omega_0^2 > \hbar^2\mu(0) \quad (4.15)$$

para que el potencial efectivo V_{ef}^{AL} sea estable.

A partir del trabajo de Caldeira y Legget [Cal83], suele adicionarse al Hamiltoniano total un *contratérmino*, que en nuestro caso será de la forma

$$H_c = \frac{\hbar^2\mu(0)}{2}Q^2 , \quad (4.16)$$

con el fin de eliminar el efecto de renormalización producido por el reservorio. De esta forma, en la ecuación de evolución macroscópica sólo aparecerá la frecuencia natural ω_0 . La inclusión o no de este contratérmino dependerá exclusivamente del problema físico a tratar ya que la ocurrencia del efecto de renormalización como fenómeno físico

real depende de la naturaleza del sistema considerado [Cal83, Cal83b]. Asimismo, es claro que no es lo mismo analizar “cómo afecta la disipación a un sistema” que estudiar “cómo afecta a un sistema la interacción con un reservorio que introduce disipación”. Nosotros adoptaremos este último punto de vista y por lo tanto trabajaremos con el Hamiltoniano (4.1) sin incluir contratérminos.

Utilizando el formalismo de Langevin, es sencillo arribar a una ecuación para la evolución del operador posición Q . Especializando la ecuación de Langevin (2.54) para el caso de acoplamiento lineal, esta resulta ser

$$m\ddot{Q}(t) = -m\Omega^2 Q(t) - \hbar^2 K(t)Q(0) - \hbar^2 \int_0^t d\tau K(t-\tau) \dot{Q}(t) - \hbar F(t) , \quad (4.17)$$

la cual coincide con la ecuación de Langevin hallada en las Refs.[Fo87, Fo88]. En este caso no ha sido necesario simetrizar productos de operadores debido a la linealidad de la interacción.

Es natural preguntarse en este punto acerca de la relación entre la ecuación de Langevin cuántica (4.17) y la ecuación (4.11) hallada a partir de la ecuación maestra generalizada correspondiente. Para responder esta cuestión es importante destacar aquí que el tomar valor medio en la ecuación (4.17) no es la misma operación definida en (2.31). Esto se debe a que, para obtener la ecuación maestra generalizada, hemos realizado un procedimiento de proyección a través del operador \mathcal{P} definido en (2.7), mientras que en el procedimiento de Langevin las ecuaciones de operadores actúan no solamente sobre el subespacio \mathcal{S} , sino sobre el espacio total $\mathcal{S} \oplus \mathcal{B}$. Dado que hemos utilizado la representación de Heisenberg para obtener la ecuación (4.17), los operadores evolucionan en el tiempo y, por lo dicho anteriormente, se cumple que

$$\langle A \rangle_t = Tr(A(t)\rho(0)) = Tr_S Tr_B(A(t)\rho_S(0)\rho_B(0)) , \quad (4.18)$$

donde hemos utilizado la condición inicial (2.8). En consecuencia, al aplicar la

definición (4.18) en la ecuación de Langevin (4.17), y teniendo en cuenta que el operador estocástico $F(t)$ está centrado en cero, obtenemos la ecuación de evolución (4.11). Por lo tanto, en virtud de la relación (4.12), concluimos que ambos tratamientos conducen al mismo resultado.

Al escribir la ecuación maestra generalizada (2.30) hemos utilizado la aproximación de acoplamiento débil, mientras que para obtener la ecuación de Langevin (2.54) no hemos hecho ninguna suposición similar. Sin embargo, recordemos que la condición de positividad (4.15) impone una restricción al parámetro λ , ya que $\mu(0) \propto \lambda^2$. Esto es esperable dado que, si el acoplamiento con el reservorio no fuese débil, el potencial original se transformará en un potencial efectivo de tipo inestable.

Utilizando la ecuación maestra generalizada hemos obtenido una ecuación para la evolución del valor medio del operador posición del oscilador. Por lo tanto, hemos perdido información explícita acerca de las fluctuaciones, la cual podemos recuperar utilizando la relación de fluctuación-disipación o bien, como veremos luego, mediante el cálculo de la evolución temporal de los segundos momentos.

Si tomamos el límite Markoviano directamente en la ecuación de evolución (4.10), no será necesario integrar por partes. Especializando la aproximación (2.35) para el operador posición, obtenemos que

$$\langle Q \rangle_{t-\tau} = \cos \omega_o \tau \langle Q \rangle_t - \frac{1}{m\omega_o} \sin \omega_o \tau \langle P \rangle_t, \quad (4.19)$$

la cual, al ser reemplazada en la ecuación (4.10), nos permite escribir que

$$m\langle \ddot{Q} \rangle + \nu \langle \dot{Q} \rangle + m(\omega_o^2 - \omega_r^2) \langle Q \rangle = 0, \quad (4.20)$$

donde hemos introducido los coeficientes

$$\nu = -\frac{2\lambda^2}{\hbar\omega_o} \int_0^\infty d\tau \sin(\omega_o\tau) \Im m\{\Phi(\tau)\}, \quad (4.21)$$

$$\omega_r^2 = -\frac{2\lambda^2}{\hbar m} \int_0^\infty d\tau \cos(\omega_o\tau) \Im m\{\Phi(\tau)\}. \quad (4.22)$$

La ecuación macroscópica (4.20) es análoga a la que rige la evolución de un oscilador clásico amortiguado, donde el coeficiente de fricción ν y el corrimiento ω_r en la frecuencia provienen, respectivamente, de las transformadas de Fourier seno y coseno del núcleo disipativo $\Im m\{\Phi(\tau)\}$.

Si γ^{-1} es el tiempo de respuesta del reservorio, la consistencia con el uso de la aproximación Markoviana (2.33) requiere que

$$\gamma \gg \omega_o . \quad (4.23)$$

Por otro lado, si suponemos que $\Im m\{\Phi(\tau)\} \propto e^{-\gamma\tau}$ y antitransformamos las expresiones (4.21) y (4.22), obtenemos que

$$\frac{\nu}{m} = \frac{\omega_r^2}{\gamma} \quad (4.24)$$

Por lo tanto, haciendo uso de (4.23), (4.24) y de la condición de positividad (4.15), concluimos que en este régimen deben cumplirse las desigualdades

$$\frac{\nu}{m} \ll \omega_r < \omega_o \ll \gamma . \quad (4.25)$$

Las soluciones de la ecuación (4.20) son

$$\langle Q \rangle_t = e^{-\frac{\nu}{2m}t} \{ \langle Q \rangle_o A_+(t) + \frac{1}{m\kappa} \sin(\kappa t) \langle P \rangle_o \} , \quad (4.26)$$

$$\langle P \rangle_t = e^{-\frac{\nu}{2m}t} \{ \langle P \rangle_o A_-(t) - \frac{m(\omega_o^2 - \omega_r^2)}{\kappa} \sin(\kappa t) \langle Q \rangle_o \} , \quad (4.27)$$

donde hemos definido las cantidades

$$A_{\pm} = \cos \kappa t \pm \frac{\nu}{2m\kappa} \sin \kappa t , \quad (4.28)$$

$$\kappa^2 = \omega_o^2 - \omega_r^2 - \left(\frac{\nu}{2m}\right)^2 . \quad (4.29)$$

Notemos que según (4.25) será $\kappa^2 > 0$, y en consecuencia el régimen del oscilador será subamortiguado.

Investigaremos a continuación la evolución del valor medio del operador posición en el régimen no Markoviano. Para ello, obtendremos las soluciones

$$\langle Q \rangle_t = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-\infty}^{c+\infty} ds e^{st} \langle \widetilde{Q} \rangle(s) , \quad c > 0 \quad (4.30)$$

de la ecuación (4.10), en términos de la transformada de Laplace

$$\langle \widetilde{Q} \rangle(s) = \int_0^\infty dt e^{-st} \langle Q \rangle_t \quad (4.31)$$

del valor medio del operador posición. De dicha ecuación se obtiene que

$$\langle \widetilde{Q} \rangle(s) = \frac{sm \langle Q \rangle_0 + \langle P \rangle_0}{s^2 m + s \hbar^2 \tilde{\mu}(s) + \Omega^2} , \quad (4.32)$$

donde $\tilde{\mu}(s)$ denota a la transformada de Laplace del núcleo disipativo $\mu(t)$.

Si queremos reobtener las soluciones para el caso Markoviano a través de (4.32), debemos proceder de la forma usual, reemplazando $\tilde{\mu}(s)$ por $\tilde{\mu}(0^+)$. Utilizando el hecho de que en este régimen la función $\mu(t)$ debe decaer en forma rápida, e integrando por partes las expresiones (4.21) y (4.22), pueden demostrarse las igualdades

$$\hbar^2 \tilde{\mu}(0^+) = \nu , \quad (4.33)$$

$$\omega_o^2 - \omega_r^2 = \Omega^2 . \quad (4.34)$$

En consecuencia, los polos s_\pm de (4.32) son iguales a las raíces de la ecuación característica cuadrática que surge de (4.20). Sin embargo, utilizando el teorema de los

residuos, obtenemos que

$$\langle Q \rangle_t = e^{-\frac{\nu}{2m}t} \{ \langle Q \rangle_0 A_-(t) + \frac{1}{m\kappa} \sin \kappa t \langle P \rangle_0 \} . \quad (4.35)$$

La aparente diferencia existente entre (4.26) y (4.35), que se origina al extender la integral temporal de la ecuación (4.10) hasta ∞ , se resuelve al observar que en este régimen se cumple que $A_+ \simeq A_-$ dado que, según (4.25), debe ser $(\nu/2m\kappa) \ll 1$.

Para poder hallar las soluciones en el caso no Markoviano, debemos encontrar los polos de la expresión (4.32). En este caso es necesario especificar la forma funcional de $\mu(t)$, o lo que es equivalente, la parte imaginaria de la función de correlación $\Phi(t)$ del reservorio. A tal fin utilizaremos la obtenida en la ecuación (3.9) para el modelo de reservorio bosónico en la situación de disipación Ohmica. En este caso, y según la relación (4.12), se cumple que

$$\tilde{\mu}(s) = \frac{\lambda^2 \gamma}{\hbar} \frac{1}{s + \gamma} , \quad (4.36)$$

$$\Omega^2 = \omega_0^2 - \frac{\lambda^2 \hbar \gamma}{m} , \quad (4.37)$$

de forma tal que la ecuación (4.32) será de la forma

$$\langle \widetilde{Q} \rangle(s) = \frac{(s \langle Q \rangle_0 + \frac{1}{m} \langle P \rangle_0)(s + \gamma)}{s^3 + \gamma s^2 + \omega_0^2 s + \gamma \Omega^2} . \quad (4.38)$$

Los polos de $\langle \widetilde{Q} \rangle(s)$, al ser las raíces de una ecuación cúbica, pueden hallarse en forma analítica [Abr65]. El discriminante de dicha ecuación cúbica, el cual puede escribirse como

$$D = \frac{\omega_0^6}{27} \left\{ 1 - \frac{1}{4} \left(\frac{\gamma}{\omega_0} \right)^2 + \left(\frac{\Omega}{\omega_0} \right)^2 \left(\frac{\gamma}{\omega_0} \right)^2 \left(\left(\frac{\gamma}{\omega_0} \right)^2 + \frac{27}{4} \left(\frac{\Omega}{\omega_0} \right)^2 - \frac{9}{2} \right) \right\} , \quad (4.39)$$

determina la forma de las raíces, y por lo tanto el tipo de comportamiento del oscilador. En los casos en que $D > 0$ (una raíz real y dos complejas conjugadas)

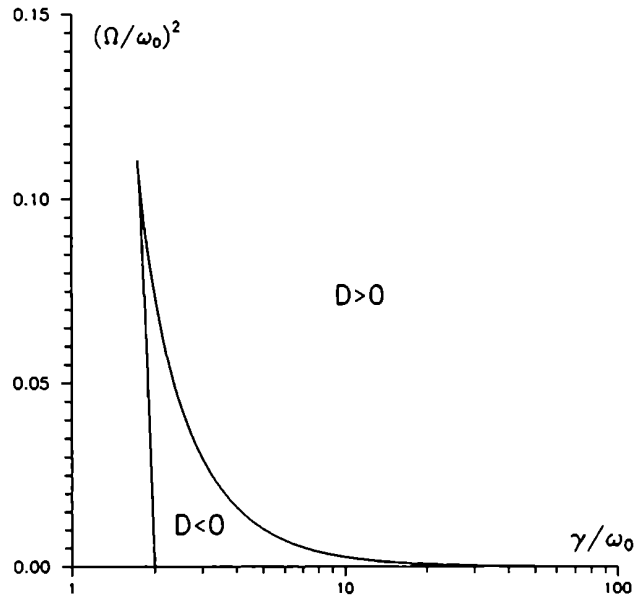


Figura 4.1: Diagrama de las regiones con $D > 0$ y $D < 0$. La curva sólida corresponde al caso de amortiguamiento crítico ($D = 0$)

el comportamiento será de tipo subamortiguado, cuando $D = 0$ (tres raíces reales, dos de las cuales son iguales) será amortiguado crítico, y de tipo sobreamortiguado cuando $D < 0$ (tres raíces reales y distintas).

En la figura 4.1 se exhiben dichas regiones en el espacio de parámetros γ/ω_0 y $(\Omega/\omega_0)^2$. Observamos que el régimen sobreamortiguado se halla restringido a una región pequeña de dicho espacio, lejos del régimen Markoviano ($\gamma \approx \omega_0$) y para acoplamientos fuertes ($\omega_r \approx \omega_0$).

En el caso sobreamortiguado, podemos escribir que

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_t = & \frac{1}{(s_1 - a)^2 + b^2} \left\{ e^{s_1 t} (s_1 + \gamma) (s_1 \langle Q \rangle_0 + \frac{\langle P \rangle_0}{m}) \right. \\ & + e^{at} \left(\langle Q \rangle_0 (a^2 + b^2 - 2as_1 - \gamma s_1) - \frac{\langle P \rangle_0}{m} (s_1 + \gamma) \right) \cos bt \\ & \left. + e^{at} (\langle Q \rangle_0 ((a + \gamma)(a^2 + b^2 - as_1) + s_1 b^2) \right. \end{aligned}$$

$$+ \frac{\langle P \rangle_0}{m} (a^2 + b^2 + \gamma(a - s_1) - a s_1) \left. \frac{\sin bt}{b} \right\} , \quad (4.40)$$

donde hemos puesto que $s_{2,3} = a \pm ib$. En el caso Markoviano se obtiene que $s_1 \approx -\gamma$, de forma tal que (4.40) es equivalente a (4.26).

Analizaremos a continuación el comportamiento temporal de los momentos de segundo orden $\langle Q^2 \rangle$, $\langle P^2 \rangle$ y $\langle \{QP\} \rangle$, donde $\{QP\}$ es el producto simetrizado de los operadores Q y P . Las ecuaciones de evolución para estos momentos se obtienen haciendo uso de la ecuación (4.4), y son

$$\langle \dot{Q}^2 \rangle_t = \frac{2}{m} \langle \{QP\} \rangle_t , \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \langle \dot{P}^2 \rangle_t &= -2m\omega_o^2 \langle \{QP\} \rangle_t + 2\lambda^2 \int_0^t d\tau \cos(\omega_o\tau) \Re e\{\Phi(\tau)\} \\ &\quad - \frac{4\lambda^2}{\hbar} \int_0^t d\tau \cos(\omega_o\tau) \Im m\{\Phi(\tau)\} \langle \{QP\} \rangle_{t-\tau} \\ &\quad + \frac{4\lambda^2}{\hbar} m\omega_o \int_0^t d\tau \sin(\omega_o\tau) \Im m\{\Phi(\tau)\} \langle Q^2 \rangle_{t-\tau} , \end{aligned} \quad (4.42)$$

$$\begin{aligned} \langle \dot{\{QP\}} \rangle_t &= \frac{\langle P^2 \rangle_t}{m} - m\omega_o^2 \langle Q^2 \rangle_t + \frac{\lambda^2}{m\omega_o} \int_0^t d\tau \sin(\omega_o\tau) \Re e\{\Phi(\tau)\} \\ &\quad - \frac{2\lambda^2}{\hbar} \int_0^t d\tau \cos(\omega_o\tau) \Im m\{\Phi(\tau)\} \langle Q^2 \rangle_{t-\tau} \\ &\quad - \frac{2\lambda^2}{m\hbar\omega_o} \int_0^t d\tau \sin(\omega_o\tau) \Im m\{\Phi(\tau)\} \langle \{QP\} \rangle_{t-\tau} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Para llevar estas ecuaciones al límite Markoviano, aplicamos la aproximación (2.35) a los valores medios que aparecen dentro de las integrales temporales, de forma tal que

$$\sin \omega_o\tau \langle Q^2 \rangle_{t-\tau} - \frac{\cos \omega_o\tau}{m\omega_o} \langle \{QP\} \rangle_{t-\tau} =$$

$$\frac{\sin \omega_0 \tau}{(m\omega_0)^2} \langle P^2 \rangle_t - \frac{\cos \omega_0 \tau}{m\omega_0} \langle \{QP\} \rangle_t , \quad (4.44)$$

$$\begin{aligned} \cos \omega_0 \tau \langle Q^2 \rangle_{t-\tau} + \frac{\sin \omega_0 \tau}{m\omega_0} \langle \{QP\} \rangle_{t-\tau} = \\ \cos \omega_0 \tau \langle Q^2 \rangle_t - \frac{\sin \omega_0 \tau}{m\omega_0} \langle \{QP\} \rangle_t . \end{aligned} \quad (4.45)$$

Por lo tanto, las ecuaciones (4.41) a (4.43) resultan ser en esta aproximación

$$\langle \dot{Q}^2 \rangle_t = \frac{2}{m} \langle \{QP\} \rangle_t , \quad (4.46)$$

$$\langle \dot{P}^2 \rangle_t = -2m\Omega^2 \langle \{QP\} \rangle_t - \frac{2\nu}{m} \langle P^2 \rangle_t + 2C , \quad (4.47)$$

$$\langle \{\dot{Q}P\} \rangle_t = \frac{\langle P^2 \rangle_t}{m} - m\Omega^2 \langle Q^2 \rangle_t - \frac{\nu}{m} \langle \{QP\} \rangle_t - \delta , \quad (4.48)$$

donde hemos introducido los coeficientes

$$C = \lambda^2 \int_0^\infty d\tau \cos(\omega_0 \tau) \Re\{\Phi(\tau)\} , \quad (4.49)$$

$$\delta = -\frac{\lambda^2}{m\omega_0} \int_0^\infty d\tau \sin(\omega_0 \tau) \Re\{\Phi(\tau)\} . \quad (4.50)$$

Las ecuaciones (4.46) a (4.48) son análogas a las que se obtienen en el caso clásico para un oscilador de frecuencia Ω excepto por la presencia del factor δ , el cual analizaremos mas adelante.

Como mencionamos anteriormente, las fluctuaciones y la disipación deben estar vinculadas para asegurar la equilibración térmica del sistema. Por lo tanto, es de esperar que el coeficiente C , que podemos identificar con la constante de difusión en analogía con el caso clásico, se halle relacionada con la constante de fricción ν . En el Apéndice A demostramos que se satisface la relación

$$C = \frac{\hbar\omega_0}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\right)\nu , \quad (4.51)$$

la cual, en el límite clásico adopta la forma usual

$$C = \nu k_B T . \quad (4.52)$$

Debemos remarcar que la expresión (4.51) es válida para cualquier clase de reservorio térmico, ya sea bosónico o fermiónico. La misma es equivalente al teorema de fluctuación-disipación y puede demostrarse a partir del mismo. Por lo tanto, es importante tener en cuenta dicha relación en caso de plantear ecuaciones fenomenológicas para sistemas mas complejos.

En la situación de equilibrio, y de acuerdo a las ecuaciones no Markovianas (4.41) a (4.43) y Markovianas (4.46) a (4.48), los valores medios de los observables analizados cumplen que

$$\langle Q \rangle_e = \langle P \rangle_e = 0 , \quad (4.53)$$

$$\frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle_e = \frac{C}{2\nu} , \quad (4.54)$$

$$\frac{m\omega_o^2}{2} \langle Q^2 \rangle_e = \frac{C}{2\nu} \left(\frac{\omega_o}{\Omega} \right)^2 \left(1 - \frac{\nu\delta}{C} \right) , \quad (4.55)$$

$$\langle \{QP\} \rangle_e = 0 . \quad (4.56)$$

Vemos entonces que la energía no se particiona de forma equivalente entre el momento y la posición. Este resultado ha sido obtenido previamente por distintos métodos para el caso de disipación Ohmica [Lin84, Ris85, Ha85]. En términos de la matriz densidad, esto significa que la densidad de equilibrio ρ_S^e posee elementos no diagonales reales del tipo $\rho_{N,N\pm 2}^e$ que son no nulos, dado que

$$\frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle_e = \frac{\hbar\omega_o}{2} \sum_{N \geq 0} \left\{ \left(N + \frac{1}{2} \right) \rho_{N,N}^e - \sqrt{(N+1)(N+2)} \Re \{ \rho_{N+2,N}^e \} \right\} \quad (4.57)$$

$$\frac{m\omega_o^2}{2} \langle Q^2 \rangle_e = \frac{\hbar\omega_o}{2} \sum_{N \geq 0} \left\{ (N + \frac{1}{2}) \rho_{N,N}^e + \sqrt{(N+1)(N+2)} \Re e \{ \rho_{N+2,N}^e \} \right\} \quad (4.58)$$

Asimismo, según las ecuaciones (4.54) y (4.55), la energía media del oscilador en equilibrio es

$$\langle H \rangle_e = \langle H \rangle_{can} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_o}{\Omega} \right)^2 \left(1 - \frac{\nu\delta}{C} \right) \right\}, \quad (4.59)$$

donde $\langle H \rangle_{can} = C/\nu$ es el valor medio que se obtiene en el caso en que la distribución de equilibrio corresponde a la distribución canónica del oscilador aislado a temperatura T .

En el caso en que el tiempo de respuesta del reservorio γ^{-1} sea preponderante frente a la vida media de las fluctuaciones térmicas del mismo, podremos escribir que $\Re e \{ \Phi(\tau) \} \propto e^{-\gamma\tau}$ y, realizando un análisis análogo al efectuado en la página 39 para ν y ω_r , podemos escribir que

$$\delta \approx -\frac{C}{m\gamma}. \quad (4.60)$$

Dado que en el caso Markoviano debe satisfacerse la desigualdad (4.25), concluimos que en este régimen debe cumplirse que

$$\left| \frac{\nu\delta}{C} \right| \ll 1, \quad (4.61)$$

y por lo tanto se obtiene que

$$\frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle_e = \frac{m\Omega^2}{2} \langle Q^2 \rangle_e = \frac{C}{2\nu}, \quad (4.62)$$

$$\langle H \rangle_e = \langle H \rangle_{can} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_r}{\Omega} \right)^2 \right]. \quad (4.63)$$

La desviación de la distribución de equilibrio respecto de la canónica, como así también la presencia de la frecuencia renormalizada Ω en vez de ω_o , en la partición

de la energía (4.62), es consecuencia directa de la interacción del oscilador con el reservorio. En la Ref.[Lin84] se ha demostrado que si se incluye la interacción en la distribución inicial del reservorio, la distribución de equilibrio sólo depende del Hamiltoniano del oscilador aislado. En este sentido, es interesante notar que podemos escribir que

$$\langle H \rangle_e - \langle H_c \rangle_e = \langle H \rangle_{can} , \quad (4.64)$$

donde H_c es el contratérmino (4.16), de forma tal que la energía asociada con los términos de acoplamiento se cancelan con la contribución de H_c .

Por otro lado, si la temperatura del reservorio es lo suficientemente baja como para que la función de correlación decaiga en un tiempo del orden de $\beta\hbar$ en vez de γ^{-1} , la relación (4.60) dejará de valer y por lo tanto la desviación de la distribución canónica se deberá a este efecto, en concordancia con lo hallado en las Refs.[Lin84, Ris85, Ha85] para la situación de reservorio bosónico.

Si calculamos la evolución temporal de los segundos momentos a través de las ecuaciones Markovianas (4.46), (4.47) y (4.48), hallamos que

$$\begin{aligned} \langle Q^2 \rangle_t &= \langle Q^2 \rangle_e + e^{-\frac{\kappa}{m}t} \{ A_+^2(t) (\langle Q^2 \rangle_o - \langle Q^2 \rangle_e) \\ &\quad + \left(\frac{1}{m\kappa}\right)^2 \sin^2(\kappa t) (\langle P^2 \rangle_o - \langle P^2 \rangle_e) \\ &\quad + 2\frac{1}{m\kappa} A_+(t) \sin(\kappa t) \langle \{QP\} \rangle_o \} , \end{aligned} \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} \langle P^2 \rangle_t &= \langle P^2 \rangle_e + e^{-\frac{\kappa}{m}t} \left\{ \left(\frac{m\Omega^2}{\kappa}\right)^2 \sin^2(\kappa t) (\langle Q^2 \rangle_o - \langle Q^2 \rangle_e) \right. \\ &\quad + A_-^2(t) (\langle P^2 \rangle_o - \langle P^2 \rangle_e) \\ &\quad \left. - 2\frac{m\Omega^2}{\kappa} A_-(t) \sin(\kappa t) \langle \{QP\} \rangle_o \right\} , \end{aligned} \quad (4.66)$$

$$\langle \{QP\} \rangle_t = e^{-\frac{\kappa}{m}t} \left\{ \frac{1}{m\kappa} A_-(t) \sin(\kappa t) (\langle P^2 \rangle_o - \langle P^2 \rangle_e) \right.$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{m\Omega^2}{\kappa} A_+(t) \sin(\kappa t) (\langle Q^2 \rangle_o - \langle Q^2 \rangle_e) \\
 & + (1 - 2\frac{\Omega^2}{\kappa} \sin^2(\kappa t)) \langle \{QP\} \rangle_o \} , \quad (4.67)
 \end{aligned}$$

donde los valores medios de equilibrio son los dados en (4.54) y (4.55). Debido a que en este régimen se cumplen las desigualdades (4.25), de las expresiones (4.65) y (4.66) podemos escribir que

$$\langle H(\Omega) \rangle_t = \langle H(\Omega) \rangle_e + e^{-\frac{\kappa}{m}t} \{ \langle H(\Omega) \rangle_o - \langle H(\Omega) \rangle_e \} , \quad (4.68)$$

donde $H(\Omega)$ es el Hamiltoniano renormalizado, lo cual se halla en concordancia con lo discutido anteriormente.

En el Apéndice C se realiza un análisis de los segundos momentos para el caso no Markoviano, el cual involucra la resolución de una ecuación de grado cinco.

Analizaremos a continuación la ecuación maestra generalizada que se obtiene en la situación de acoplamiento lineal. Especializando la ecuación Markoviana (2.34) para este caso y utilizando las definiciones (4.21), (4.22), (4.49) y (4.50), podemos escribir que

$$\begin{aligned}
 \rho_S(t) = & -\frac{i}{\hbar} [H_S, \rho_S(t)] + \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega_r^2}{2} [Q, [Q, \rho_S(t)]_+] \\
 & -\frac{i}{\hbar} \frac{\nu}{2m} [Q, [P, \rho_S(t)]_+] - \frac{C}{\hbar^2} [Q, [Q, \rho_S(t)]] - \frac{\delta}{\hbar^2} [Q, [P, \rho_S(t)]] . \quad (4.69)
 \end{aligned}$$

Nótese que agrupando el primer y segundo término del miembro derecho de la igualdad se obtiene el término

$$\frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2m} P^2 + \frac{m\Omega^2}{2} Q^2 +, \rho_S(t) \right] \quad (4.70)$$

que involucra al Hamiltoniano renormalizado.

La ecuación maestra generalizada (4.69), escrita en término de los operadores de creación y destrucción Γ^\dagger y Γ del oscilador, toma la forma

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_S + i(\omega_o - \frac{\omega_r^2}{2\omega_o})[\Gamma^\dagger \Gamma, \rho_S] = & \\
& -\frac{1}{2m\hbar\omega_o}(C - \frac{\hbar\omega_o}{2}\nu)(\Gamma\Gamma^\dagger\rho_S - 2\Gamma^\dagger\rho_S\Gamma + \rho_S\Gamma\Gamma^\dagger) \\
& -\frac{1}{2m\hbar\omega_o}(C + \frac{\hbar\omega_o}{2}\nu)(\Gamma^\dagger\Gamma\rho_S - 2\Gamma\rho_S\Gamma^\dagger + \rho_S\Gamma^\dagger\Gamma) \\
& +\frac{1}{2m\hbar\omega_o}(C - \frac{\hbar\omega_o}{2}\nu)([\Gamma, \rho_S]\Gamma - \Gamma^\dagger[\Gamma^\dagger, \rho_S]) \\
& +\frac{1}{2m\hbar\omega_o}(C + \frac{\hbar\omega_o}{2}\nu)([\Gamma^\dagger, \rho_S]\Gamma^\dagger - \dot{\Gamma}[\Gamma, \rho_S]) \\
& +\frac{i}{2\hbar\omega_o}(\frac{\hbar\omega_r^2}{2} + \omega_o\delta)(\Gamma[\Gamma, \rho_S] + [\Gamma^\dagger, \rho_S]\Gamma^\dagger) \\
& +\frac{i}{2\hbar\omega_o}(\frac{\hbar\omega_r^2}{2} - \omega_o\delta)(\Gamma^\dagger[\Gamma^\dagger, \rho_S] + [\Gamma, \rho_S]\Gamma) , \tag{4.71}
\end{aligned}$$

Observemos que el parámetro δ sólo aparece en aquellos términos que contienen un número par de operadores de creación o destrucción de modo tal que podemos asociarlo a la presencia de procesos microscópicos inelásticos en el sentido que no conservan el número de cuantos del oscilador.

Como mencionamos al inicio de la presente sección, en la literatura se encuentra que en todos los cálculos efectuados utilizando ecuaciones maestras generalizadas se implementa la aproximación de onda rotante, ya sea sobre el Hamiltoniano de interacción o sobre la ecuación maestra obtenida. Esto último significa despreciar los términos de tipo inelástico de la ecuación (4.71), quedándonos solamente con los dos primeros términos de la misma. En este caso, si pasamos nuevamente a la representación en coordenada y momento, obtenemos que

$$\dot{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar}(1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_o^2})[H_S, \rho_S(t)]$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{i}{\hbar} \frac{\nu}{4m} ([Q, [P, \rho_S(t)]_+] - [P, [Q, \rho_S(t)]_+]) \\
 & -\frac{C}{2\hbar^2} ([Q, [Q, \rho_S(t)]] + \frac{1}{(m\omega_0)^2} [P, [P, \rho_S(t)]]) , \quad (4.72)
 \end{aligned}$$

donde los operadores P y Q aparecen de forma simétrica.

Si calculamos a partir de esta ecuación la evolución de los valores medios de los primeros momentos, vemos que estos satisfacen las ecuaciones

$$m \langle \dot{Q} \rangle_t = -\frac{\nu}{2} \langle Q \rangle_t + (1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_0^2}) \langle P \rangle_t , \quad (4.73)$$

$$\langle \dot{P} \rangle_t = -\frac{\nu}{2m} \langle P \rangle_t - m\omega_0^2 (1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_0^2}) \langle Q \rangle_t , \quad (4.74)$$

de modo tal que

$$m \langle \ddot{Q} \rangle_t + \nu \langle \dot{Q} \rangle_t + m[\omega_0^2 (1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_0^2}) + (\frac{\nu}{2m})^2] \langle Q \rangle_t = 0 . \quad (4.75)$$

Por lo tanto, en esta aproximación el momento no será proporcional a la velocidad y además el coeficiente de fricción aparecerá dentro del potencial efectivo.

Sin embargo, notemos que la ecuación (4.69) correspondiente al caso de acoplamiento completo puede escribirse, haciendo uso de la representación espectral (2.37), como una función del tipo

$$\dot{\rho}_{N,M} = f(\overbrace{\rho_{N,M}; \rho_{N-1,M-1}; \rho_{N+1,M+1}; \rho_{N\pm 2,M}; \rho_{N,M\pm 2}; \rho_{N\pm 1,M\mp 1}}^{AOR}) , \quad (4.76)$$

mientras que al implementar la aproximación de onda rotante se retienen sólo los términos indicados bajo el corchete . En consecuencia, mientras que la ecuación (4.69), o equivalentemente la (4.71), es válida para todo tiempo mayor que el de decaimiento de las correlaciones del reservorio, la ecuación (4.72) como aproximación de la (4.69) es estrictamente válida en el caso en que la densidad $\rho_S(t)$ sea diagonal,

o lo que es equivalente, en un régimen cercano al equilibrio (*límite asintótico*). Sin embargo, en este régimen se cumple que los valores medios $\langle Q \rangle$ y $\langle P \rangle$ son idénticamente nulos y por lo tanto, las ecuaciones (4.11) y (4.75) dejan de tener sentido. Esta es una de las diferencias más notables entre los trabajos realizados vía el operador densidad reducido y los efectuados a partir de la ecuación de Langevin. En este último caso, la obtención de la ecuación (4.11) es inmediata dada la estructura del método, mientras que utilizando la técnica de proyección se debe tener en cuenta el no despreciar estos términos.

Al utilizar la representación espectral (2.38) en la ecuación (4.71), o análogamente en la obtenida a través de la aproximación de onda rotante, hallamos que los elementos diagonales de la matriz densidad reducida satisfacen la ecuación maestra

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_N &= W^+((N+1)\rho_{N+1} - N\rho_N) \\ &+ W^-(N\rho_{N-1} - (N+1)\rho_N), \end{aligned} \quad (4.77)$$

donde

$$W^+ = \frac{1}{m\hbar\omega_0} \left(C + \frac{\hbar\omega_0}{2} \nu \right), \quad (4.78)$$

$$W^- = \frac{1}{m\hbar\omega_0} \left(C - \frac{\hbar\omega_0}{2} \nu \right), \quad (4.79)$$

son las tasas de transición microscópicas asociadas, respectivamente, a los procesos microscópicos de decaimiento (destrucción de un cuanto del oscilador) y de reexcitación (creación de un cuanto del oscilador).

Es interesante destacar que según estas expresiones podemos escribir que

$$C = m \frac{\hbar\omega_0}{2} (W^+ + W^-), \quad (4.80)$$

$$\frac{\nu}{m} = (W^+ - W^-), \quad (4.81)$$

y por lo tanto, es posible entender al fenómeno de difusión como proveniente de la suma de los procesos de decaimiento y reexcitación, mientras que la disipación estará asociada a la competencia entre ambos tipos de procesos.

A partir de las ecuaciones (A.6) y (A.7) del Apéndice A, las tasas de transición pueden escribirse en función del espectro de la función de correlación del reservorio como

$$W^+ = \frac{\lambda^2 \pi}{m \hbar \omega_0} \Phi[\omega_0] e^{\beta \hbar \omega_0} , \quad (4.82)$$

$$W^- = \frac{\lambda^2 \pi}{m \hbar \omega_0} \Phi[\omega_0] , \quad (4.83)$$

de modo tal que las mismas satisfacen la relación

$$\frac{W^-}{W^+} = e^{-\beta \hbar \omega_0} , \quad (4.84)$$

en concordancia con la condición de balance detallado (2.48).

En el caso de reservorio bosónico y disipación Ohmica, las mismas adoptan la forma

$$W^+ = \frac{\lambda^2 \hbar}{m} (n(\omega_0) + 1) , \quad (4.85)$$

$$W^- = \frac{\lambda^2 \hbar}{m} n(\omega_0) , \quad (4.86)$$

donde $n(\omega_0)$ es el valor medio de ocupación del oscilador en equilibrio.

La ecuación maestra (4.77) es un ecuación maestra arquetípica, correspondiente a un *proceso lineal de un paso* [vKa81], la cual describe un proceso Markoviano continuo en el tiempo, cuyo rango consite de enteros $N = 0, 1, 2, \dots$, de forma tal que sólo están permitidas las transiciones entre estados adyacentes del sistema, siendo en este caso los niveles del espectro del oscilador.

Podemos hallar su solución de equilibrio teniendo en cuenta que en la situación

estacionaria, la ecuación maestra (4.77) puede escribirse como

$$(\mathbf{E} - 1)[W^+ N \rho_N^e - \mathbf{E}^{-1} W^-(N + 1) \rho_N^e] = 0 . \quad (4.87)$$

donde \mathbf{E} es el operador definido como [vKa81]

$$\mathbf{E}f(N) = f(N + 1) . \quad (4.88)$$

Por lo tanto, para que se satisfaga dicha relación , el término entre corchetes debe ser independiente de N , o sea

$$N(W^+ \rho_N^e - W^- \rho_{N-1}^e) = -J = cte \quad \forall N , \quad (4.89)$$

donde J denota al flujo neto de probabilidad del estado N al $N - 1$. En consecuencia

$$\rho_N^e = \frac{W^-}{W^+} \rho_{N-1}^e , \quad (4.90)$$

pues J debe ser 0, y por lo tanto la distribución de equilibrio será

$$\rho_N^e = \left(\frac{W^-}{W^+}\right)^N \left[1 - \left(\frac{W^-}{W^+}\right)\right] \quad (4.91)$$

donde hemos utilizado la condición de normalización $Tr_S \rho_S = 1$.

De acuerdo a la relación (4.84), vemos entonces que la distribución (4.91) corresponde a la distribución canónica del oscilador aislado. Esto se debe a que para escribir la ecuación maestra (4.77) hemos supuesto que la distribución asintótica es diagonal, lo cual es estrictamente cierto en el caso de acoplamiento tendiendo a cero, en cuyo caso será $\Omega = \omega_0$.

La evolución temporal de la matriz densidad asintótica $\rho_S(t)$, dada por la ecuación

maestra (4.77), puede determinarse haciendo una expansión del tipo

$$\rho_S(t) = \sum_l c_l V^l e^{-\lambda_l t} \quad (4.92)$$

en término de las autofunciones V^l y autovalores λ_l de la matriz de transición M que surge al plantear el sistema de ecuaciones (4.77) en forma matricial, esto es

$$\dot{\rho}_S = M\rho_S \quad (4.93)$$

donde M es una matriz tridiagonal infinita y no hermítica.

En la Ref.[Ca88b] se ha determinado la solución de esta ecuación utilizando la función característica

$$\Psi(z, t) = \sum_{N \geq 0} z^N \rho_N, \quad (4.94)$$

la cual, según (4.77), satisface la ecuación diferencial de primer grado

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(z, t) = (1 - z) \frac{\partial}{\partial z} [(W^+ - zW^-) \Psi(z, t)]. \quad (4.95)$$

Los autovalores del problema espectral asociado resultan ser

$$\lambda_k = k(W^+ - W^-) \quad ; \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.96)$$

de modo tal que, según (4.81), son de la forma $\lambda_k = k(\nu/m)$.

Antes de finalizar esta sección mencionaremos que en el Apéndice B hemos evaluado los coeficientes C , ν , ω_r y δ para la situación de reservorio bosónico y disipación Ohmica.

4.3 Acoplamiento cuadrático

La característica común de la mayoría de los modelos de movimiento armónico cuántico [Fo65, Ul66, Ha73, Lin81, Ris85, Ta90] reside en la estructura del acoplamiento disipativo, el cual es una función lineal de la coordenada (y/o momento) del oscilador. Este tipo de acoplamiento, como hemos visto en la sección anterior, solamente da lugar a transiciones entre estados que son primeros vecinos entre sí del espectro del oscilador, de forma tal que la ecuación maestra (4.77) que describe la evolución temporal de las probabilidades de ocupación es del tipo lineal de un paso y puede ser resuelta analíticamente en el régimen Markoviano. Por lo tanto, será de interés investigar el caso en que las transiciones sean del tipo multibosónicas, o en otras palabras, interacciones no lineales entre la coordenada armónica y el entorno macroscópico. Un ejemplo típico, proveniente de la óptica cuántica, es el modelo de absorción y emisión de dos fotones de un campo unimodal dentro de una cavidad [Ch77, Dr81]. A tal fin, consideraremos a continuación un Hamiltoniano del tipo (4.1), siendo la interacción cuadrática en las coordenadas del oscilador, o sea

$$f_{AC}(Q) = \eta Q^2, \quad (4.97)$$

donde η es una constante cuya dimensión es la inversa de una longitud, de modo tal $f_{AL}(Q)$ y $f_{AC}(Q)$ posean las mismas dimensiones. En lo que sigue de esta sección utilizaremos $\eta = 1$.

Utilizando una metodología análoga a la empleada en la sección anterior, la ecuación de evolución para el valor medio de la posición del oscilador que se obtiene es

$$\begin{aligned} m \langle \ddot{Q} \rangle_t &= -m\omega_o^2 \langle Q \rangle_t + \frac{4\lambda^2}{m\omega_o} \int_0^t d\tau \sin(\omega_o\tau) \Re\{\Phi(\tau)\} \langle Q \rangle_{t-\tau} \\ &\quad - \frac{4\lambda^2}{\hbar} \int_0^t d\tau \cos(\omega_o\tau) \Im\{\Phi(\tau)\} \langle Q^3 \rangle_{t-\tau} \\ &\quad - \frac{4\lambda^2}{m\hbar\omega_o} \int_0^t d\tau \sin(\omega_o\tau) \Im\{\Phi(\tau)\} \langle \{PQ^2\} \rangle_{t-\tau} \end{aligned} \quad (4.98)$$

Notemos que, contrariamente a la situación en que el acoplamiento es lineal en las coordenadas del oscilador, en esta ecuación de evolución se introduce la temperatura del reservorio a través del término integral que contiene a $\Re e\{\Phi(\tau)\}$.

Con el fin de obtener una visión más clara de los términos involucrados en la ecuación (4.98), hallaremos el límite Markoviano de la misma. Haciendo uso de la aproximación (2.35) puede verse que

$$\begin{aligned} \cos(\omega_o\tau) \langle Q^3 \rangle_{t-\tau} + \frac{\sin(\omega_o\tau)}{m\omega_o} \langle \{PQ^2\} \rangle_{t-\tau} = \\ \cos^2(\omega_o\tau) \langle Q^3 \rangle_t - \frac{\sin(2\omega_o\tau)}{m\omega_o} \langle \{PQ^2\} \rangle_t \\ + \frac{\sin^2(\omega_o\tau)}{m^2\omega_o^2} \langle \{P^2Q\} \rangle_t , \end{aligned} \quad (4.99)$$

la cual, junto con la expresión (4.19), nos permite escribir la ecuación de evolución (4.98) como

$$\begin{aligned} m\langle \ddot{Q} \rangle_t = & -(m\omega_o^2 + \frac{2\lambda^2}{m\omega_o} \int_0^\infty d\tau \sin(2\omega_o\tau) \Re e\{\Phi(\tau)\}) \langle Q \rangle_t \\ & - \frac{4\lambda^2}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \cos^2(\omega_o\tau) \Im m\{\Phi(\tau)\} \langle Q^3 \rangle_t \\ & - \frac{4\lambda^2}{m\omega_o^2} \int_0^\infty d\tau \sin^2(\omega_o\tau) \Re e\{\Phi(\tau)\} \langle \dot{Q} \rangle_t \\ & + \frac{4\lambda^2}{\hbar\omega_o} \int_0^\infty d\tau \sin(2\omega_o\tau) \Im m\{\Phi(\tau)\} \langle \dot{Q}Q^2 \rangle_t \\ & - \frac{4\lambda^2}{\hbar\omega_o^2} \int_0^\infty d\tau (\sin^2(\omega_o\tau) \Im m\{\Phi(\tau)\} \langle \dot{Q}^2Q \rangle_t , \end{aligned} \quad (4.100)$$

donde hemos usado el hecho que $m\dot{Q} = P$.

En el Apéndice A evaluamos las integrales intervinientes en esta ecuación en función de las coeficientes intervinientes en el caso lineal. De este modo, podemos

reescribir la ecuación (4.100) como

$$m\langle \ddot{Q} \rangle_t = -(m\omega_o^2 + 4\delta_c) \langle Q \rangle_t + 2m\omega_r^2 \langle Q^3 \rangle_t - 4\nu \langle \{Q^2 \dot{Q}\} \rangle_t + \frac{2}{m\omega_o^2} (C_c - \alpha) \langle \dot{Q} \rangle_t , \quad (4.101)$$

donde hemos introducido las expresiones

$$C_c = C(2\omega_o) , \quad (4.102)$$

$$\delta_c = \delta(2\omega_o) , \quad (4.103)$$

$$\alpha = \lambda^2 \int_0^\infty d\tau \Re\{\Phi(\tau)\} , \quad (4.104)$$

y los coeficientes ω_r , ν , C y δ son las definidas en las ecuaciones (4.22), (4.21), (4.49) y (4.50) respectivamente. Asimismo, puede verse que la constante de difusión C_c satisface la relación

$$C_c = \hbar\omega_o \coth(\beta\hbar\omega_o)\nu , \quad (4.105)$$

de forma tal que en el límite clásico coincide con hallada en la situación de acoplamiento lineal, satisfaciendo la relación (4.52).

Si comparamos la ecuación de evolución (4.101) con la correspondiente a la situación de acoplamiento lineal (4.20), observamos que

- En el caso lineal la interacción con el reservorio produce una renormalización del potencial original dado por un corrimiento de la frecuencia natural del oscilador (ver ec.(4.14)), mientras que en este caso, además de aparecer un corrimiento en la frecuencia que depende de la temperatura, se introduce un término cúbico de fuerzas que modifica la estructura del potencial, de manera tal que el potencial efectivo es ahora

$$V_{ef}^{AC}(Q) = \left(\frac{m\omega_o^2}{2} + 2\delta_c\right)Q^2 - \frac{m\omega_r^2}{2}Q^4 . \quad (4.106)$$

- En este caso, el término disipativo se desdobra en dos contribuciones, una que es lineal en las coordenadas del oscilador, que depende de la temperatura del reservorio y que se anula en el límite clásico, y otra que es no lineal (cúbica) en las coordenadas del oscilador, de modo tal que la constante de fricción efectiva correspondiente a este término será dependiente de la posición del oscilador.
- Contrariamente al caso lineal, la ecuación de evolución (4.101) no es resoluble analíticamente, ya que la misma incluye a los momentos de orden superior $\langle Q^3 \rangle$ y $\langle \{Q^2 P\} \rangle$, y a su vez, las ecuaciones de evolución para estos momentos incluyen momentos de orden superior. Por lo tanto, se obtiene una jerarquía que no puede truncarse de forma obvia. Esto será analizado en más detalle al utilizar la ecuación maestra asintótica.

Si abordamos el problema correspondiente al caso de acoplamiento cuadrático partiendo de la ecuación de Langevin cuántica (2.54), arribamos a la ecuación

$$m\ddot{Q}(t) = -m\omega_0^2 Q(t) + 2\hbar^2 K(0)Q^3(t) - 2\hbar^2 K(t)Q(t)Q^2(0) - 4\hbar^2 \int_0^t d\tau K(t-\tau)Q(t)Q(\tau)\dot{Q}(\tau) - 2\hbar Q(t)F(t) , \quad (4.107)$$

donde $K(t)$ y $F(t)$ son las cantidades definidas en (2.55) y (2.56).

La característica mas saliente de esta ecuación es la presencia del término fluctuante multiplicativo $2\hbar Q(t)F(t)$, el cual nos dice que las fluctuaciones dependerán del estado del sistema. Este término puede ser interpretado como una contribución fluctuante a la frecuencia ω_0 del oscilador. Notemos que en el potencial efectivo (4.106) se introduce una renormalización en la frecuencia dada por la coeficiente δ_c que, justamente, está relacionada con las fluctuaciones según puede verse de las expresiones (4.50) y (3.5). Este *ruido interno multiplicativo*, en contraste al externo que aparece al aplicar una fuerza aleatoria al sistema, es inherente al mecanismo por el cual el sistema evoluciona, y en consecuencia no puede ser excluido de las ecuaciones de movimiento. En este sentido, puede hallarse en la Ref.[vKa81] una interesante discusión acerca de los problemas que pueden surgir al escribir ecuaciones

de Langevin fenomenológicas con ruido interno.

Recordemos que la ecuación (4.107) debe ser totalmente simetrizada para su interpretación correcta. En el límite clásico esto no es necesario, y la misma coincide con la hallada en la Ref.[Lin81] para el sistema clásico.

Si realizamos la aproximación Markoviana en la ecuación de Langevin (4.107) y tomamos valor medio utilizando la expresión (4.18) obtenemos que

$$\begin{aligned}
 m\langle \ddot{Q} \rangle &= -m\omega_0^2 \langle Q \rangle + 2m\omega_r^2 \langle Q^3 \rangle \\
 -4\nu \langle \{Q^2 \dot{Q}\} \rangle &= -2\hbar \langle \{QF\} \rangle ,
 \end{aligned}
 \tag{4.108}$$

donde hemos despreciado el término $K(t)Q(t)Q^2(0)$ debido a que el mismo decae en forma rápida. Si bien esta ecuación debe ser equivalente a la (4.101) dentro de los límites de validez de cada tratamiento, esto es complicado de demostrar debido a la presencia del término fluctuante multiplicativo, ya que debemos explicitar la forma de $\langle \{Q(t)F(t)\} \rangle$ y para ello necesitaríamos conocer $Q(t)$. Sin embargo, podemos ver que este término será el proporcional a δ en (4.101), ya que es el que incluye a las fluctuaciones (ver ecs.(4.50) y (3.5)).

La ecuación maestra generalizada Markoviana (2.34) para la situación de acoplamiento cuadrático se escribe en este caso como

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_S(t) &= -\frac{i}{\hbar}[H, \rho_S(t)] + \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega_r^2}{2}[Q^2, [Q^2, \rho_S(t)]_+] \\
 &\quad - \frac{2}{\hbar^2} \delta_c[Q^2, [\{QP\}, \rho_S(t)]] - \frac{i}{\hbar} \frac{\nu}{m}[Q^2, [\{QP\}, \rho_S(t)]_+] \\
 &\quad - \frac{1}{2\hbar^2}(\alpha + C_c)[Q^2, [Q^2, \rho_S(t)]] \\
 &\quad - \frac{1}{2\hbar^2 m^2 \omega_0^2}(\alpha - C_c)[Q^2, [P^2, \rho_S(t)]] ,
 \end{aligned}
 \tag{4.109}$$

la cual, análogamente al caso lineal, puede escribirse en términos de operadores

de creación y destrucción del oscilador. Sin embargo, debido a la proliferación de términos intervinientes, sólo especificaremos aquellos que sobreviven al implementar la aproximación de onda rotante. Esta es

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_S(t) = & -i(\omega_o - \frac{3}{4} \frac{\hbar\omega_r^2}{m\omega_o^2} + 2\frac{\delta_c}{m\omega_o})[\Gamma^\dagger\Gamma, \rho_S] + i\frac{3}{4} \frac{\hbar\omega_r^2}{m\omega_o^2}[\Gamma^\dagger^2\Gamma^2, \rho_S] \\
 & - \frac{1}{4m^2\omega_o^2}(C_c - \hbar\omega_o\nu)(\Gamma^2\Gamma^\dagger^2\rho_S - 2\Gamma^\dagger^2\rho_S\Gamma^2 + \rho_S\Gamma^2\Gamma^\dagger^2) \\
 & - \frac{1}{4m^2\omega_o^2}(C_c + \hbar\omega_o\nu)(\Gamma^\dagger^2\Gamma^2\rho_S - 2\Gamma^2\rho_S\Gamma^\dagger^2 + \rho_S\Gamma^\dagger^2\Gamma^2) \\
 & - \frac{\alpha}{m^2\omega_o^2}((\Gamma^\dagger\Gamma)^2\rho_S - 2\Gamma^\dagger\Gamma\rho_S\Gamma^\dagger\Gamma + \rho_S(\Gamma^\dagger\Gamma)^2) , \quad (4.110)
 \end{aligned}$$

cuyos términos reflejan el hecho de que con este acoplamiento los procesos microscópicos involucrados corresponden a la creación y destrucción simultánea de dos cuantos del oscilador. Esta ecuación escrita en términos de la coordenada y momento del oscilador toma la forma

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_S(t) = & -\frac{i}{\hbar}(1 - \frac{3}{4} \frac{\hbar\omega_r^2}{m\omega_o^2} + 2\frac{\delta_c}{m\omega_o^2})[H, \rho_S(t)] + \frac{i}{\hbar} \frac{3}{4} \frac{m\omega_r^2}{2}[H^2, \rho_S(t)] \\
 & - \frac{C_c}{8\hbar^2} \left([Q^2, [Q^2, \rho_S(t)]] + \frac{1}{(m\omega_o)^4} [P^2, [P^2, \rho_S(t)]] \right. \\
 & \left. - \frac{1}{(m\omega_o)^2} ([Q^2, [P^2, \rho_S(t)]] + [P^2, [Q^2, \rho_S(t)]] - 4[\{QP\}, \{ \{QP\}, \rho_S(t) \}]) \right) \\
 & - \frac{i}{\hbar} \frac{\nu}{4m} (([Q^2, \{ \{QP\}, \rho_S(t) \}_+] - [\{QP\}, [Q^2, \rho_S(t) \}_+]) \\
 & + \frac{1}{(m\omega_o)^2} ([\{QP\}, [P^2, \rho_S(t) \}_+] - [P^2, \{ \{QP\}, \rho_S(t) \}_+])) \\
 & - \frac{\alpha}{(m\hbar\omega_o^2)^2} [H, [H, \rho_S(t)]] \quad (4.111)
 \end{aligned}$$

en la cual, contrariamente a la (4.109), los operadores Q y P juegan un rol similar.

Si utilizamos la representación en la base de Fock de la ecuación (4.110) , obtenemos la siguiente ecuación maestra asintótica

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_N = & W_c^+((N+1)(N+2)\rho_{N+2} - N(N-1)\rho_N) \\ & + W_c^-(N(N-1)\rho_{N-2} - (N+1)(N+2)\rho_N) , \end{aligned} \quad (4.112)$$

donde las tasas de transición asociadas a la destrucción (decaimiento) y creación (reexcitación) simultánea de dos cuantos del oscilador son, respectivamente,

$$W_c^+ = \frac{1}{2m^2\omega_o^2}(C_c + \hbar\omega_o\nu) , \quad (4.113)$$

$$W_c^- = \frac{1}{2m^2\omega_o^2}(C_c - \hbar\omega_o\nu) . \quad (4.114)$$

Las mismas pueden escribirse como

$$W^+ = \frac{\lambda^2\pi}{2m^2\omega_o^2}\Phi[2\omega_o]e^{2\beta\hbar\omega_o} , \quad (4.115)$$

$$W^- = \frac{\lambda^2\pi}{2m^2\omega_o^2}\Phi[2\omega_o] , \quad (4.116)$$

de modo tal que satisfacen la relación

$$\frac{W_c^-}{W_c^+} = \exp(-2\beta\hbar\omega_o) = \left(\frac{W_l^-}{W_l^+}\right)^2 , \quad (4.117)$$

donde W_l^\pm son las tasas de transición (4.78) y (4.79) correspondientes al caso lineal.

En el caso de reservorio bosónico y disipación Ohmica, dichas tasas de transición pueden escribirse como

$$W^+ = \frac{\lambda^2\hbar^2}{m^2\omega_o}(n(2\omega_o) + 1) , \quad (4.118)$$

$$W^- = \frac{\lambda^2 \hbar^2}{m^2 \omega_o} n(2\omega_o) . \quad (4.119)$$

La ecuación maestra asintótica (4.112) es del tipo de un paso, pero ahora las transiciones son sólo entre segundos vecinos y están regidas por probabilidades de transición que son no lineales (cuadráticas) en el número de ocupación N del oscilador. Esta ecuación maestra puede ponerse en forma matricial como

$$\dot{\rho}_S = \mathbf{M}_c \rho_S , \quad (4.120)$$

donde \mathbf{M}_c es ahora una matriz pentadiagonal infinita, no hermítica, y que satisface la condición

$$(\mathbf{M}_c)_{N, N \pm 1} = 0 . \quad (4.121)$$

Por lo tanto, mediante una permutación de columnas, podemos llevar la ecuación matricial a la forma

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_p \\ \dot{\rho}_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & 0 \\ 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_p \\ \rho_i \end{pmatrix} , \quad (4.122)$$

donde \mathbf{P} e \mathbf{I} son matrices tridiagonales y denotan a las matrices de transición que surgen al considerar por separado la evolución de los elementos diagonales de ρ_S con subíndice par (ρ_p) e impar (ρ_i) respectivamente. La matriz interviniente en la ecuación (4.122) se dice que es del tipo *completamente reducible* [vKa81] e indica la presencia de dos subsistemas entre los cuales no existen transiciones. Esto se debe a que, como mencionamos anteriormente, la interacción sólo permite transiciones entre segundos vecinos.

Analizaremos a continuación la solución de equilibrio de la ecuación maestra (4.112), o lo que es equivalente, hallaremos los autovectores de la matriz de (4.122) con autovalores nulos. En este caso existirán dos de tales autovectores ρ_p^e y ρ_i^e , de

forma tal que la solución estacionaria general será de la forma

$$\rho_S^e = \alpha_p \rho_p^e + \alpha_i \rho_i^e , \quad (4.123)$$

donde las constantes α_p y α_i satisfacen la relación

$$\alpha_p + \alpha_i = 1 , \quad \alpha_{p,i} \geq 0 . \quad (4.124)$$

Analogamente al caso lineal, en la situación estacionaria podemos escribir la ecuación maestra (4.112) como

$$(\mathbf{E}^2 - 1)[W_c^+ N(N-1)\rho_N^e - \mathbf{E}^{-2}W_c^-(N+1)(N+2)\rho_N^e] = 0 , \quad (4.125)$$

y en este caso debe cumplirse que

$$N(N-1)(W_c^+ \rho_N^e - W_c^- \rho_{N-2}^e) = -J_c = cte , \quad \forall N , \quad (4.126)$$

donde J denota al flujo neto de probabilidad del estado N al $N-2$. En consecuencia, será

$$\rho_N^e = \frac{W_c^-}{W_c^+} \rho_{N-2}^e , \quad (4.127)$$

y por lo tanto

$$\rho_{2N}^e = \left(\frac{W_c^-}{W_c^+}\right)^N \rho_0^e , \quad (4.128)$$

$$\rho_{2N+1}^e = \left(\frac{W_c^-}{W_c^+}\right)^N \rho_1^e . \quad (4.129)$$

Utilizando la expresión (4.117), vemos entonces que para cada uno de los subsistemas definidos anteriormente se cumple que la solución estacionaria es la distribución canónica normalizada según la relación (4.123).

Si bien hemos podido hallar analíticamente la solución de equilibrio de la ecuación maestra no lineal (4.112), no sucede lo mismo con su solución temporal completa debido a que los métodos tradicionales para resolver este tipo de ecuaciones [Hak77, He84, vKa81, Ca88b] no se aplican en este caso. En este sentido, la función característica (4.94) satisface en este caso la ecuación diferencial de segundo grado

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(z, t) = (1 - z^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} [(W_c^+ - z^2 W_c^-) \Psi(z, t)] , \quad (4.130)$$

que no es resoluble analíticamente. Asimismo, las ecuaciones para los momentos de orden p

$$\langle N^p \rangle = \sum N^p \rho_N , \quad (4.131)$$

pueden hallarse a través de la ecuación (4.112), siendo estas

$$\begin{aligned} \langle \dot{N}^p \rangle &= \sum_{k=1}^p 2^k \binom{p}{k} \{ \langle N^{p-k+2} \rangle (W_c^- + (-1)^k W_c^+) \\ &+ \langle N^{p-k+1} \rangle (3W_c^- + (-1)^{k+1} W_c^+) + \langle N^{p-k} \rangle \} \end{aligned} \quad (4.132)$$

Esta ecuación define una jerarquía infinita acoplada para los momentos, donde la derivada temporal $\langle \dot{N}^p \rangle$ depende de los momentos $\langle N^{p+1} \rangle$, $\langle N^p \rangle$..., $\langle N \rangle$. Por ejemplo, la evolución temporal de el momento de primer orden, el cual es proporcional al valor medio de la energía, satisface que

$$\langle \dot{N} \rangle = 2(W_c^- - W_c^+) \langle N^2 \rangle + 2(3W_c^- + W_c^+) \langle N \rangle + 4W_c^- , \quad (4.133)$$

de donde sólo puede obtenerse el valor de $\langle N^2 \rangle_e$ en función de $\langle N \rangle_e$. Notemos que esta solución dependerá de las condiciones iniciales a través de las constantes de normalización α_p y α_i , ya que

$$\alpha_p = \sum_{N \geq 0} \rho_{2N}(0) , \quad (4.134)$$

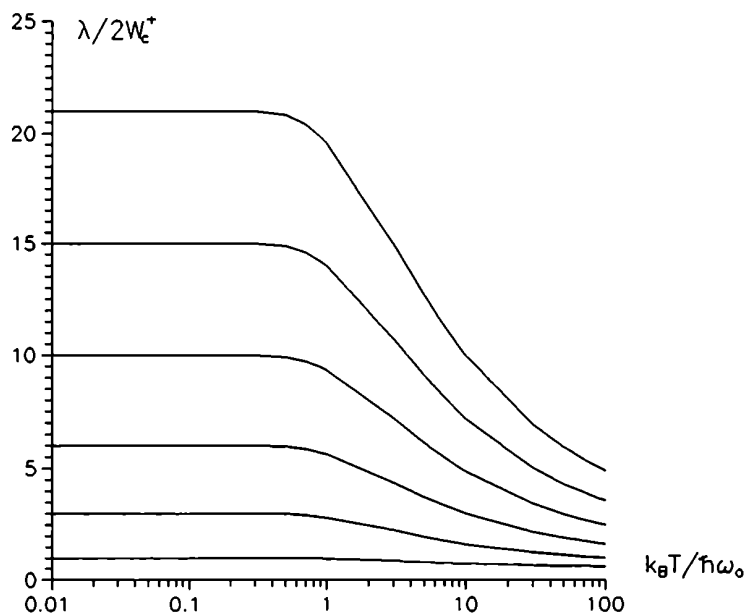


Figura 4.2: Autovalores λ_2 a λ_7 para el caso de acoplamiento cuadrático.

$$\alpha_i = \sum_{N \geq 0} \rho_{2N+1}(0) . \quad (4.135)$$

De lo expuesto anteriormente, vemos que si deseamos obtener mayor información acerca de la evolución temporal del sistema debemos recurrir al cálculo numérico. Por lo tanto, haremos un análisis de los autovalores que surgen del problema matricial planteado en la ecuación (4.120) cuando consideramos que la densidad asintótica es de la forma (4.92). A tal fin, hemos simetrizado la matriz M_c de acuerdo a las prescripciones dadas en la Ref.[Hak77] y la hemos truncado con fines computacionales para $N_{max} = 1000$. De esta forma hemos verificado que dicha matriz posee dos autovalores nulos en concordancia con lo hallado anteriormente. En la figura 4.2 hemos graficado los 6 autovalores no nulos mas pequeños en función de $k_B T / \hbar \omega_0$.

En el caso en que $k_B T < \hbar \omega_0$ vemos que dichos autovalores son de la forma

$$\lambda_n = W_c^+ n(n-1) , \quad n = 0, 1, 2, \dots . \quad (4.136)$$

En particular, si $k_B T / \hbar \omega_o \approx 0.1$ vemos de la relación (4.117) que $W_c^- \approx 10^{-9} W_c^+$ y, por lo tanto, los procesos microscópicos involucrados serán en su gran mayoría de decaimiento. Teniendo en cuenta esto, podemos escribir a la función característica (4.130) en este caso como

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(z, t) = W_c^+ (1 - z^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi(z, t) , \quad (4.137)$$

la cual puede resolverse analíticamente en función de los polinomios de Jacobi [Abr65]. De este modo puede verificarse que los autovalores son de la forma (4.136).

En el caso en que $k_B T / \hbar \omega_o > 1$ observamos que los autovalores decrecen con la temperatura y tienden a formar un continuo, donde $\lambda_2 \approx W_c^+$. Esto será corroborado en el Capítulo 6.

4.4 Acoplamiento general

Ampliaremos aquí los resultados anteriores analizando el comportamiento del oscilador en los casos en que se hallen presentes simultáneamente distintos tipos de acoplamiento. En la situación en la cual el oscilador se acopla al reservorio a través de un término lineal y uno cuadrático, o sea

$$f_{LC}(Q) = Q + \eta Q^2 , \quad (4.138)$$

la ecuación maestra generalizada Markoviana que se obtiene es de la forma

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S(t) + \frac{i}{\hbar} [H, \rho_S(t)] = \\ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega_r^2}{2} [Q + \eta Q^2, [Q + \eta Q^2, \rho_S(t)]_+] \\ - \frac{i}{\hbar} \frac{\nu}{2m} [Q + \eta Q^2, [P + 2\eta\{QP\}, \rho_S(t)]_+] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{C}{\hbar^2}[Q + \eta Q^2, [Q, \rho_S(t)]] - \frac{\eta}{2\hbar^2}(\alpha + C_c)[Q + \eta Q^2, [Q^2, \rho_S(t)]] \\
& -\frac{\eta}{2\hbar^2 m^2 \omega_o^2}(\alpha - C_c)[Q + \eta Q^2, [P^2, \rho_S(t)]] \\
& -\frac{\delta}{\hbar^2}[Q + \eta Q^2, [P, \rho_S(t)]] - \frac{2\eta\delta_c}{\hbar^2}[Q + \eta Q^2, [\{QP\}, \rho_S(t)]] , \quad (4.139)
\end{aligned}$$

mientras que la ecuación de evolución Markoviana para el valor medio de la coordenada del oscilador se escribe como

$$\begin{aligned}
m\langle \ddot{Q} \rangle_t &= -m\Omega^2 \langle Q \rangle_t + m\omega_r^2(\eta \langle Q^2 \rangle_t + 2\eta^2 \langle Q^3 \rangle_t) \\
& -\nu\{\langle \dot{Q} \rangle_t + 4\eta \langle \{Q\dot{Q}\} \rangle_t + 4\eta^2 \langle \{Q^2\dot{Q}\} \rangle_t\} \\
& + \frac{2\eta^2}{m^2\omega_o}(C_c - \alpha)\langle \dot{Q} \rangle_t \\
& -2\eta\delta - 4\eta^2\delta_c \langle Q \rangle_t , \quad (4.140)
\end{aligned}$$

las cuales incluyen, además de los respectivos términos que aparecen en las ecuaciones correspondientes a los casos de acoplamiento lineal y cuadrático, contribuciones proporcionales a η que provienen de las correlaciones entre ambos tipos de interacciones. En particular, vemos que se agrega un coeficiente de fricción efectivo lineal en la posición y un término cuadrático en las fuerzas. Sin embargo, dado que estos provienen de procesos microscópicos inelásticos, al escribir la ecuación maestra asintótica

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_N &= W_l^+((N+1)\rho_{N+1} - N\rho_N) \\
& + W_l^-(N\rho_{N-1} - (N+1)\rho_N) \\
& + \eta^2 \{ W_c^+((N+1)(N+2)\rho_{N+2} - N(N-1)\rho_N) \\
& + W_c^-(N(N-1)\rho_{N-2} - (N+1)(N+2)\rho_N) \} , \quad (4.141)
\end{aligned}$$

los mismos desaparecen en este régimen.

Si queremos realizar un análisis numérico de los autovalores que surgen al escribir la ecuación (4.141) en forma matricial, es necesario conocer la relación existente entre las tasas de transición W_c^+ y W_l^+ . Esta puede hallarse a partir de las expresiones (4.78), (4.51), (4.118) y (4.105), de donde obtenemos que

$$\frac{W_l^+}{W_c^+} = \frac{m\omega_o}{\hbar}(1 + e^{-\beta\hbar\omega_o}) . \quad (4.142)$$

La evaluación numérica de dichos autovalores se realizó con el mismo método implementado en la situación de acoplamiento cuadrático. Los resultados obtenidos han sido volcados en las Figuras 4.3 a 4.5.

Hemos hallado que al agregar un término lineal al acoplamiento, la degeneración de orden dos en el autovalor nulo, correspondiente al autovector de equilibrio, desaparece. En este sentido, a medida que el parámetro η aumenta, o sea que el término lineal adquiere menor importancia, el primer autovalor no nulo decrece, hasta hacerse despreciable para valores muy grandes de η .

Puede verificarse que en la región $k_B T < \hbar\omega_o$ los autovalores se comportan como

$$\lambda_n = W_c^+(\eta^2 n(n-1) + n) , \quad n = 0, 1, 2, \dots , \quad (4.143)$$

siendo en consecuencia de la forma $\lambda_n = \lambda_n^l + \eta^2 \lambda_n^c$, donde λ^l y λ^c corresponden, respectivamente, a los dados en las expresiones (4.96) y (4.136).

Para valores pequeños del parámetro η , puede observarse que los autovalores son aproximadamente de la forma

$$\lambda_n = W_c^+ n(1 - e^{-2\beta\hbar\omega_o}) , \quad n = 0, 1, 2, \dots , \quad (4.144)$$

que, de acuerdo a la relación(4.142), son equivalentes a los (4.96) correspondientes al acoplamiento lineal.

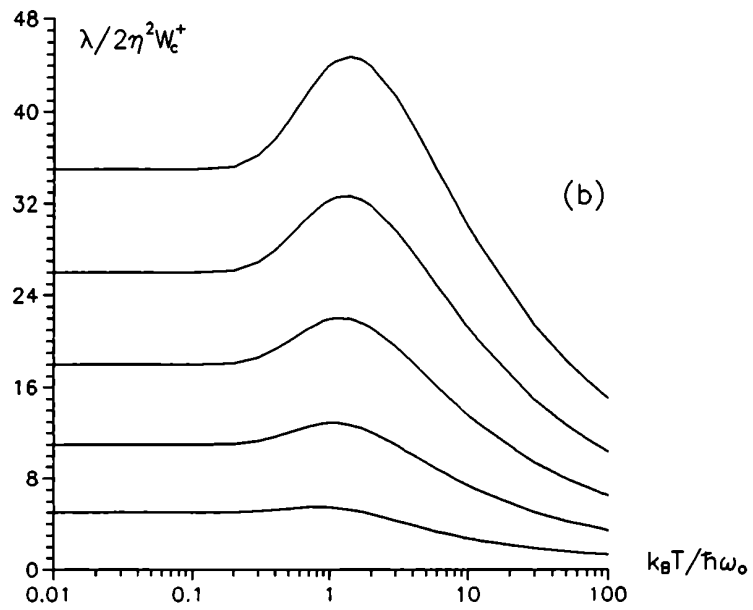
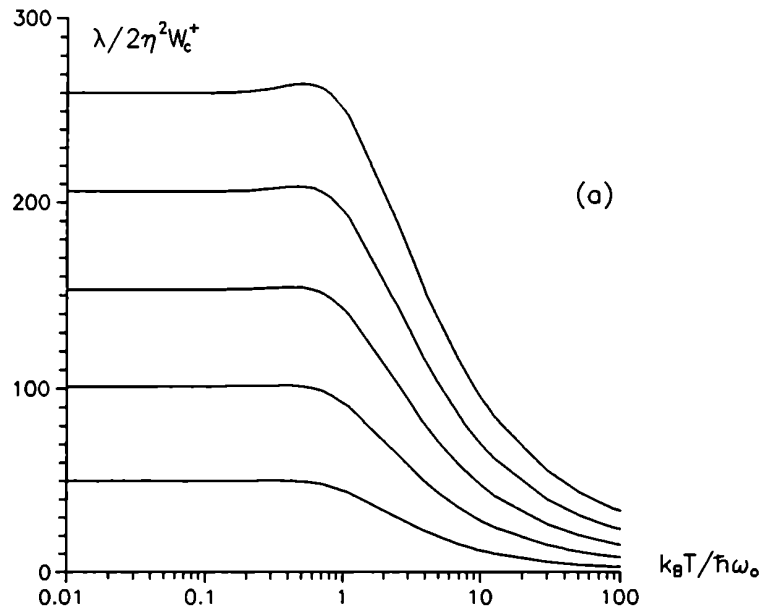


Figura 4.3: Autovalores λ_1 a λ_5 para un acoplamiento de la forma (4.138).
 (a) $\eta^2 = 0.01$ y (b) $\eta^2 = 0.1$.

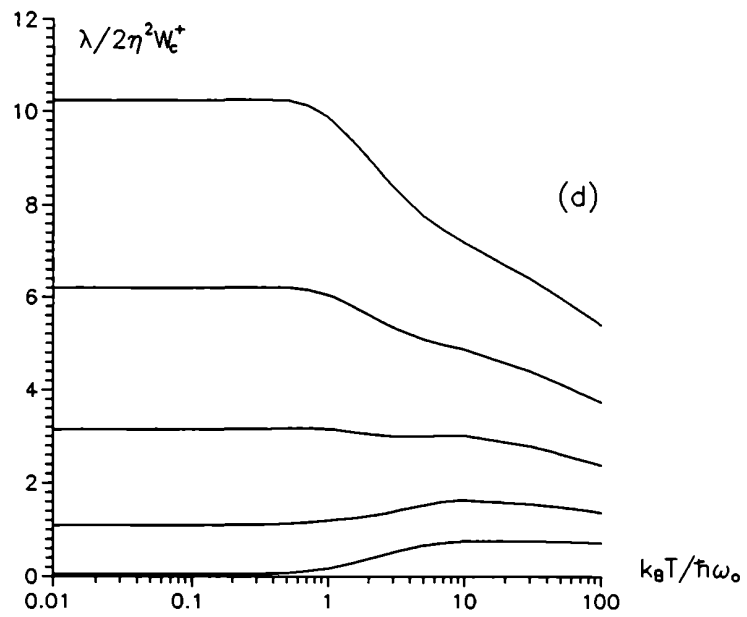
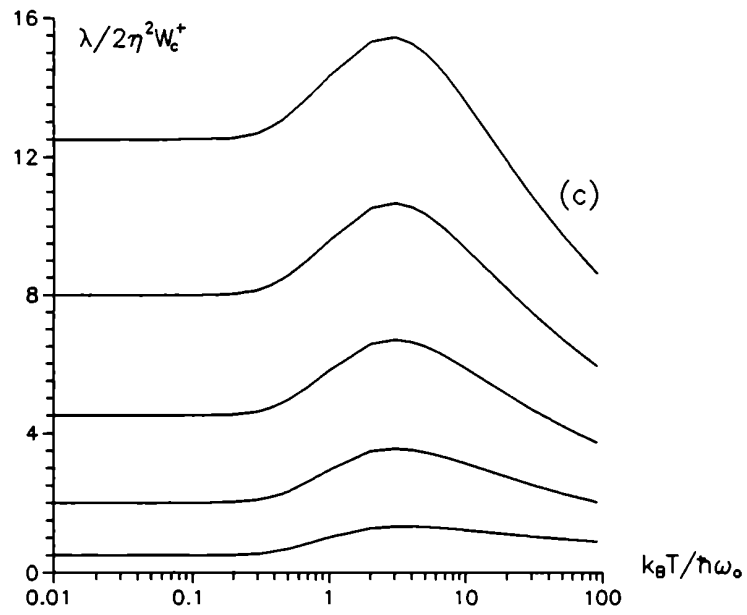


Figura 4.4: Idem fig.4.3. (c) $\eta^2 = 1$ y (d) $\eta^2 = 10$.

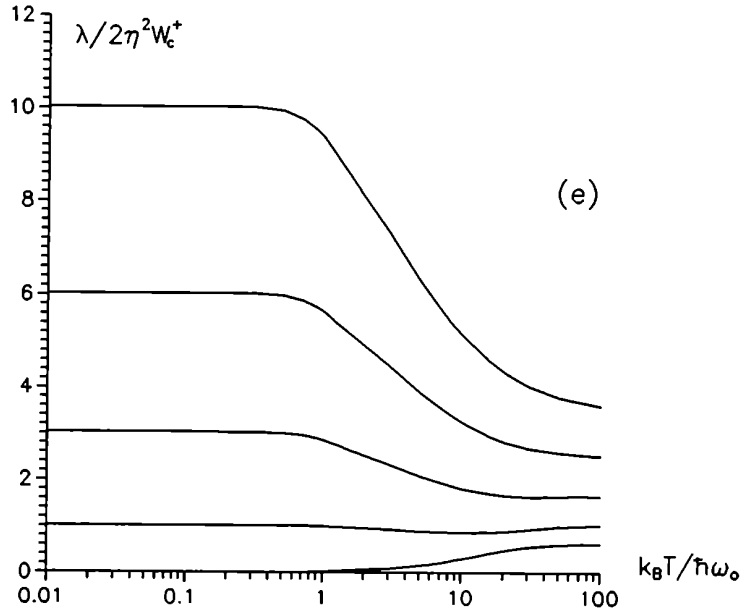


Figura 4.5: Idem fig.4.3. (e) $\eta^2 = 100$.

Si se desean generalizar los resultados previos para un acoplamiento del tipo

$$f(Q) = a_1 Q + a_2 Q^2 + \dots + a_K Q^K, \quad (4.145)$$

las ecuaciones maestras generalizadas y las ecuaciones de Langevin resultantes son engorrosas de escribir dada la cantidad de términos intervinientes, si bien siguen las líneas generales de las analizadas previamente. Sin embargo, la ecuación maestra asintótica (2.39) en este caso posee una estructura sencilla, donde sus probabilidades de transición

$$W_{MN} = \sum_k^K \{ a_k^2 W_k^+ N(N-1)\dots(N-k+1) \delta_{M,N-k} + a_k^2 W_k^- (N+1)(N+2)\dots(N+k) \delta_{M,N+k} \} \quad (4.146)$$

son polinomios de grado K en el número cuántico N , y las tasas de transición

satisfacen la relación

$$\frac{W_k^-}{W_k^+} = \left(\frac{W_l^-}{W_l^+} \right)^k = (e^{-\beta \hbar \omega_0})^k . \quad (4.147)$$

Asimismo, y de forma análoga a la realizada anteriormente, puede demostrarse que la distribución canónica es solución de equilibrio de la ecuación maestra considerada.

Capítulo 5

Aplicación de las representaciones semiclásicas

Las representaciones semiclásicas poseen la ventaja de permitir la descripción de un sistema cuántico mediante un lenguaje clásico. Esta descripción incluye una correspondencia entre funciones clásicas y operadores cuánticos, y una función densidad de *cuasiprobabilidad* real, no necesariamente positiva, en un espacio de fases correspondiente a un estado cuántico particular.

La primera función de cuasiprobabilidad fue introducida por Wigner [Wi32, Hi84] con el fin de estudiar correcciones cuánticas a la mecánica estadística clásica. Esta descripción se realiza directamente en el espacio de fases clásico del sistema y permite obtener la distribución clásica al tomar el límite $\hbar \rightarrow 0$.

En el marco de la óptica cuántica se ha utilizado originalmente la llamada representación P introducida por Glauber [Gl63] y Sudarshan [Su63] basada en el uso de los estados coherentes, aunque dicha representación introduce algunas singularidades como en el caso de la estadística no clásica de fotones. Mas recientemente, Drummond, Gardiner y Walls [Dr80, Dr81] introdujeron la representación P generalizada, con el fin de obtener ecuaciones de Fokker-Planck en un espacio de fases a partir de ecuaciones maestras cuánticas. La misma está definida en un espacio de fases complejo en vez de en un espacio de fases real como la de Wigner. En par-

ticular, la representación P generalizada ha sido utilizada en problemas no lineales, como por ejemplo la absorción de dos fotones [Ch77] y la biestabilidad dispersiva [Dr80b], como así también en problemas de teoría de reacciones químicas [Dr81].

Es posible observar en la literatura que en todos los análisis en los que se parte de ecuaciones maestras y luego se han realizado tratamientos utilizando funciones de cuasiprobabilidad, ya sea a través de la representación de Wigner o la representación P , se ha implementado la aproximación de onda rotante. Por lo tanto, es interesante analizar cómo son las ecuaciones que se obtienen aplicando la representación de Wigner a las ecuaciones maestras halladas anteriormente utilizando el acoplamiento completo. Esto es lo que realizaremos en el presente capítulo.

5.1 Representación de Wigner

La representación de Wigner se basa en la función de Wigner ρ_W , definida como

$$\rho_W(P, Q) = \int dv e^{iPv/\hbar} \langle Q - \frac{v}{2} | \rho | Q + \frac{v}{2} \rangle , \quad (5.1)$$

donde $\langle Q_1 | \rho | Q_2 \rangle$ denota a los elementos de matriz del operador densidad en la base de coordenadas. Esta función de cuasiprobabilidad ρ_W está normalizada, es real y, como mencionamos anteriormente, puede tomar valores negativos. A partir de la misma, el valor medio de un operador cuántico \hat{A} viene dado por la expresión

$$\langle \hat{A} \rangle = Tr(\hat{A}\hat{\rho}) = \int \int dQ dP A_W(P, Q) \rho_W(P, Q) , \quad (5.2)$$

donde

$$A_W(P, Q) = \int dv e^{iPv/\hbar} \langle Q - \frac{v}{2} | \hat{A} | Q + \frac{v}{2} \rangle \quad (5.3)$$

es la transformada de Wigner del operador A .

Con el fin de obtener la transformada de las ecuaciones maestras halladas anteriormente, haremos uso del desarrollo usual que permite obtener la transformada de

Wigner $(\hat{A}\hat{B})_W$ del producto de operadores \hat{A} y \hat{B} [Hi84], el cual toma la forma

$$(\hat{A}\hat{B})_W = A_W(Q, P) \exp\left(\frac{\hbar\Lambda}{2i}\right) B_W(Q, P) , \quad (5.4)$$

siendo Λ el operador diferencial definido como

$$\Lambda = \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial P} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial Q} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial Q} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial P} , \quad (5.5)$$

donde las flechas indican la dirección en que actúa la derivada parcial.

Dado que en las ecuaciones maestras particulares obtenidas a partir de la ecuación maestra generalizada (2.34) los términos intervinientes incluyen conmutadores y anticonmutadores de potencias de P y Q , es necesario disponer de la transformada de dichas operaciones. Desarrollando el operador exponencial en la expresión (5.4), obtenemos que, para un dado operador \hat{A} y funciones arbitrarias $f(\hat{Q})$ y $g(\hat{P})$, se satisfacen las expresiones

$$([f(\hat{Q}), \hat{A}]_{\mp})_W = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n \frac{\partial^n f}{\partial Q^n} \frac{\partial^n A}{\partial P^n} [1 \mp (-1)^n] , \quad (5.6)$$

$$([g(\hat{P}), \hat{A}]_{\mp})_W = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n \frac{\partial^n g}{\partial P^n} \frac{\partial^n A}{\partial Q^n} [(-1)^n \mp 1] . \quad (5.7)$$

Haciendo uso de estas expansiones, es posible obtener ecuaciones de evolución para la transformada de Wigner de la densidad reducida a partir de la ecuación maestra (2.34), las cuales serán de la forma de expansiones de Kramers-Moyal [Mo49, vKa81]

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_W(Q, P, t) = L \rho_W(Q, P, t) , \quad (5.8)$$

donde L es el operador diferencial

$$L = \sum_{n,m} (-1)^{n+m} \frac{\partial^{n+m}}{\partial Q^n \partial P^m} D_{Q^n P^m} . \quad (5.9)$$

Este operador se truncará en algún orden finito ya que, como mencionamos anteriormente, las expansiones (5.6) y (5.7) actúan sobre potencias de P y Q .

5.2 Ecuación de Kramers cuántica

En esta sección analizaremos la ecuación de evolución del tipo (5.8) que se obtiene al utilizar la representación de Wigner en la situación de acoplamiento lineal con el reservorio y régimen Markoviano. Insertando las expansiones (5.6) y (5.7) en la ecuación maestra generalizada (4.69) obtenemos, mediante un cálculo directo, que la función de cuasiprobabilidad $\rho_W(Q, P, t)$ obedece la ecuación de evolución

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_W(Q, P, t) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial Q} \frac{P}{m} + \frac{\partial}{\partial P} (m\Omega^2 Q + \frac{\nu}{m} P) - \delta \frac{\partial^2}{\partial Q \partial P} + C \frac{\partial^2}{\partial P^2} \right\} \rho_W(Q, P, t) , \quad (5.10)$$

la cual es *exacta* debido a que en este caso las expansiones (5.6) y (5.7) aplicadas a los términos correspondientes de la ecuación maestra (4.69) se cortan, a lo sumo, en el segundo término. Es importante destacar aquí que la forma de esta ecuación es *independiente del reservorio térmico utilizado*, dependiendo de éste sólo a través de los parámetros involucrados.

En el límite clásico, la ecuación (5.10) toma la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_W(Q, P, t) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial Q} \frac{P}{m} + \frac{\partial}{\partial P} (m\Omega^2 Q + \frac{\nu}{m} P) + \nu kT \frac{\partial^2}{\partial P^2} \right\} \rho_W(Q, P, t) \quad (5.11)$$

donde hemos utilizado la relación (4.51) y el hecho de que $\delta = 0$ en este límite. Esta

ecuación no es otra que la conocida *ecuación de Kramers* [Ri84], la cual describe el movimiento Browniano clásico de un oscilador de frecuencia Ω y masa m a través de la función de distribución $\rho_W(Q, P, t)$ en el espacio de fases. Concluimos entonces que el uso de la ecuación maestra completa (4.69) nos permite obtener el límite clásico correcto.

La ecuación (5.10) y su versión clásica son ecuaciones de Fokker-Planck que describen procesos de Ornstein-Uhlenbeck [Uh30, Ri84] debido a que los coeficientes de deriva son lineales y los de difusión constantes. Sin embargo, la primera de ellas contiene un coeficiente de difusión adicional que genera un autovalor negativo en la matriz de difusión.

La solución de equilibrio de la ecuación (5.10) se puede hallar por simple inspección. Proponiendo una distribución del tipo

$$\rho_W^e(Q, P, t) \propto \exp(-aQ^2 - bP^2) , \quad (5.12)$$

se obtiene que

$$\rho_W^e(Q, P, t) = \frac{2}{\pi} (\langle P^2 \rangle_e \langle Q^2 \rangle_e)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{P^2}{\langle P^2 \rangle_e} + \frac{Q^2}{\langle Q^2 \rangle_e} \right) \right\} \quad (5.13)$$

satisface la ecuación (5.10) en la situación estacionaria. En esta expresión $\langle P^2 \rangle_e$ y $\langle Q^2 \rangle_e$ son los valores de equilibrio (4.54) y (4.55) hallados a través de las ecuaciones de evolución para los segundos momentos. Es sencillo comprobar que los valores medios de equilibrio que se obtienen a partir de la distribución (5.13) coinciden con los obtenidos previamente en las expresiones (4.53) a (4.59).

Agreguemos que la solución temporal completa de la ecuación (5.10) puede determinarse siguiendo los lineamientos dados en la Ref.[Ri84].

Si en vez de aplicar la transformada de Wigner a la ecuación maestra (4.69), lo hacemos sobre la ecuación maestra (4.72) obtenida bajo la aproximación de onda

rotante, obtenemos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_w(Q, P, t) = & \left\{ -\frac{\partial}{\partial Q} \left(\left(1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_o^2}\right) \frac{P}{m} - \frac{\nu}{2m} Q \right) \right. \\ & + \frac{\partial}{\partial P} \left(m(\omega_o^2 - \frac{\omega_r^2}{2}) Q + \frac{\nu}{2m} P \right) \\ & \left. + \frac{\partial^2}{\partial Q^2} \frac{C}{2m^2\omega_o^2} + \frac{\partial^2}{\partial P^2} C \right\} \rho_w(Q, P, t) , \end{aligned} \quad (5.14)$$

la cual tiene como solución de equilibrio a la distribución

$$\rho_w^e(Q, P, t) = \frac{2\nu}{\pi C} \exp \left\{ -\frac{\nu}{C} \left(\frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega_o^2 Q^2}{2} \right) \right\} \quad (5.15)$$

La diferencia entre esta distribución y la (5.13) tiene su origen en la validez de la aproximación asintótica, lo cual será analizado en la sección 5.4.

Si pasamos de la representación (Q, P) a variables de ángulo-acción (H, ϕ) , donde

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + \frac{m\omega_o^2}{2} Q^2 \quad (5.16)$$

$$\text{tg} \phi = \frac{P}{m\omega_o Q} \quad (5.17)$$

la ecuación (5.14) puede llevarse a la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_w(H, \phi, t) = & \left\{ \frac{\partial}{\partial \phi} \omega_o \left(1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_o^2}\right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \frac{C}{4mH} \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{\nu}{m} H - \frac{C}{m} \right) + \frac{\partial^2}{\partial H^2} \frac{C}{m} H \right\} \rho_w(H, \phi, t) , \end{aligned} \quad (5.18)$$

donde hemos utilizado las leyes de transformación de los coeficientes ante cambio

de variables definidos en el Apéndice D. Notemos que los coeficientes de deriva y difusión son independientes del ángulo ϕ .

En la situación de régimen asintótico la ecuación (5.18) puede llevarse a una forma más sencilla. Para ello tendremos en cuenta que la función de distribución de Wigner correspondiente a un estado puro de N bosones depende de las coordenadas del espacio de fases sólo a través de su Hamiltoniano [Gro46]. En consecuencia, en este régimen la función de distribución de Wigner sólo será función de H , y por lo tanto en la ecuación (5.18) se harán nulos los términos que involucran derivadas parciales respecto de ϕ . En este caso, podemos reescribir dicha ecuación como

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_W(H, t) = \left\{ \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{\nu}{m} H - \frac{C}{m} \right) + \frac{\partial^2}{\partial H^2} \frac{C}{m} H \right\} \rho_W(H, t) , \quad (5.19)$$

siendo esta la ecuación hallada en la Ref.[He89], por lo que no nos extenderemos en su análisis. Sólo mencionaremos que la distribución de equilibrio coincide como era de esperar con la (5.15). Podemos agregar que ésta tiene la forma de una distribución canónica clásica pero a una temperatura T_W denominada temperatura de Wigner [He89], que de acuerdo a nuestros resultados podemos escribir como

$$k_B T_W = \frac{C}{\nu} , \quad (5.20)$$

de modo tal que, según (4.51), en el límite clásico coincide con la temperatura del reservorio.

En el Apéndice E se ha demostrado que la solución general de la ecuación (5.18) es de la forma

$$\rho_W(H, \phi, t) = \left(\frac{\nu H}{C} \right)^{k/2} \mathbf{L}_n^{(k)} \left(\frac{\nu H}{C} \right) e^{-\frac{\nu H}{C}} e^{\pm i k \phi} e^{-\lambda_{n,k}^{\pm} t} , \quad n, k = 0, 1, 2, \dots , \quad (5.21)$$

donde $\mathbf{L}_n^{(k)}$ denotan a los polinomios de Laguerre generalizados [Gr65] y los autovalores

$$\lambda_{n,k}^{\pm} = \frac{\nu}{m} \left(n + \frac{k}{2} \right) \pm i k \omega_o \left(1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_o^2} \right) . \quad (5.22)$$

son números complejos (de parte real positiva) debido a que el operador de Fokker-Planck asociado a la ecuación (5.18) es no hermítico [Ri84].

El caso analizado en la Ref.[He89] corresponde entonces a la situación de simetría axial ($k = 0$), mientras que la distribución de equilibrio al caso $n = k = 0$.

Si escribimos la ecuación (5.10) correspondiente al caso de acoplamiento completo en función de las variables H y ϕ , los nuevos coeficientes de deriva y difusión serán de la forma

$$D_H = \frac{C}{m} - 2\frac{\nu}{m}H \sin^2 \phi + \frac{\omega_r^2}{\omega_o} H \sin 2\phi , \quad (5.23)$$

$$D_\phi = -\omega_o \left(1 - \frac{\omega_r^2}{\omega_o^2} \cos^2 \phi\right) - \frac{\nu}{2m} \left(1 - \frac{C}{\nu H}\right) \sin 2\phi + \frac{\delta\omega_o}{2H} \cos 2\phi , \quad (5.24)$$

$$D_{\phi,\phi} = \frac{C}{2mH} \cos^2 \phi + \frac{\delta\omega_o}{2H} \cos 2\phi , \quad (5.25)$$

$$D_{H,\phi} = \frac{C}{2m} \sin 2\phi - \frac{\delta\omega_o}{2} \cos 2\phi , \quad (5.26)$$

$$D_{H,H} = 2\frac{C}{m} H \sin^2 \phi , \quad (5.27)$$

los cuales ahora dependen del ángulo ϕ . Comparando estos coeficientes con los correspondientes en la ecuación (5.18), notamos que

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi D^{AC}(H, \phi) = D^{AOR}(H) \quad (5.28)$$

de forma tal que los coeficientes hallados bajo la aproximación de onda rotante se obtienen como promedio angular de los correspondientes a la situación de acoplamiento completo.

5.3 Ecuación de Kramers-Moyal

En el caso en que el acoplamiento con el reservorio sea cuadrático en las coordenadas del oscilador, podemos hallar la ecuación de evolución para $\rho_W(Q, P, t)$ en forma análoga a lo realizado en la sección anterior. Partiendo de la ecuación maestra (4.109), en este caso obtenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \rho_W(Q, P, t) = & \left\{ -\frac{\partial}{\partial Q} \frac{P}{m} + \frac{\partial}{\partial P} ((m\omega_0^2 Q - 2m\omega_r^2 Q^3) \right. \\
& + 4\frac{\nu}{m} Q^2 P + 4\delta_c Q + \frac{2}{m^2 \omega_0^2} (\alpha - C_c) P) \\
& - \frac{\partial^2}{\partial Q \partial P} \left(4\delta_c Q^2 + \frac{2}{m^2 \omega_0^2} (\alpha - C_c) P \right) \\
& + \frac{\partial^2}{\partial P^2} \left(4\delta_c Q P + 2(\alpha + C_c) Q^2 - \hbar^2 \frac{\nu}{m} \right) \\
& \left. + \frac{\partial^3}{\partial Q \partial P^2} \hbar^2 \frac{\nu}{m} Q + \frac{\partial^3}{\partial P^3} \hbar^2 \frac{m\omega_r^2}{2} Q \right\} \rho_W(Q, P, t) . \quad (5.29)
\end{aligned}$$

Contrariamente a la situación de acoplamiento lineal, esta ecuación no es de Fokker-Planck debido a la presencia de derivadas parciales de orden superior a dos. Es interesante notar aquí que el Lema de Pawula [Pa67] establece que, dada una expansión del tipo de Kramers-Moyal (5.8), la función ρ_W será siempre positiva sólo si la expansión termina en el primer o segundo término, o posee un número infinito de ellos. Por lo tanto, en este caso la distribución $\rho_W(Q, P, t)$ podrá ser negativa. Sin embargo esto no acarrea ninguna contradicción dado que ρ_W es una función de cuasiprobabilidad y, como mencionamos anteriormente, ésta puede tomar valores negativos.

En este punto cabe mencionar que la deducción tradicional de la ecuación de Fokker-Planck asume la existencia de saltos infinitamente pequeños [vKa81]. Esta hipótesis claramente no se satisface en nuestro caso debido a que estamos tratando con un sistema de naturaleza cuántica. En este sentido, notemos que los términos que acompañan a las derivadas de orden mayor a dos son proporcionales a \hbar^2 . En

concordancia con lo expresado, en el límite clásico reobtenemos una ecuación de Fokker-Planck, siendo esta

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_W(Q, P, t) = & \left\{ -\frac{\partial}{\partial Q} \frac{P}{m} + \frac{\partial}{\partial P} \left(m\omega_o^2 Q - 2m\omega_r^2 Q^3 + 4\frac{\nu}{m} Q^2 P \right) \right. \\ & \left. + \frac{\partial^2}{\partial P^2} 4\nu kT Q^2 \right\} \rho_W(Q, P, t) \end{aligned} \quad (5.30)$$

donde hemos usado el hecho de que en este límite se cumple que $\alpha = C_c = C$. Notemos que en este caso el coeficiente de difusión depende de la coordenada del oscilador, lo cual está asociado a la presencia de fluctuaciones multiplicativas. Agregaremos que la ecuación (5.30) coincide con la hallada en la Ref.[Lin81] para el sistema clásico.

Si realizamos la aproximación de onda rotante en la ecuación (4.109) y pasamos a las variables de ángulo-acción (H, ϕ) de forma análoga a lo realizado en la sección anterior, obtenemos que en el régimen asintótico la función de Wigner $\rho_W(H, t)$ satisface la ecuación

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_W(H, t) = & \frac{\nu}{m} \frac{2}{m\omega_o^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial H} \left(H^2 + \frac{\hbar^2 \omega_o^2}{2} - 2\frac{C_c}{\nu} H \right) \right. \\ & \left. + \frac{\partial^2}{\partial H^2} \left(\frac{C_c}{\nu} H^2 - \hbar^2 \omega_o^2 H \right) + \frac{\partial^3}{\partial H^3} \frac{\hbar^2 \omega_o^2}{4} H^2 \right\} \rho_W(H, t) \end{aligned} \quad ,(5.31)$$

donde hemos eliminado la dependencia con ϕ por hallarnos en las cercanías del equilibrio. Notemos que la distribución de equilibrio de esta ecuación es igual a la hallada para la (5.19) correspondiente a un acoplamiento lineal.

5.4 Límite de baja fricción

De lo visto en las secciones anteriores, es natural preguntarse bajo qué condiciones las ecuaciones (5.19) y (5.31) son equivalentes a las ecuaciones (5.10) y (5.29). Para responder a esta cuestión, utilizaremos un método similar al introducido por Stratonovich [St67] para analizar el caso de un oscilador no lineal impulsado por una fuerza aleatoria aditiva en el límite de amortiguamiento débil o baja fricción. Este método se basa en la separación de dos escalas temporales, partiendo de la suposición de que para un amortiguamiento pequeño, la envolvente de la energía media varía poco en un período de oscilación y por lo tanto, mucho más lentamente que el desplazamiento medio. Este método es análogo al de eliminación adiabática de las variables rápidas [Hak77].

En la situación de baja fricción, la energía variará lentamente en el transcurso del tiempo y, por lo tanto, en la ecuación (5.29) la energía será la variable relevante o lenta y la posición o el momento será la variable irrelevante o rápida (en el límite de alta fricción la posición es la variable lenta mientras que el momento es la rápida). En términos de la matriz densidad, esto es compatible con el hecho mencionado anteriormente de que los elementos no diagonales $\rho_{N,N\pm 1}$, relacionados con la posición y el momento, decaen más rápidamente que los diagonales ρ_N que están relacionados con la energía.

Si en las ecuaciones (5.10) y (5.29), que son de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_W(Q, P, t) = \mathbf{L} \rho_W(Q, P, t) , \quad (5.32)$$

realizamos el cambio de variables $(Q, P) \rightarrow (Q, H)$, obtendremos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho'_W(Q, H, t) = \mathbf{L}' \rho'_W(Q, H, t) , \quad (5.33)$$

donde los coeficientes de \mathbf{L}' se relacionan con los de \mathbf{L} a través de las expresiones dadas en el Apéndice D.

La densidad de probabilidad $\rho'_W(Q, H, t)$ puede escribirse como

$$\rho'_W(Q, H, t) = W(H, t)W'(Q, t/H) , \quad (5.34)$$

donde $W'(Q, t/H)$ es la densidad de probabilidad condicional de que el desplazamiento a tiempo t sea Q dado que su energía es H . Si hacemos la hipótesis de que esta densidad de probabilidad condicional es proporcional al tiempo en que el oscilador se halla en Q con energía H , este tiempo será inversamente proporcional a la velocidad y por lo tanto a P . Esto se debe a que estamos trabajando con la ecuación hallada a partir del acoplamiento completo y vale que $m\dot{Q} = P$, ya que en el caso de implementar la aproximación de onda rotante se cumple la relación (4.73) y esto deja de ser cierto. En consecuencia, la densidad normalizada

$$W'(Q, t/H) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2H}{m\omega_0^2} - Q^2 \right)^{-1/2} \quad (5.35)$$

es exacta para $t \rightarrow \infty$.

Si reemplazamos las expresiones (5.34) y (5.35) en la ecuación (5.33) e integramos sobre Q , obtenemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} W(H, t) = \left(\int_R dQ L' \frac{1}{\pi \sqrt{\frac{2H}{m\omega_0^2} - Q^2}} \right) W(H, t) , \quad (5.36)$$

donde R es la región de integración para la cual $H \geq (m\omega_0^2/2)Q^2$.

Como en la ecuaciones (5.10) y (5.29) se cumple que $D_{QQ} = D_{QQP} = D_{QQQ} = 0$, utilizando las expresiones (D.4) a (D.6) podemos ver que $D'_{QQ} = D'_{QQH} = D'_{QQQ} = 0$. Teniendo en cuenta además que en ambos casos es $D_Q = P/m$, la ecuación (5.36) se escribe como

$$\frac{\partial}{\partial t} W(H, t) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial H} \int_R dQ \left(\frac{D_H}{\pi \sqrt{\frac{2H}{m\omega_0^2} - Q^2}} - \frac{\partial}{\partial Q} \frac{2D_{HQ}}{\pi \sqrt{\frac{2H}{m\omega_0^2} - Q^2}} \right) \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial^2}{\partial H^2} \int_R dQ \left(\frac{D_{HH}}{\pi \sqrt{\frac{2H}{m\omega_0^2} - Q^2}} - \frac{\partial}{\partial Q} \frac{3D_{HHQ}}{\pi \sqrt{\frac{2H}{m\omega_0^2} - Q^2}} \right) \\
& - \frac{\partial^3}{\partial H^3} \int_R dQ \frac{D_{HHH}}{\pi \sqrt{\frac{2H}{m\omega_0^2} - Q^2}} \left. \right\} W(H, t) . \quad (5.37)
\end{aligned}$$

En el Apéndice D se han calculado los coeficientes que resultan de hacer el cambio de variables indicado. Si en cada caso los insertamos en la expresión (5.37) y realizamos las integraciones indicadas obtenemos respectivamente las ecuaciones (5.19) y (5.31).

Debido a que en este procedimiento supusimos que el desplazamiento para un dado H se equilibra mucho más rápidamente que la envolvente de la energía y a que hemos utilizado la densidad (5.35) que es válida para tiempos largos, concluimos que estas ecuaciones describen, respectivamente, el comportamiento asintótico de las (5.10) y (5.29) en el régimen de baja fricción, lo cual es compatible con las hipótesis utilizadas.

Antes de concluir este capítulo mencionaremos que en las Refs.[Ch77, Dr80, Dr81], dentro del marco de la óptica cuántica, se han analizado acoplamientos cuadráticos en el régimen Markoviano utilizando la representación P mencionada al inicio del presente capítulo. En estos trabajos se han obtenido ecuaciones de Fokker-Planck en lugar de desarrollos de Kramers-Moyal. Sin embargo allí se ha supuesto que no existen procesos de reexcitación, lo que es equivalente a suponer que $W_c^- = 0$. Esto es válido sólo en el caso en que $T = 0$ y, como vimos oportunamente, en este caso deja de valer la hipótesis Markoviana. En el caso de incluir dichos procesos estas ecuaciones se transforman en ecuaciones diferenciales de grado tres, análogas a las obtenidas en el presente trabajo.

Capítulo 6

Método de expansión para las ecuaciones maestras

6.1 Descripción del método

Es sabido que en muy pocos casos concretos es posible hallar soluciones explícitas para las ecuaciones maestras asintóticas. En particular, las ecuaciones maestras de un paso pueden ser resueltas casi exclusivamente en el caso en que las probabilidades de transición sean lineales. Cuando esto no ocurre, es necesario implementar métodos de aproximación para poder tratarlas. En la literatura pueden encontrarse diversos métodos basados en prescripciones ad hoc con el fin de truncar las jerarquías de momentos que surgen de las ecuaciones maestras no lineales, pero generalmente estos criterios están basados en las necesidades del autor más que en la lógica.

Un método de aproximación sistemático elaborado por van Kampen [vKa81], bajo la forma de una expansión en potencias de algún parámetro pequeño, permite obtener una ecuación de Fokker-Planck mediante una medida objetiva del tamaño de los distintos términos involucrados. Para tal fin debe elegirse un parámetro de expansión adecuado que aparezca en las probabilidades de transición, el cual gobierne el tamaño de las fluctuaciones y por lo tanto el tamaño de los saltos. Este

parámetro, que denotamos Ω , se elige de forma tal que para Ω grande, los saltos sean relativamente pequeños. La presencia de este parámetro crea una clara distinción entre dos escalas: una que está determinada por el tamaño de los saltos y que denotamos por la variable X (de forma tal que cuando variamos Ω la magnitud de los saltos medidos en X se mantiene constante), y la otra en la cual son medidas las propiedades macroscópicas del sistema y que denotamos por $x = X/\Omega$. Por lo tanto, la probabilidad de que una transición tenga lugar dependerá de x .

Para poder implementar la expansión es necesario llevar las probabilidades de transición a la *forma canónica* [vKa81]

$$W(X/X') = f(\Omega) \left\{ \phi_0\left(\frac{X'}{\Omega}; r\right) + \Omega^{-1} \phi_1\left(\frac{X'}{\Omega}; r\right) + \Omega^{-2} \phi_2 + \dots \right\}, \quad (6.1)$$

donde $r = X - X'$ mide la longitud de los saltos y $f(\Omega)$ es un factor arbitrario que puede ser absorbido en la escala de tiempos.

A partir de las funciones ϕ_λ se definen los *momentos de transición* $\alpha_{\nu,\lambda}$ como

$$\alpha_{\nu,\lambda} = \sum_r r^\nu \phi_\lambda(x; r). \quad (6.2)$$

El coeficiente $\alpha_{1,0}$ juega un rol importante en este tipo de expansiones, ya que determina el tipo de comportamiento del sistema. En los casos en que se satisface la *condición de estabilidad*

$$\alpha'_{1,0}(x) < 0, \quad \forall x, \quad (6.3)$$

se encuentra que al orden más bajo en la expansión la ecuación de evolución que se obtiene es de tipo macroscópica, mientras que al siguiente orden es una de Fokker-Planck lineal, denominada aproximación de ruido lineal.

Sin embargo, en los casos que trataremos se cumple la condición

$$\alpha_{1,0}(x) = 0, \quad \forall x. \quad (6.4)$$

Las ecuaciones maestras caracterizadas por esta condición se denominan de *tipo*

difusivo dado que es posible demostrar [vKa81] que las soluciones macroscópicas son inestables y por ende las fluctuaciones crecen. De hecho, para tiempos cortos su varianza crece linealmente con el tiempo, lo cual es característico del Movimiento Browniano.

Luego de un transitorio, en el cual las fluctuaciones se vuelven del mismo orden que la parte macroscópica, podemos realizar una expansión basándonos en el hecho de que la densidad de probabilidad será una función suave de X y con un ancho del orden de Ω . Por lo tanto, escribiendo la ecuación maestra asintótica del tipo (2.42) en términos de la nueva variable x , y expandiendo en potencias de Ω^{-1} , es posible obtener que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x) = & f(\Omega) \Omega^{-2} \left\{ \left(-\frac{\partial}{\partial x} \alpha_{1,1}(x) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \alpha_{2,0}(x) \right) \right. \\ & \left. + \Omega^{-1} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \alpha_{1,2}(x) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \alpha_{2,1}(x) - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \alpha_{3,0}(x) \right) \right\} \rho(x) \\ & + \mathcal{O}(\Omega^{-4}) , \end{aligned} \quad (6.5)$$

donde hemos hecho uso de las expresiones (6.1), (6.2) y (6.4). La primera línea de la ecuación (6.5), que corresponde a considerar el orden más bajo en la expansión, es la denominada *aproximación de difusión* [vKa81], siendo ésta una ecuación de Fokker-Planck no lineal.

6.2 Obtención de las ecuaciones de Fokker-Planck

A continuación aplicaremos esta metodología a las ecuaciones maestras asintóticas obtenidas en el Capítulo 4. De lo dicho en la sección anterior, observamos que una elección natural del parámetro Ω para nuestro problema será

$$\Omega = \frac{kT}{\hbar\omega} , \quad (6.6)$$

de forma tal que

$$x = \frac{N}{\Omega} = \frac{\hbar\omega N}{kT} \quad (6.7)$$

será la nueva variable a utilizar, ya que en este caso X representa al número de ocupación N .

Con el fin de analizar la ecuación maestra lineal (4.77) escribimos sus probabilidades de transición como

$$W(N/N') = W_l^+ \{ (N+1)\delta_{N',N+1} + e^{-\Omega^{-1}} N\delta_{N',N-1} \}, \quad (6.8)$$

donde hemos usado la relación (4.84). Por lo tanto, en este caso la forma canónica vendrá dada por las funciones

$$\phi_n^l = \begin{cases} x(\delta_{r,-1} + \delta_{r,1}) & n = 0 \\ \delta_{r,1}(-1)^n \left(\frac{x}{n!} - \frac{1}{(n-1)!} \right) & n \geq 1 \end{cases} \quad (6.9)$$

y el factor $f_l(\Omega) = W_l^+ \Omega$. Los momentos de transición, calculados a partir de las funciones (6.9), son

$$\alpha_{\nu,n}^l = \begin{cases} x(1 + (-1)^\nu) & n = 0 \\ (-1)^n \left(\frac{x}{n!} - \frac{1}{(n-1)!} \right) & n \geq 1. \end{cases} \quad (6.10)$$

En el caso de acoplamiento cuadrático podemos escribir a partir de la ecuación maestra no lineal (4.112) sus probabilidades de transición como

$$W(N/N') = W_c^+ \{ (N+1)(N+2)\delta_{N',N+2} + e^{-2\Omega^{-1}} N(N-1)\delta_{N',N-2} \}, \quad (6.11)$$

donde hemos usado la relación (4.117). A partir de esta expresión, podemos hallar

su forma canónica, la cual se expresará como función de

$$\phi_n^c = \begin{cases} x^2(\delta_{r,-2} + \delta_{r,2}) & n = 0 \\ -x\delta_{r,-2} + (3x - 2x^2)\delta_{r,2} & n = 1 \\ \delta_{r,2}(-1)^n 2^{n-1} \left(\frac{1}{(n-2)!} - \frac{3x}{(n-1)!} + \frac{2x^2}{n!} \right) & n \geq 2 \end{cases} \quad (6.12)$$

y de $f_c(\Omega) = W_c^+ \Omega^2$. De este modo, los momentos de transición serán cuadráticos y de la forma

$$\alpha_{\nu,n}^c = \begin{cases} 2^\nu x^2 (1 + (-1)^\nu) & n = 0 \\ 2^\nu (3x - 2x^2 - (-1)^\nu x) & n = 1 \\ 2^{\nu+n-1} (-1)^n \left(\frac{1}{(n-2)!} - \frac{3x}{(n-1)!} + \frac{2x^2}{n!} \right) & n \geq 2 . \end{cases} \quad (6.13)$$

Es interesante notar entonces que para los sistemas que estamos estudiando, además de cumplirse la relación

$$\alpha_{1,0}^l = \alpha_{1,0}^c = 0 , \quad (6.14)$$

se cumple también que

$$\alpha_{3,0}^l = \alpha_{3,0}^c = 0 , \quad (6.15)$$

y por lo tanto, de acuerdo al desarrollo (6.5), es posible trabajar a un orden más en la expansión e igualmente obtener una ecuación de Fokker-Planck.

Con el fin de comparar las ecuaciones halladas en el capítulo anterior mediante la transformada de Wigner con las que hallaremos a continuación, es importante recordar aquí que para utilizar este método partimos de ecuaciones maestras del tipo (2.42), las cuales son válidas en el régimen asintótico. En consecuencia, debemos confrontarlas con las ecuaciones (5.19) y (5.31), las cuales son válidas en dicho límite.

A tal fin, usaremos el hecho de que la transformada de Wigner del operador número \hat{N} es

$$N_W = \frac{H}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} , \quad (6.16)$$

y por lo tanto, podemos hacer la identificación

$$x \rightarrow \beta H - \frac{\Omega^{-1}}{2} \quad (6.17)$$

donde hemos tenido en cuenta la expresión (6.6).

En la situación de acoplamiento lineal, la aproximación de difusión nos permite escribir la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \rho(x) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} (1-x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} x \right\} \rho(x) , \quad (6.18)$$

y agregando un orden más en la expansión obtenemos que

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \rho(x) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} \left((1 - \Omega^{-1}) - x(1 - \frac{\Omega^{-1}}{2}) \right) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(x(1 - \frac{\Omega^{-1}}{2}) + \frac{\Omega^{-1}}{2} \right) \right\} \rho(x) . \quad (6.19)$$

En los resultados anteriores hemos utilizado las expresiones (6.10), la ecuación (6.5), y definimos la nueva escala temporal a través de $\tau = W_t^+ \Omega^{-1} t$.

Si realizamos el cambio de variables (6.17) en las ecuaciones (6.18) y (6.19), obtenemos una Fokker-Planck idéntica a la ecuación (5.19) obtenida mediante la representación de Wigner, donde aparece T en vez de T_W . Esto es esperable dado que según (5.20) y (4.51) se cumple que

$$T_W = T \left(1 + \frac{\Omega^{-2}}{12} - \frac{\Omega^{-4}}{720} + \dots \right) , \quad (6.20)$$

y por lo tanto, en las aproximaciones consideradas se satisface que $T \approx T_W$. En consecuencia, si bien el método de expansión nos conduce al mismo resultado en el límite de Ω grande, la utilización de la expansión en el presente caso no representa ninguna ventaja ya que la ecuación obtenida tiene una validez más restringida que la ecuación (5.19), la cual es siempre de Fokker-Planck y puede ser resuelta analíticamente.

Mencionaremos aquí que dicha ecuación es equivalente a la ecuación de Langevin

$$\dot{x} = \left(\frac{1}{2} - x\right) + x^{\frac{1}{2}}\xi(t) , \quad (6.21)$$

donde $\xi(t)$ representa a un ruido blanco gaussiano. En principio podría pensarse que éste es un proceso estocástico multiplicativo dada la forma del término fluctuante. Sin embargo, si realizamos el cambio de variables

$$y = 2D^{\frac{1}{2}}x^{\frac{1}{2}} , \quad (6.22)$$

obtenemos que la nueva variable satisface la ecuación

$$\dot{y} = \left(\frac{D}{y} - \frac{y}{2}\right) + 4D^{\frac{1}{2}}\xi(t) , \quad (6.23)$$

la cual es de tipo aditivo. En realidad, el termino “aditivo” tiene sentido solamente cuando en la ecuación estocástica

$$\dot{x} = \varphi(x) + \psi(x)\xi(t) \quad (6.24)$$

el término $\varphi(x)$ es lineal [vKa89].

Analizaremos a continuación la situación en la cual el acoplamiento es de tipo cuadrático. Utilizando las expresiones (6.13) en (6.5) y redefiniendo la escala temporal de forma tal que $\tau = 4W_c^+t$, obtenemos que en la aproximación de difusión la evolución del sistema está regida por la ecuación

$$\frac{\partial \rho(x)}{\partial \tau} = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x}x(2-x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}x^2 \right\} \rho(x) , \quad (6.25)$$

la cual es equivalente a la ecuación de Langevin

$$\dot{x} = x - x^2 + x\xi(t) . \quad (6.26)$$

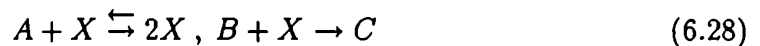
Haciendo uso del cambio de variables definido en (6.17), podemos verificar que la ecuación (6.25) coincide con la hallada mediante la transformada de Wigner dentro del orden de aproximación utilizado.

Aquí es interesante acotar que la ecuación (6.25), o equivalentemente la (6.26), es un caso particular de ciertas ecuaciones halladas anteriormente para otros tipos de sistemas no lineales. Uno de ellos, proveniente de la óptica cuántica, corresponde a un modelo de laser de colores con ruido multiplicativo [Sch89]. De este modelo surge la ecuación estocástica

$$\dot{I} = (\Gamma - \kappa)I - \Gamma I^2 + I\xi(t) , \quad (6.27)$$

donde I representa a la intensidad del campo, y Γ y κ son los parámetros de ganancia y pérdida respectivamente. Por lo tanto, nuestro caso es análogo a la situación en que $\Gamma = 1$ y $\kappa = 0$.

El otro ejemplo proviene de la teoría de reacciones químicas. La concentración n_X de la sustancia X en el proceso autocatalítico



satisface la ecuación [Sch79]

$$\dot{n}_X = (\bar{k}_1 n_A^\circ - \bar{k}_2 n_B^\circ) n_X - \bar{k}_1 n_X^2 + n_X \xi(t) , \quad (6.29)$$

donde \bar{k}_1 , \bar{k}_2 y \bar{k}_1 son las respectivas tasas de reacción y el término fluctuante $\xi(t)$ proviene de las fluctuaciones en las concentraciones n_A° y n_B° de las sustancias A y B .

En consecuencia, nuestra ecuación corresponde al caso en que \bar{k}_1 y el denominado parámetro de umbral $\bar{k}_1 n_A^o - \bar{k}_2 n_B^o$ sean iguales a la unidad.

La ecuación (6.25) es asimismo un caso particular de ciertas ecuaciones de Fokker-Planck no lineales que son resolubles analíticamente [Sch79]. Utilizando el ansatz

$$\rho(x, t) = \rho(x) e^{-\lambda t} , \quad (6.30)$$

el problema consiste en resolver la ecuación

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} x^2 - \frac{\partial}{\partial x} x(2-x) + \lambda_n \right\} \rho_n(x) , \quad (6.31)$$

donde el espectro de autovalores λ_n puede ser en principio tanto discreto como continuo. En el Apéndice E se muestra la resolución de dicha ecuación, cuyas soluciones pueden escribirse en términos de las funciones de Whittaker [Gr65]. La rama discreta del espectro de autovalores sólo contiene dos autovalores $\lambda_0 = 0$ que corresponden al estado estacionario, mientras que la rama continua contiene autovalores tales que $\lambda > 1/4$. De esta forma, verificamos los resultados numéricos que se muestran en la fig.4.2 en el caso en que $\Omega \gg 1$.

Si suponemos una distribución inicial del tipo

$$\rho(x, t = 0) = \delta(x - x_0) , \quad (6.32)$$

la solución de la ecuación (6.25) es entonces

$$\rho(x, t) = e^{-x} + (x x_0)^{-1} e^{(x-x_0)/2} \int_{1/4}^{\infty} N^2(\lambda) W_{1,\zeta}(x_0) W_{1,\zeta}(x) e^{-\lambda t} d\lambda , \quad (6.33)$$

donde $W_{1,\zeta}(x)$ son las funciones de Whittaker con

$$\zeta = i \sqrt{\lambda - \frac{1}{4}} . \quad (6.34)$$

y $N(\lambda)$ son funciones de normalización.

A partir de la distribución (6.33) se puede calcular la evolución de los momentos de orden k , obteniéndose

$$\langle x^k \rangle = k! + x_0^{-1} e^{x_0/2} \int_{1/4}^{\infty} d\lambda N^2(\lambda) W_{1,\zeta}(x_0) \frac{\Gamma(k + \frac{1}{2} - \zeta) \Gamma(k + \frac{1}{2} + \zeta)}{\Gamma(k)} e^{-\lambda t} \quad (6.35)$$

donde $\Gamma(x)$ es la función Gamma.

Concluimos entonces que en esta aproximación la evolución temporal de estos momentos hacia el equilibrio no será en general un decaimiento de tipo exponencial.

Si en lugar de trabajar en la aproximación de difusión (6.25), agregamos un orden más en el desarrollo, obtenemos que la densidad de probabilidad satisface la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \rho(x) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} (\mu + x(2 - \mu) - x^2) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x^2 + \mu x) \right\} \rho(x) , \quad (6.36)$$

donde $\tau = 4W_c^+(1 - \Omega^{-1})t$ y

$$\mu = \frac{\Omega^{-1}}{(1 - \Omega^{-1})} . \quad (6.37)$$

En este caso la ecuación de Langevin asociada es de la forma

$$\dot{x} = \left(\frac{\mu}{2} + x(1 - \mu) - x^2 \right) + \sqrt{x^2 + \mu x} \xi(t) . \quad (6.38)$$

Dado que las ecuaciones (6.25) y (6.36) son unidimensionales, su distribución de equilibrio puede calcularse fácilmente [Ri84], siendo de la forma

$$\rho^e = N e^{-\phi(x)} , \quad (6.39)$$

donde N es una constante de normalización y $\phi(x)$ es el potencial definido como

$$\phi(x) = \ln D_2(x) - \int^x \frac{D_1(x')}{D_2(x')} dx' . \quad (6.40)$$

Por lo tanto, para las ecuaciones citadas se cumple que

$$\phi(x) = x , \quad (6.41)$$

y teniendo en cuenta (6.20), la distribución de equilibrio será la canónica, en concordancia con lo hallado anteriormente.

Es interesante analizar aquí cómo es la ecuación resultante en el caso en que el acoplamiento posea un término cuadrático y uno lineal. De acuerdo a (4.146), las probabilidades de transición son en este caso

$$\begin{aligned} W(N/N') = & a_2^2 W_c^+ \left\{ (N+1)(N+2)\delta_{N',N+2} + e^{-2\Omega^{-1}} N(N-1)\delta_{N',N-2} \right. \\ & \left. + \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^2 \frac{W_l^+}{W_c^+} \left((N+1)\delta_{N',N+1} + e^{-\Omega^{-1}} N\delta_{N',N-1} \right) \right\} , \quad (6.42) \end{aligned}$$

y por lo tanto, para poder hallar su forma canónica es necesario conocer como se comporta el cociente W_l^+/W_c^+ en función del parámetro Ω . Esto se logra mediante la relación (4.142), a partir de la cual obtenemos los siguientes momentos de transición

$$\begin{aligned} \alpha_{2,0} &= \alpha_{2,0}^c , \\ \alpha_{1,1} &= \alpha_{1,1}^c , \\ \alpha_{1,2} &= \alpha_{1,2}^c + 2 \frac{m\omega_o}{\hbar} \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^2 \alpha_{1,1}^l , \\ \alpha_{2,1} &= \alpha_{2,1}^c + 2 \frac{m\omega_o}{\hbar} \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^2 \alpha_{2,0}^l . \quad (6.43) \end{aligned}$$

Introduciendo estos momentos en la ecuación (6.5) arribamos a una ecuación de Fokker-Planck idéntica a la (6.36), en donde el parámetro μ viene dado en este caso por la expresión

$$\mu = \frac{\Omega^{-1}}{(1 - \Omega^{-1})} \left\{ 1 + 2 \frac{m\omega_0}{\hbar} \left(\frac{a_1}{a_2} \right)^2 \right\} . \quad (6.44)$$

Por lo tanto, eligiendo el parámetro μ adecuado la ecuación (6.36) nos permite analizar el caso en que el acoplamiento posea un término lineal y otro cuadrático como así también el caso de acoplamiento cuadrático a un orden más de la aproximación de difusión. Lamentablemente, esta ecuación no es resoluble analíticamente como la (6.25). Una característica esencial de esa ecuación es la presencia de un espectro continuo de autovalores. Es interesante entonces analizar si en este caso se sigue manteniendo esta característica. Para ello, en la siguiente sección transformaremos la ecuación de Fokker-Planck en una del tipo de Schrödinger, de forma tal de poder realizar una discusión cualitativa del espectro de autovalores a partir de la forma del potencial que surge de dicha ecuación.

6.3 Transformación a ecuaciones de Schrödinger

Es posible transformar la ecuación de Fokker-Planck unidimensional

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, t) = \mathbf{L}_{FP} W(x, t) , \quad (6.45)$$

en una en la cual su coeficiente de difusión D sea constante. Utilizando las expresiones (D.7) y (D.8), vemos que ésto puede lograrse mediante el cambio de variables

$$y(x) = \int^x \sqrt{\frac{D}{D_2(x')}} dx' , \quad (6.46)$$

de modo tal que el nuevo coeficiente de deriva adopta la forma

$$D'_1 = \frac{dy}{dx} D_1(x) + \frac{d^2y}{dx^2} D_2(x) , \quad (6.47)$$

y la densidad de probabilidad en el sistema transformado será

$$W'(y, t) = \sqrt{\frac{D_2(x)}{D}} W(x, t) . \quad (6.48)$$

Por otro lado, a partir del potencial ϕ definido en (6.40), puede construirse el operador hermítico

$$\mathbf{L} = e^{\phi/2} \mathbf{L}_{FP} e^{-\phi/2} , \quad (6.49)$$

de modo tal que, si el operador \mathbf{L}_{FP} satisface la ecuación

$$\mathbf{L}_{FP} \varphi_n = -\lambda_n \varphi_n , \quad (6.50)$$

este operador cumple que

$$\mathbf{L} \psi_n = -\lambda_n \psi_n , \quad (6.51)$$

donde las nuevas autofunciones se relacionan con las viejas a través de la relación

$$\psi_n(x) = e^{\phi(x)/2} \varphi_n(x) , \quad (6.52)$$

y los autovalores del problema espectral asociado son iguales a los del problema original.

Para llevar la ecuación (6.45) a una ecuación del tipo de Schrödinger, transformamos ésta mediante el cambio de variables definido en (6.46) y, a partir del potencial (6.40), construimos el operador (6.49). De este modo obtenemos finalmente que [Ri84]

$$\left(D \frac{\partial^2}{\partial y^2} - V_S(y) \right) \psi_n = -\lambda_n \psi_n \quad 0 \leq \lambda_0 < \lambda_1 < \dots , \quad (6.53)$$

donde

$$V_S(y) = \frac{D}{2} \left(\frac{\phi'^2(y)}{2} - \phi''(y) \right) \quad (6.54)$$

Por lo tanto, es posible transformar la ecuación original de Fokker-Planck en una ecuación de tipo Schrödinger con tiempo imaginario $t_{Sch} = -i\hbar t$, masa $m = \hbar^2/2D$ y un potencial definido en la expresión (6.54).

A continuación transformaremos las ecuaciones halladas para distintos acoplamientos con el fin de hallar la forma del potencial V_S asociado.

En la situación de acoplamiento lineal, la transformación de variables requerida será la (6.22), de modo tal que

$$\phi(y) = -\ln y + \frac{y^2}{4D} . \quad (6.55)$$

Por lo tanto, de (6.54) obtenemos que

$$V_S(y) = \frac{y^2}{16D} - \frac{D}{4y^2} - \frac{1}{2} , \quad 0 < y \leq \infty , \quad (6.56)$$

siendo en este caso

$$\rho^e(y) = \frac{y}{2D} \exp\{-y^2/4D\} \quad (6.57)$$

la distribución de equilibrio normalizada correspondiente.

De la figura 6.1 podemos observar que para valores positivos del potencial V_S , éste se comporta en forma análoga a uno de tipo cuadrático. Por lo tanto, y dado que los los autovalores del problema de Schrödinger asociado deben ser mayores que 0, los mismos serán proporcionales a los de un oscilador armónico en concordancia con la expresión (4.96).

A partir de la ecuación (6.25) obtenemos que el cambio de variables

$$y = \sqrt{D} \ln x , \quad (6.58)$$

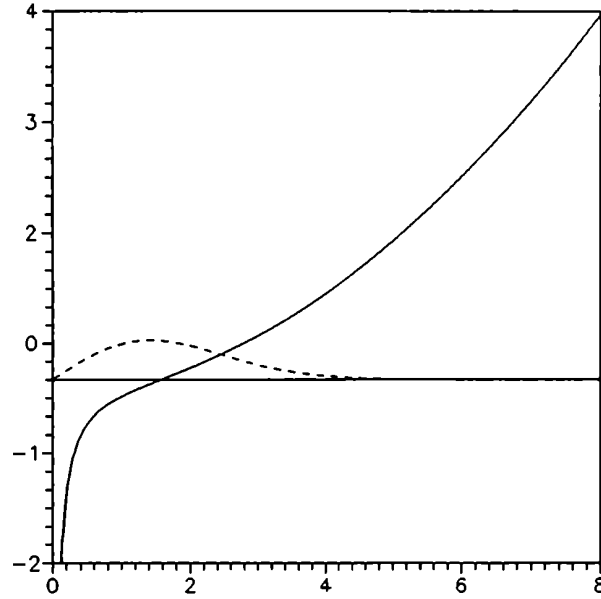
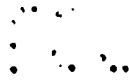


Figura 6.1: Potencial V_S (línea llena) y distribución $\sqrt{D}\rho^e$ (línea punteada) en función de y/\sqrt{D} para el caso de acoplamiento lineal.

nos permite escribir para el caso de acoplamiento cuadrático que

$$\phi(y) = \ln D - \frac{y}{\sqrt{D}} + e^{y/\sqrt{D}}, \quad (6.59)$$

de forma tal que el potencial de Schrödinger asociado a dicha ecuación es

$$V_S(y) = \frac{1}{4}(e^{2y/\sqrt{D}} - 4e^{y/\sqrt{D}} + 1), \quad -\infty \leq y \leq \infty \quad (6.60)$$

y la distribución de equilibrio normalizada

$$\rho^e(y) = \frac{1}{\sqrt{D}} \exp\left\{\frac{y}{\sqrt{D}} - e^{y/\sqrt{D}}\right\}. \quad (6.61)$$

Mencionemos de paso que, dado que la ecuación (6.25) es resoluble analíticamente,

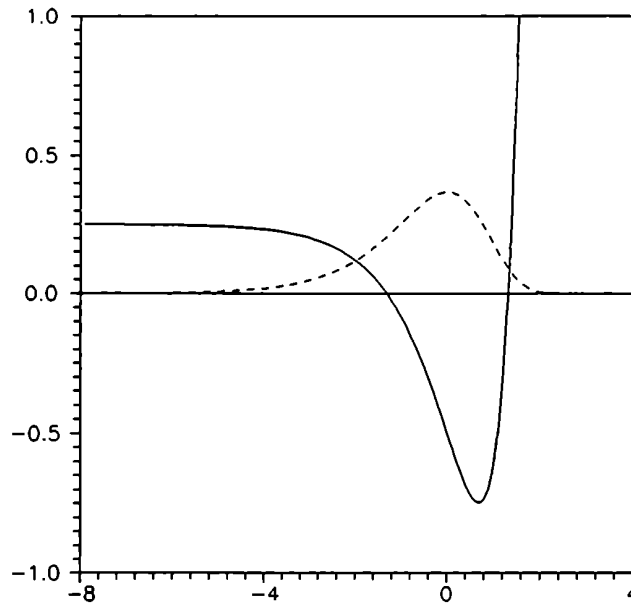


Figura 6.2: Idem fig.6.1 para acoplamiento cuadrático

el problema de Schrödinger con el potencial (6.60) entonces también lo es.

En la Figura 6.2 se muestra el potencial (6.60) y la distribución de equilibrio (6.61). Dicho potencial satisface la condición $V_S(-\infty) = 1/4$ y posee un mínimo en $y = \sqrt{D} \ln 2$. Utilizando la terminología de las ecuaciones de Schrödinger vemos que los autovalores discretos correspondientes a los estados ligados de energía positiva cumplirán que $0 \leq \lambda < 1/4$, mientras que para energías mayores que $1/4$ los estados serán no ligados y los autovalores formarán un continuo. De este modo hemos reobtenido los resultados hallados en la sección anterior.

Finalmente, para transformar la ecuación (6.36) utilizamos el cambio de variables

$$y = \sqrt{D} \ln(2\sqrt{x^2 + \mu x} + 2x + \mu) - \sqrt{D} \ln \mu , \quad (6.62)$$

donde hemos introducido la constante aditiva $\sqrt{D} \ln \mu$ con el fin de que la nueva variable y tome valores entre 0 e ∞ , sin importar el valor del parámetro μ .

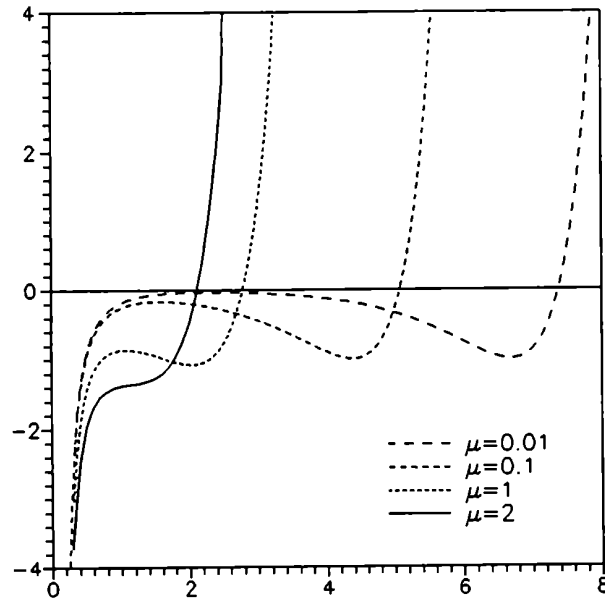


Figura 6.3: Potencial 6.64 en función de y/\sqrt{D} para distintos valores del parámetro μ .

Con esta transformación obtenemos que

$$\phi(y) = \ln D - \left\{ \ln \sinh\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right) - \frac{\mu}{2} \cosh\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right) \right\} , \quad (6.63)$$

de modo tal que el potencial asociado y su distribución de equilibrio son ahora de la forma

$$V(y) = \frac{\mu^2}{16} \sinh^2\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right) - \frac{\mu}{2} \cosh\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right) - \frac{1}{4 \sinh^2\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right)} + \frac{1}{4} , \quad (6.64)$$

y

$$\rho^e(y) = \frac{1}{D} \sinh\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right) \exp\left\{-\frac{\mu}{2} \cosh\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right)\right\} . \quad (6.65)$$

En la Figura 6.3 hemos graficado el potencial (6.64) para distintos valores del parámetro μ . Notemos que a medida que el parámetro μ disminuye, el potencial corta el eje a distancias cada vez más alejadas del origen. Para energías positivas esto implicará que la separación entre los autovalores ira disminuyendo, de forma tal que en el límite $\mu \rightarrow 0$ el “pozo” se hará de ancho infinito y recobramos el continuo de autovalores. Sin embargo, para todo valor finito de μ el espectro será continuo.

Capítulo 7

Conclusiones

En este trabajo nos hemos propuesto profundizar en el estudio de los fenómenos disipativos y difusivos que tienen lugar en un sistema cuántico que se halla acoplado a un reservorio extenso. En este sentido hemos realizado una descripción de un sistema cuántico disipativo sumamente general mediante dos formalismos distintos. En primer lugar hemos obtenido una expresión para la ecuación maestra generalizada en términos de los operadores del sistema y de la función de correlación del reservorio aislado. Posteriormente, hemos hallado la respectiva ecuación de Langevin para la situación en que el reservorio sea de tipo bosónico y el acoplamiento sea lineal en las coordenadas de éste y arbitrario en las del sistema. Escribiendo en este caso las relaciones de fluctuación-disipación cuánticas fue posible relacionar a la parte real de la función de correlación del reservorio con las fluctuaciones y a su parte imaginaria con la disipación.

Al aplicar los resultados precedentes al caso de un oscilador armónico, hemos demostrado que la utilización del acoplamiento completo en las ecuaciones maestras generalizadas nos permite obtener las ecuaciones clásicas correctas. De este modo es posible identificar a los coeficientes de fricción y difusión correspondientes, los cuales se expresan en función de los parámetros microscópicos del oscilador y del

reservorio. La relación entre estos coeficientes es del tipo fluctuación-disipación, cuya dependencia con el reservorio se da sólo a través de la temperatura del mismo, siendo independiente de su naturaleza bosónica o fermiónica. Además es posible expresar a las tasas de transición que surgen al escribir la ecuación maestra asintótica en función de dichos coeficientes, de forma tal de poder interpretar a las mismas en términos de procesos microscópicos de decaimiento y reexcitación.

Asimismo, hemos demostrado que el uso del acoplamiento completo permite obtener la evolución temporal para todo tiempo mayor que el de decaimiento de las correlaciones del reservorio, mientras que al implementar la aproximación de onda rotante a las ecuaciones maestras generalizadas, las ecuaciones obtenidas son válidas en los casos en que la matriz densidad sea diagonal en las cercanías del equilibrio.

Si suponemos que el acoplamiento con el reservorio es lineal en las coordenadas del oscilador, las ecuaciones de evolución que se obtienen para los momentos de primer y segundo orden son resolubles analíticamente bajo la hipótesis Markoviana, sin necesidad de especificar el tipo de reservorio. En este caso el régimen del oscilador será exclusivamente subamortiguado, mientras que para situaciones no Markovianas o de acoplamientos fuertes el régimen puede ser sobreamortiguado o crítico.

Por otro lado, la utilización de acoplamientos no lineales en las coordenadas del oscilador nos lleva a obtener ecuaciones de evolución macroscópicas en las cuales los términos disipativos son dependientes de la posición. A través de la ecuación de Langevin correspondiente hemos visto que este hecho va acompañado necesariamente por la presencia de fluctuaciones que dependen del estado del sistema (“ruido interno multiplicativo”). En estos casos, las ecuaciones maestras asintóticas poseen probabilidades de transición no lineales en el número de cuantos del oscilador y las ecuaciones de momentos macroscópicas forman una jerarquía acoplada e infinita que no puede ser truncada a priori en forma obvia.

Posteriormente, hemos transformado las ecuaciones maestras mediante la representación de Wigner. De este modo es posible demostrar que la ecuación de Fokker-Planck obtenida en la situación de acoplamiento lineal completo coincide con la de Kramers en el límite clásico; y que en el caso general posee un coeficiente de difusión adicional. Cuando el acoplamiento es de tipo cuadrático, la ecuación que se obtiene deja de ser de Fokker-Planck debido a la naturaleza cuántica del sistema, donde

los términos que acompañan a las derivadas parciales de orden mayor a dos son proporcionales a \hbar^2 . Implementando un procedimiento análogo al de eliminación adiabática puede demostrarse que las ecuaciones obtenidas bajo la aproximación de onda rotante son equivalentes a las anteriores en los límites asintótico y de baja fricción.

Finalmente hemos hallado las ecuaciones de Fokker-Planck en la aproximación de difusión y a un orden más en el desarrollo obtenido mediante la expansión $1/\Omega$. Las mismas coinciden con las halladas mediante la transformada de Wigner dentro de la aproximación utilizada. En particular, es posible resolver analíticamente la ecuación que se obtiene en la aproximación de difusión para el caso de acoplamiento cuadrático.

Para concluir, mencionemos que el material elaborado en esta Tesis prevee futuras aplicaciones en materia condensada, en particular al ^3He , especializando los resultados obtenidos para el caso en que el reservorio sea de tipo fermiónico.

Apéndice A

Coeficientes intervinientes en las ecuaciones maestras

A.1 Acoplamiento lineal

De las definiciones (4.21), (4.22), (4.49) y (4.50) es posible demostrar que se satisfacen las relaciones

$$C \pm \frac{\hbar\omega_o}{2}\nu = \lambda^2 \Re \int_0^\infty d\tau e^{\pm i\omega_o\tau} \Phi(\tau), \quad (\text{A.1})$$

$$\mp m(\omega_o\delta \pm \frac{\hbar\omega_o^2}{2}) = \lambda^2 \Im \int_0^\infty d\tau e^{\pm i\omega_o\tau} \Phi(\tau). \quad (\text{A.2})$$

Si utilizamos el espectro de las funciones de correlación (2.45) y la propiedad (2.46), podemos expresar a las integrales temporales involucradas en estas dos ecuaciones como

$$\int_0^\infty d\tau e^{-i\omega_o\tau} \Phi(\tau) = \pi \Phi[\omega_o] + i\mathcal{P} \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\Phi[\omega]}{\omega - \omega_o}, \quad (\text{A.3})$$

$$\int_0^\infty d\tau e^{i\omega_o\tau} \Phi(\tau) = \pi e^{\beta\hbar\omega_o} \Phi[\omega_o] + i\mathcal{P} \int_{-\infty}^\infty d\omega e^{\beta\hbar\omega} \frac{\Phi[\omega]}{\omega + \omega_o}, \quad (\text{A.4})$$

donde hemos hecho uso de la fórmula

$$\int_0^\infty dx e^{\pm i\Delta x} = \pi \delta(\Delta) \pm i\mathcal{P}\left(\frac{1}{\Delta}\right), \quad (\text{A.5})$$

siendo \mathcal{P} la parte principal de Cauchy.

Insertando las expresiones (A.3) y (A.4) en la (A.1) obtenemos que las constantes de difusión y fricción resultan ser

$$C = \frac{\lambda^2}{2} \pi \Phi[\omega_o] (1 + e^{\beta \hbar \omega_o}) , \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\hbar \omega_o}{2} \nu = \frac{\lambda^2}{2} \pi \Phi[\omega_o] (e^{\beta \hbar \omega_o} - 1) , \quad (\text{A.7})$$

de modo tal que satisfacen la relación

$$C = \frac{\hbar \omega_o}{2} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega_o}{2}\right) \nu . \quad (\text{A.8})$$

Análogamente, podemos demostrar que las constantes δ y ω_r satisfacen las relaciones

$$m(\omega_o \delta - \frac{\hbar \omega_r^2}{2}) = \lambda^2 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\Phi[\omega]}{\omega - \omega_o} , \quad (\text{A.9})$$

$$m(\omega_o \delta + \frac{\hbar \omega_r^2}{2}) = \lambda^2 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{\beta \hbar \omega} \frac{\Phi[\omega]}{\omega - \omega_o} , \quad (\text{A.10})$$

de donde se sigue que

$$2m\omega_o \delta = \lambda^2 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (1 + e^{\beta \hbar \omega}) \frac{\Phi[\omega]}{\omega - \omega_o} , \quad (\text{A.11})$$

$$\hbar m \omega_r^2 = \lambda^2 \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (e^{\beta \hbar \omega} - 1) \frac{\Phi[\omega]}{\omega - \omega_o} . \quad (\text{A.12})$$

A.2 Acoplamiento cuadrático

Evaluaremos a continuación los términos integrales que aparecen en la ecuación de evolución (4.100), correspondiente a la situación de acoplamiento cuadrático, en función de los parámetros intervinientes en el caso lineal.

A partir de las definiciones (4.103), (4.104) y (4.49), podemos demostrar que

$$\lambda^2 \int_0^\infty d\tau \sin^2(\omega_o \tau) \Re\{\Phi(\tau)\} = \frac{1}{2}\alpha - C(2\omega_o) , \quad (\text{A.13})$$

$$\lambda^2 \int_0^\infty d\tau \cos^2(\omega_o \tau) \Re\{\Phi(\tau)\} = \frac{1}{2}\alpha + C(2\omega_o) , \quad (\text{A.14})$$

y usando la expresión (4.50), podemos ver que

$$\frac{2\lambda^2}{m\omega_o} \int_0^\infty d\tau \sin(2\omega_o \tau) \Re\{\Phi(\tau)\} = -4\delta(2\omega_o) . \quad (\text{A.15})$$

Para calcular los términos restantes debemos integrar por partes y tener en cuenta que por hallarnos en el régimen Markoviano la función $\mu(t)$ debe decaer en forma rápida. De este modo obtenemos finalmente que

$$-\frac{4\lambda^2}{m\hbar} \int_0^\infty d\tau \cos^2(\omega_o \tau) \Im\{\Phi(\tau)\} = 2\omega' , \quad (\text{A.16})$$

$$-\frac{\lambda^2}{\hbar\omega_o} \int_0^\infty d\tau \sin(2\omega_o \tau) \Im\{\Phi(\tau)\} = \nu , \quad (\text{A.17})$$

$$\int_0^\infty d\tau \sin^2(\omega_o \tau) \Im\{\Phi(\tau)\} = 0 . \quad (\text{A.18})$$

Apéndice B

Reservorio bosónico y disipación Ohmica

B.1 Función de correlación

A partir de la ecuación (3.3) podemos escribir que las partes real e imaginaria de la función de correlación en el caso de reservorio bosónico son

$$\Re\{\Phi(\tau)\} = \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha}^2 (2n_{\alpha} + 1) \cos(\omega_{\alpha}\tau) , \quad (\text{B.1})$$

$$\Im\{\Phi(\tau)\} = - \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha}^2 \sin(\omega_{\alpha}\tau) . \quad (\text{B.2})$$

Si pasamos al continuo según la expresión (3.6) y utilizamos la densidad espectral (3.8) correspondiente a la situación de disipación Ohmica, hallamos que

$$\Re\{\Phi(\tau)\} = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\omega}{\omega^2 + \gamma^2} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) \cos(\omega\tau) , \quad (\text{B.3})$$

$$\Im\{\Phi(\tau)\} = - \frac{\hbar^2 \gamma^2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\omega}{\omega^2 + \gamma^2} \sin(\omega\tau) . \quad (\text{B.4})$$

La parte imaginaria se calcula de forma inmediata, obteniéndose que

$$\Im\{\Phi(\tau)\} = - \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2} e^{-\gamma\tau} , \quad (\text{B.5})$$

y, por lo tanto, haciendo uso de la relación (3.4), se sigue que el núcleo disipativo $K_{ij}(t)$ es de la forma

$$\hbar K_{ij}(t) = \lambda^2 \gamma e^{-\gamma t} , \quad (\text{B.6})$$

el cual en el límite $\gamma \rightarrow \infty$ se reduce a la expresión

$$\hbar K_{ij}(t) = \frac{\lambda^2}{2} \delta(t) , \quad (\text{B.7})$$

siendo $\delta(t)$ la función delta de Dirac.

Utilizando los desarrollos en fracciones parciales

$$\cot(x) = \frac{1}{x} + 2x \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{x^2 - (k\pi)^2} , \quad (\text{B.8})$$

$$\coth(x) = \frac{1}{x} + 2x \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{x^2 + (k\pi)^2} , \quad (\text{B.9})$$

podemos demostrar que

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x}{x^2 + b^2} \cos(ax) \coth(\pi x) = \frac{\pi}{2} \cot(\pi b) e^{-ab} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{b^2 - k^2} e^{-ak} , \quad (\text{B.10})$$

y por lo tanto, de la ecuación (B.3) se sigue que la parte real de la función de correlación es en este caso

$$\begin{aligned} \Re\{\Phi_{B_i B_j}(\tau)\} &= \mu_{ij} \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2} \left\{ \cot\left(\frac{\beta \hbar \gamma}{2}\right) e^{-\gamma \tau} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{8\pi k}{(\beta \hbar \gamma)^2 - (2\pi k)^2} e^{-(2\pi k \tau)/(\beta \hbar)} \right\} . \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Es importante destacar que esta expresión, pese a los términos incluidos dentro de la sumatoria, es siempre convergente.

B.2 Evaluación de los coeficientes

A continuación hallaremos la forma que toman los parámetros intervinientes en las ecuaciones maestras para el caso de reservorio bosónico y disipación de tipo Ohmica.

A partir de las expresiones (B.2) y (B.2), la transformada de Fourier de la función de correlación se escribe como

$$\Phi[\omega] = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{\pi} \frac{\omega}{\omega^2 + \gamma^2} \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}, \quad (\text{B.12})$$

y por lo tanto, de las expresiones (A.6) y (A.7) es sencillo verificar que las constantes de difusión y fricción se escriben en este caso como

$$C = \lambda^2 \hbar \frac{\hbar \omega_o}{2} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega_o}{2}\right), \quad (\text{B.13})$$

$$\nu = \lambda^2 \hbar, \quad (\text{B.14})$$

donde hemos usado el hecho de que $\omega_o \ll \gamma$ ya que nos hallamos en el régimen Markoviano.

Asimismo, utilizando la definición (4.22) de ω_r junto con la expresión (B.5), obtenemos que

$$\omega_r^2 = \lambda^2 \frac{\hbar \gamma}{m}, \quad (\text{B.15})$$

mientras que

$$\delta = -\lambda^2 \frac{\hbar^2}{8m} \left(\cot\left(\frac{\beta \hbar \gamma}{2}\right) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(8\pi k)(\beta \hbar \gamma)^2}{[(\beta \hbar \gamma)^2 - (2\pi k)^2][(\beta \hbar \omega_o)^2 + (2\pi k)^2]} \right) \quad (\text{B.16})$$

se obtiene a partir de la definición (4.50) y de la expresión (B.11).

Apéndice C

Segundos momentos en el régimen no Markoviano

Para analizar el comportamiento no Markoviano de las ecuaciones acopladas (4.41), (4.42) y (4.43) para los momentos de orden dos en el régimen no Markoviano, es conveniente integrar las mismas por partes. De este modo obtenemos que

$$\langle \dot{Q}^2 \rangle_t = \frac{2}{m} \langle \{QP\} \rangle_t, \quad (\text{C.1})$$

$$\begin{aligned} \langle \dot{P}^2 \rangle_t &= -2m\Omega^2 \langle \{QP\} \rangle_t + 2\lambda^2 \int_0^t d\tau \cos(\omega_0\tau) \Re\{\Phi(\tau)\} \\ &\quad - 2\hbar^2 \left(\mu_c(t) \langle \{QP\} \rangle_0 + \int_0^t d\tau [\omega_0 \mu_s(\tau) \langle \{QP\} \rangle_{t-\tau} + \mu_c(\tau) \langle \dot{Q}P \rangle_{t-\tau}] \right) \\ &\quad + 2\hbar^2 m\omega_0 \left(\mu_s(t) \langle Q^2 \rangle_0 - \int_0^t d\tau [\omega_0 \mu_c(\tau) \langle Q^2 \rangle_{t-\tau} - \mu_s(\tau) \langle \dot{Q}^2 \rangle_{t-\tau}] \right), \quad (\text{C.2}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \{\dot{Q}P\} \rangle_t &= \frac{\langle P^2 \rangle_t}{m} - m\Omega^2 \langle Q^2 \rangle_t + \frac{\lambda^2}{m\omega_0} \int_0^t d\tau \sin(\omega_0\tau) \Re\{\Phi(\tau)\} \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{m\omega_0} \left(\mu_s(t) \langle \{QP\} \rangle_0 - \int_0^t d\tau [\omega_0 \mu_c(\tau) \langle \{QP\} \rangle_{t-\tau} - \mu_s(\tau) \langle \{\dot{Q}P\} \rangle_{t-\tau}] \right) \\ &\quad + \hbar^2 \left(\mu_s(c) \langle Q^2 \rangle_0 + \int_0^t d\tau [\omega_0 \mu_s(\tau) \langle Q^2 \rangle_{t-\tau} + \mu_c(\tau) \langle \dot{Q}^2 \rangle_{t-\tau}] \right), \quad (\text{C.3}) \end{aligned}$$

donde hemos definido las cantidades

$$\mu_s(t) = \mu(t) \sin(\omega_0 t) , \quad (C.4)$$

$$\mu_c(t) = \mu(t) \cos(\omega_0 t) . \quad (C.5)$$

Si aplicamos la transformada de Laplace a estas ecuaciones, deberemos evaluar las convoluciones que contienen a los términos μ_s y μ_c . La transformada de dichos términos para el modelo de reservorio bosónico estudiado es

$$\tilde{\mu}_s(s) = \frac{\lambda^2}{\hbar} \frac{\gamma \omega_0}{(s + \gamma)^2 + \omega_0^2} , \quad (C.6)$$

$$\tilde{\mu}_c(s) = \frac{\lambda^2}{\hbar} \frac{\gamma(s + \gamma)}{(s + \gamma)^2 + \omega_0^2} , \quad (C.7)$$

y por lo tanto

$$\tilde{\mu}_c(s) = \frac{s + \gamma}{\omega_0} \tilde{\mu}_s(s) . \quad (C.8)$$

Finalmente, las ecuaciones para las transformadas de Laplace de los segundos momentos, dispuestas en forma matricial, son

$$\begin{pmatrix} s & 0 & -\frac{2}{m} \\ 2m\hbar^2\omega_0\gamma\tilde{\mu}_s(s) & s & 2A(s) \\ A(s) & -\frac{1}{m} & s - \frac{\hbar^2\gamma}{m\omega_0}\tilde{\mu}_s(s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \widetilde{Q^2} \rangle \\ \langle \widetilde{P^2} \rangle \\ \langle \widetilde{\{QP\}} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle Q^2 \rangle_0 \\ \langle P^2 \rangle_0 + 2\tilde{C} \\ \langle \{QP\} \rangle_0 - \tilde{\delta} \end{pmatrix} \quad (C.9)$$

donde

$$A(s) = m\Omega^2 + \frac{\hbar^2}{\omega_0} \tilde{\mu}_s(s)(s^2 + s\gamma + \omega_0^2) , \quad (C.10)$$

y $2\tilde{C}$ y $\tilde{\delta}$ corresponden a las transformadas de los segundos términos de las ecuaciones (C.2) y (C.3) respectivamente.

Las soluciones de la ecuacion matricial (C.9) son

$$\begin{aligned} \langle \widetilde{Q^2} \rangle(s) = & \frac{1}{\Delta} \left\{ \langle Q^2 \rangle_0 \left(s \left(s - \frac{\hbar^2 \gamma}{m \omega_0} \tilde{\mu}_s(s) \right) + \frac{2}{m} A(s) \right) \right. \\ & \left. + \frac{2}{m^2} (\langle P^2 \rangle_0 + 2\tilde{C}(s)) + \frac{2s}{m} (\langle \{QP\} \rangle_0 - \tilde{\delta}(s)) \right\} , \quad (\text{C.11}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \widetilde{P^2} \rangle(s) = & \frac{1}{\Delta} \left\{ \langle Q^2 \rangle_0 \left(2A^2(s) - 2m\hbar^2\omega_0\gamma\tilde{\mu}_s(s) \left(s - \frac{\hbar^2 \gamma}{m \omega_0} \tilde{\mu}_s(s) \right) \right) \right. \\ & + (\langle P^2 \rangle_0 + 2\tilde{C}(s)) \left(s \left(s - \frac{\hbar^2 \gamma}{m \omega_0} \tilde{\mu}_s(s) \right) + \frac{2}{m} A(s) \right) \\ & \left. - (\langle \{QP\} \rangle_0 - \tilde{\delta}(s)) (4\hbar^2\omega_0\gamma\tilde{\mu}_s(s) + 2sA(s)) \right\} , \quad (\text{C.12}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \widetilde{\{QP\}} \rangle(s) = & \frac{1}{\Delta} \left\{ -2 \langle Q^2 \rangle_0 (\hbar^2\omega_0\gamma\tilde{\mu}_s(s) + sA(s)) \right. \\ & \left. + \frac{s}{m} (\langle P^2 \rangle_0 + 2\tilde{C}(s)) + s^2 (\langle \{QP\} \rangle_0 - \tilde{\delta}(s)) \right\} , \quad (\text{C.13}) \end{aligned}$$

donde

$$\Delta = s^2 \left(s - \frac{\hbar^2 \gamma}{m \omega_0} \tilde{\mu}_s(s) \right) + 4 \frac{\hbar^2 \omega_0 \gamma}{m} \tilde{\mu}_s(s) + \frac{4}{m} s A(s) \quad (\text{C.14})$$

es el determinante de la matriz definida en (2.44). Por lo tanto, para resolver completamente el sistema se deben hallar las raíces del polinomio de grado cinco definido por Δ .

Apéndice D

Transformación de variables y coeficientes

Analizaremos aquí cómo se transforman los coeficientes de una ecuación de la forma

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x_i} D_i + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij} - \frac{\partial^3}{\partial x_i \partial x_j \partial x_l} D_{ijl} \right\} , \quad (\text{D.1})$$

ante una transformación de variables del tipo

$$x'_i = x'_i(\{x\}) . \quad (\text{D.2})$$

Debido a que al cambiar de sistema las probabilidades en los respectivos elementos de volumen no cambian, se cumple que

$$W' = JW , \quad (\text{D.3})$$

donde W y W' son, respectivamente, las probabilidades en el sistema original y en el transformado respectivamente y J es el Jacobiano de la transformación.

Utilizando la regla de la cadena, obtenemos que

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x'_k} \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} J , \quad (\text{D.4})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{1}{J} \frac{\partial^2}{\partial x'_k \partial x'_r} \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} \frac{\partial x'_r}{\partial x_j} J - \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x'_k} \frac{\partial^2 x'_k}{\partial x_i \partial x_j} J , \quad (\text{D.5})$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^3}{\partial x_i \partial x_j \partial x_l} &= \frac{1}{J} \frac{\partial^3}{\partial x'_k \partial x'_r \partial x'_s} \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} \frac{\partial x'_r}{\partial x_j} \frac{\partial x'_s}{\partial x_l} J \\
&\quad - \frac{1}{J} \frac{\partial^2}{\partial x'_k \partial x'_r} \left\{ \frac{\partial^2 x'_k}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\partial x'_r}{\partial x_l} + \frac{\partial^2 x'_k}{\partial x_i \partial x_l} \frac{\partial x'_r}{\partial x_j} + \frac{\partial^2 x'_r}{\partial x_j \partial x_l} \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} \right\} J \\
&\quad + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x'_k} \frac{\partial^3 x'_k}{\partial x_i \partial x_j \partial x_l} J .
\end{aligned} \tag{D.6}$$

Si insertamos las expresiones (D.4) a (D.6) en la ecuación (D.1) obtenemos que los nuevos coeficientes se relacionan con los originales a través de las expresiones

$$D'_k = \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} D_i + \frac{\partial^2 x'_k}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij} + \frac{\partial^3 x'_k}{\partial x_i \partial x_j \partial x_l} D_{ijl} , \tag{D.7}$$

$$\begin{aligned}
D'_{kr} &= \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} \frac{\partial x'_r}{\partial x_j} D_{ij} \\
&\quad + \left\{ \frac{\partial^2 x'_k}{\partial x_i \partial x_j} \frac{\partial x'_r}{\partial x_l} + \frac{\partial^2 x'_k}{\partial x_i \partial x_l} \frac{\partial x'_r}{\partial x_j} + \frac{\partial^2 x'_r}{\partial x_j \partial x_l} \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} \right\} D_{ijl} ,
\end{aligned} \tag{D.8}$$

$$D'_{krs} = \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} \frac{\partial x'_r}{\partial x_j} \frac{\partial x'_s}{\partial x_l} D_{ijl} . \tag{D.9}$$

Daremos a continuación los coeficientes transformados de las ecuaciones (5.10) y (5.29) si utilizamos el cambio de variables $Q, H(Q, P)$. Para la primera de dichas ecuaciones se obtiene que

$$D_Q = m\omega_o \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2} , \tag{D.10}$$

$$D_H = m\omega_o \omega_r^2 Q \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2} - 2\frac{\nu}{m} H + \nu\omega_o^2 Q^2 + \frac{C}{m} , \tag{D.11}$$

$$D_{H,Q} = -\frac{\delta\omega_o}{2} \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2} , \tag{D.12}$$

$$D_{H,H} = C\omega_o^2 \frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2 - \delta m\omega_o^3 Q \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2}, \quad (\text{D.13})$$

mientras que para la segunda

$$D_Q = m\omega_o \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2}, \quad (\text{D.14})$$

$$D_H = 2m\omega_o\omega_r^2 Q^3 \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2} - \frac{\nu}{m} \left(\frac{\hbar^2}{m} - 4m\omega_o^2 Q^4 + 8HQ^2 \right) - \frac{4}{m^2\omega_o^2} (\alpha - C_c)H + 4\frac{\alpha}{m} Q^2, \quad (\text{D.15})$$

$$D_{H,Q} = -2\delta_c\omega_o Q^2 \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2} - \frac{(\alpha - C_c)}{m} Q \left(\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2 \right), \quad (\text{D.16})$$

$$D_{H,H} = 8\frac{C_c}{m} HQ^2 - 4C_c\omega_o^2 Q^4 + 4\delta_c m\omega_o^3 Q \left(\left(\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2 \right)^{3/2} - Q^2 \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2} \right) - \frac{3}{2} \hbar^2 m\omega_o\omega_r^2 Q \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2} - \frac{\hbar^2}{m} \frac{\nu}{2m} H, \quad (\text{D.17})$$

$$D_{H,H,Q} = \frac{2}{3} \frac{\nu}{m^2} (\hbar^2 m\omega_o^2 Q^2 - 2QH), \quad (\text{D.18})$$

$$D_{H,H,H} = -\hbar^2 \omega_o^3 \left(\frac{m\omega_r^2}{2} Q \left(\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2 \right)^{3/2} + \nu\omega_o^2 Q^2 \sqrt{\frac{2H}{m\omega_o^2} - Q^2} \right) \quad (\text{D.19})$$

Apéndice E

Resolución de las ecuaciones diferenciales (5.18) y (6.31)

E.1 Acoplamiento lineal en la aproximación de onda ro- tante

Con el fin de resolver la ecuación (5.18)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho w(H, \phi, t) = & \left\{ \frac{\partial}{\partial \phi} \omega_o \left(1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_o^2}\right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \frac{C}{4mH} \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{\nu}{m} H - \frac{C}{m}\right) + \frac{\partial^2}{\partial H^2} \frac{C}{m} H \right\} \rho w(H, \phi, t) , \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

propondremos una solución del tipo

$$\rho w(H, \phi, t) = \rho(H) e^{\pm ik\phi} e^{-\frac{\nu}{m} \lambda^{\pm} t} . \quad (\text{E.2})$$

y haremos el cambio de variables $x = \nu H/C$. De este modo obtenemos la ecuación diferencial

$$\left(x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (1+x) \frac{\partial}{\partial x} + (\lambda^{\pm} + 1 - \frac{k^2}{4x} \pm ik \frac{m}{\nu} \omega_o \left(1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_o^2}\right)) \right) \rho(x) = 0 , \quad (\text{E.3})$$

que tiene por solución a las funciones [Abr65]

$$\rho(x) = x^{k/2} e^{-x} \mathbf{L}_n^{(k)}(x) \quad (\text{E.4})$$

donde $\mathbf{L}_n^{(k)}(x)$ son los polinomios de Laguerre generalizados y los autovalores λ^\pm son de la forma

$$\lambda^\pm = \frac{\nu}{m} \left(n + \frac{k}{2} \right) \pm ik\omega_o \left(1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_o^2} \right), \quad n, k = 0, 1, 2, \dots, \quad (\text{E.5})$$

Por lo tanto, las soluciones de la ecuación (E.1) resultan ser

$$\rho_W(H, \phi, t) = (\nu H/C)^{k/2} e^{-\nu H/C} \mathbf{L}_n^{(k)}(\nu H/C) e^{\pm ik\phi} e^{-\frac{\nu}{m} \lambda^\pm t} \quad (\text{E.6})$$

E.2 Acoplamiento cuadrático en la aproximación de difusión

Si para resolver la ecuación (6.31) proponemos una densidad de probabilidad del tipo

$$\rho(x) = e^{-x} R(x), \quad (\text{E.7})$$

la función $R(x)$ satisface la ecuación diferencial

$$R'' + \left(\frac{2}{x} - 1 \right) R' + \lambda R = 0, \quad (\text{E.8})$$

de forma tal que $x_o = 0$ es un punto singular regular.

Con la transformación

$$R(x) = W(x)S(x), \quad (\text{E.9})$$

siendo

$$S(x) = x^{-1} e^{x/2} , \quad (\text{E.10})$$

podemos llevar la ecuación (E.8) a su forma normal

$$W'' + \left(\frac{\lambda}{x^2} + \frac{1}{x} - \frac{1}{4} \right) W = 0 , \quad (\text{E.11})$$

siendo esta una ecuación diferencial de Whittaker [Gr65]. La misma puede resolverse mediante la función

$$W(x) = x^{v_{1,2} + \frac{1}{2}} e^{-x/2} \phi\left(v_{1,2} - \frac{1}{2}, 2v_{1,2} + 1; x\right) , \quad (\text{E.12})$$

donde $\phi(a, b; x)$ son las funciones hipergeométricas y

$$v_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \lambda} . \quad (\text{E.13})$$

Insertando (E.12) y (E.10) en (E.7), obtenemos dos soluciones linealmente independientes para la ecuación (6.31), las cuales son

$$\rho^{1,2}(x) = x^{v_{1,2} - \frac{1}{2}} e^{-x} \phi\left(v_{1,2} - \frac{1}{2}, 2v_{1,2} + 1; x\right) . \quad (\text{E.14})$$

La convergencia de la solución en la región asintótica $x \rightarrow \infty$, sólo se garantiza si

$$v = \frac{1}{2} - n , \quad n = 0, 1, 2, \dots , \quad (\text{E.15})$$

y por lo tanto los autovalores serán de la forma

$$\lambda_n = n(1 - n) . \quad (\text{E.16})$$

Además, la convergencia de la condición de normalización

$$\int_0^{\infty} \frac{\rho_n^2(x)}{\rho_0(x)} dx = 1 \quad (\text{E.17})$$

en el origen, es posible sólo si $2v \geq 1$. Estas condiciones son satisfechas simultáneamente por la autofunción $\rho^1(x)$. Además, el único valor posible para n es $n = 0$, el cual corresponde al autovalor $\lambda_0 = 0$ de la situación estacionaria

$$\rho_0 = e^{-x} . \quad (\text{E.18})$$

El espectro obtenido no puede ser completo, existiendo entonces una rama continua del mismo [Sch79]. Las soluciones de (E.11) en este caso son las funciones de Whittaker [Gr65]

$$W_{1,v} = \frac{\Gamma(-2v)}{\Gamma(-\frac{1}{2}-v)} M_{1,v}(x) + \frac{\Gamma(2v)}{\Gamma(-\frac{1}{2}+v)} M_{1,-v}(x) , \quad (\text{E.19})$$

donde

$$M_{1,v} = x^{v+\frac{1}{2}} e^{-x/2} \phi(v - \frac{1}{2}, 2v + 1; x) , \quad (\text{E.20})$$

y

$$v = i\sqrt{\lambda - \frac{1}{4}} . \quad (\text{E.21})$$

En este caso el espectro está conformado por aquellos autovalores reales que satisfacen la relación $\lambda \geq 1/4$.

Bibliografía

- [Abr65] M.Abramowitz y I.Stegun, *Handbook of Mathematical functions*, (Dover, N.Y., 1965).
- [Ag74] G.S.Agarwal, *Springer Tracts in Mod.Phys.* **70** (1974).
- [As85] C.Aslangul, N.Pottier y D.Saint-James, *J.Physique* **46** (1985) 2031.
- [Bo67] R.Bonifacio y F.Haake, *Z.Phys.***200** (1967) 526.
- [Ca87] H.M.Cataldo, E.S.Hernández y C.O.Dorso, *Physica A***142** (1987) 498.
- [Ca88] H.M.Cataldo y E.S.Hernández, *J.Stat.Phys.***50** (1988) 383.
- [Ca88b] H.M.Cataldo y E.S.Hernández, *J.Stat.Phys.***53** (1988) 673.
- [Ca90] H.M.Cataldo, *Physica A***165** (1990) 249.
- [Cal81] A.O.Caldeira y A.J.Leggett, *Phys.Rev.Lett.***46** (1981) 211.
- [Cal83] A.O.Caldeira y A.J.Leggett, *Ann.Phys.***149** (1983) 374.
- [Cal83b] A.O.Caldeira y A.J.Leggett, *Physica A***121** (1983) 587.
- [Co85] E.Cortes, B.West y K.Lindenberg, *J.Chem.Phys.***82** (1985) 2708.
- [Ch77] S.Chaturvedi, P.Drummond y D.F.Walls, *J.Phys.***A10** (1977) 187.
- [Dek77] H.Dekker, *Phys.Rev.***A16** (1977) 2116.
- [Do82] C.O.Dorso y E.S.Hernández, *Phys.Rev.***C26** (1982) 528.
- [Do84] C.O.Dorso y E.S.Hernández, *Phys.Rev.***C29** (1984) 1523.
- [Dr80] P.D.Drummond y C.W.Gardiner, *J.Phys.***A13** (1980) 2353.
- [Dr80b] P.D.Drummond y D.F.Walls, *J.Phys.***A13** (1980) 725.
- [Dr81] P.D.Drummond, C.W.Gardiner y D.F.Walls, *Phys.Rev.***A24** (1981) 914.
- [Fo65] G.W.Ford, H.Kac y P.Mazur, *J.Math.Phys.***6** (1965) 504.

- [Fo87] G.W.Ford y M.Kac, *J.Stat.Phys.***46** (1987) 803.
- [Fo88] G.W.Ford, J.T.Lewis y R.F.O'Connel, *Phys.Rev.***A37** (1988) 4419.
- [Gl63] R.J.Glauber, *Phys.Rev.***131** (1963) 2760.
- [Gr65] I.S.Gradsteyn y I.M.Ryshik, *Table of Integrals, Series and Products*, (Academic, N.Y., 1965).
- [Gra82] H.Grabert, *Springer Tracts in Mod.Phys.***95** (1982).
- [Gro46] H.J.Groenewold, *Physica* **12** (1946) 405.
- [Ha73] F.Haake, *Springer Tracts in Mod.Phys.***66** (1973).
- [Ha85] F.Haake y R.Reibold, *Phys.Rev.***A32** (1985) 2462.
- [Hak64] H.Haken, *Z.Phys.***184** (1964) 96.
- [Hak70] H.Haken, *Encyclopedia of Physics*, vol.XXV/2c (Springer, Berlin-Heilderberg-New York, 1970).
- [Hak77] H.Haken, *Synergetics, an Introduction*, Springer Series in Synergetics, Vol.1 (Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1977).
- [He84] E.S.Hernández y C.O.Dorso, *Phys.Rev.***C29** (1984) 1510.
- [He85] E.S.Hernández y A.Kievsky, *Phys.Rev.***A32** (1985) 1810.
- [He87] E.S.Hernández y H.M.Cataldo, *Phys.Lett.***A124** (1987) 489.
- [He89] E.S.Hernández y H.M.Cataldo, *Phys.Rev.***A39** (1989) 2034.
- [Hi84] M.Hillery, R.F.O'Connell, M.O.Scully y E.P.Wigner, *Phys.Rep.***106** (1980) 106.
- [Ka48] E.Kanai, *Prog.Theor.Phys.***3** (1948) 440.
- [Ko72] M.D.Kostin, *J.Chem.Phys.***57** (1972) 3589.
- [Li86] K.H.Li, *Phys.Rep.***134** (1986) 1.

Introducción
27-12-91