

EL MODELO DE CALDEIRA - LEGGETT Y EL PROBLEMA DE LA DISIPACIÓN CUÁNTICA

Javier Sabio

RESUMEN DE LA CHARLA

Problema

- 1. Disipación Clásica**
- 2. Disipación Cuántica**

“Tools”

- 3. De la Clásica a la Cuántica... de la Cuántica a la Clásica (y el Problema de la Medida)**

Formalismo

- 4. El modelo de Caldeira – Leggett**
- 5. Movimiento Browniano Cuántico: una solución exacta (Pizarra)**

DISIPACIÓN CLÁSICA

Disipación = Pérdida de Energía IRREVERSIBLE

Ec. Newton: $m\ddot{q} + m\gamma\dot{q} + \frac{dV}{dq} = F(q, t) \longrightarrow \frac{dE}{dt} = -m\gamma\dot{q}^2$

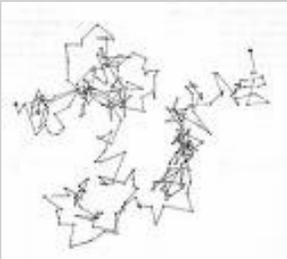
↑
Término disipativo

↙
Potencial

↘
Fuerza externa

Ejemplos: 1) $F(q, t)$ es una fuerza constante: campo eléctrico en el modelo de Drude de electrones en sólidos

2) $F(q, t)$ es una fuerza estocástica: **MOVIMIENTO BROWNIANO**



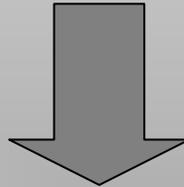
$$\langle F(t) \rangle = 0$$

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 2m\gamma kT \delta(t - t')$$

Teorema de fluctuación - disipación

ECUACIONES DE LANGEVIN

- Si $T \rightarrow 0$... tendrían que aparecer **efectos cuánticos**



**¿ Cómo se construye una Teoría Cuántica de
Sistemas Disipativos?**

ÁMBITO DE LA DISIPACIÓN CUÁNTICA

1. Cuantización de Sistemas Clásicos Disipativos

(De la Clásica a la Cuántica...)

2. Propiedades cuánticas de modelos que en el límite clásico recuperan comportamientos disipativos

(...de la Cuántica a la Clásica)

3. Emergencia del comportamiento clásico a partir de modelos cuánticos microscópicos

(El Problema de la Medida)

DE LA CLÁSICA A LA CUÁNTICA

¿Para todo sistema clásico existe su análogo cuántico?

1) La teoría puede escribirse de forma que pueda emplearse un esquema de cuantización:

- **Canónica**
- **Integral de Camino**
- **Semiclásica, ...**

2) La teoría cuántica resultante respeta los postulados de la Mecánica Cuántica:

- **Principio de Superposición**
- **Relaciones de incertidumbre (no se postulan, pero ok...)**
- **Operadores dinámicos son lineales**
- **...**

Cuantización Canónica

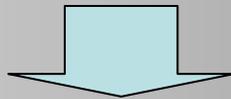
MECÁNICA CLÁSICA

El estado del sistema viene dado por una serie de variables dinámicas. Ejemplo: p, q

Estructura Canónica

$$\begin{aligned} [q_i, q_j] &= [p_i, p_j] = 0, \\ [q_i, p_j] &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

Transformaciones canónicas dejan invariantes los corchetes de Poisson (relaciones canónicas)



MECÁNICA CUÁNTICA

Las variables dinámicas pasan a ser operadores lineales en un Espacio de Hilbert \rightarrow Autoestados \rightarrow FDO's

Los corchetes de Poisson se reemplazan por relaciones de conmutación \rightarrow Relaciones de incertidumbre

Transformaciones unitarias dejan invariantes las relaciones de conmutación

Cuantización con Integrales de Camino

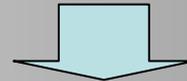
**MECÁNICA
CLÁSICA**

Acción clásica bien definida:

$$S = \int_{t_0}^{t_1} dt L(q(t), \dot{q}(t))$$

$$L(q, \dot{q}) = T - V = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q)$$

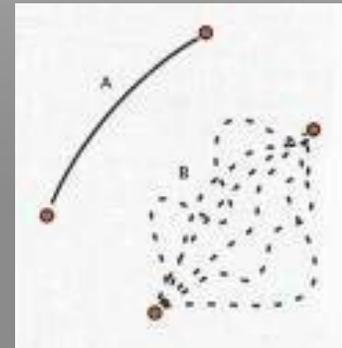
$$m\ddot{q} = -\frac{dV(q)}{dq}$$



**MECÁNICA
CUÁNTICA**

Integral de Camino de Feynman

$$D(q_0 \rightarrow q_1) = C \int_{q(0)=q_0}^{q(t_1)=q_1} Dq(t) e^{\frac{i}{\hbar} S(q(t), \dot{q}(t))}$$



Cuantización Semiclásica

- **Formulación de Hamilton – Jacobi de la Mecánica Clásica:**

→ Teoría Clásica definida con Hamiltoniano $H(q,p,t)$

→ ¿Transformación canónica a $H = 0$?

$$\left. \begin{aligned} \frac{dq'}{dt} = \frac{\partial H'}{\partial p'} = 0 \\ \frac{dp'}{dt} = -\frac{\partial H'}{\partial q'} = 0 \end{aligned} \right\}$$

Ctes
movimiento

$S(q,P,t)$ = Función Generatriz!!

$$\{q, p, H(q, p, t)\} \xrightarrow{S(q,P,t)} \left\{ Q, P, \tilde{H} = H + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \right\}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(t, q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = 0$$

Ecuación de Hamilton - Jacobi

Cuantización Semiclásica

- Definimos “función de onda clásica” en conexión con ecuación de Schrödinger:

$$H(q, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad \left\{ \begin{array}{l} \psi_{cl} = \sqrt{\rho} e^{iS/\hbar} \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\rho}{m} \frac{\partial S}{\partial q} \right) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V = 0 \end{array} \right.$$

- Problema: esta función está multivaluada... $dS = \frac{\partial S}{\partial t} dt + \frac{\partial S}{\partial q} dq = -Hdt + pdq$

$$\oint dS = \oint pdq$$

Solución:

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n, \quad n = 1, 2, \dots$$

Regla de Bohr – Sommerfeld (Problema con órbitas no periódicas, sistemas no integrables,...)

DE LA CUÁNTICA A LA CLÁSICA

¿Para todo sistema cuántico está bien definido su límite clásico?

$$\hbar \rightarrow 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ El límite } \hbar \rightarrow 0 \text{ existe} \\ \bullet \text{ Coincide con la Mecánica Clásica} \end{array} \right.$$

¡NO! Sólo cuando la teoría está escrita en términos de operadores “clásicos”: *pueden expresarse en términos de p y q sin referencia explícita a \hbar*

$$J_z = xp_y - yp_x \quad \longleftarrow \quad \text{“Clásico”}$$

$$U = e^{-i\beta J_z / \hbar} \quad \longleftarrow \quad \text{No}$$

Aunque no rigurosamente, la ecuación del movimiento de un operador “clásico” en general se parece a la ecuación clásica correspondiente

El límite clásico de Madelung

- Escribimos función de onda en forma polar:

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{iS/\hbar}$$

- Ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\rho}{m} \vec{\nabla} S \right) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = 0 \end{array} \right.$$



“Potencial Cuántico”

El límite $\hbar \rightarrow 0$ está bien definido y coincide con la ecuación de Hamilton - Jacobi

El límite clásico en Integrales de Camino

- Teoría Cuántica definida en términos de Integrales de Camino:

$$D(q_0 \rightarrow q_1) = C \int_{q(0)=q_0}^{q(t_1)=q_1} Dq(t) e^{\frac{i}{\hbar} S(q(t), \dot{q}(t))}$$

- ¿Límite $\hbar \rightarrow 0$?

Sólo sobreviven los caminos para los que S es mínima

$$\delta S = 0 \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0$$

Ecuaciones de Euler – Lagrange
(Mecánica Clásica)

EL PROBLEMA DE LA MEDIDA

- MEDIDA:

$$|\psi\rangle = a|\psi_a\rangle + b|\psi_b\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H|\psi\rangle$$

PROCESO
NO
UNITARIO



$$|\psi_a\rangle, p(a) = |a|^2$$

$$|\psi_b\rangle, p(b) = |b|^2$$

EVOLUCIÓN UNITARIA

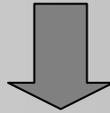
- ¿Es la Mecánica Cuántica completamente probabilística?
- ¿Cuándo se “reduce” la función de onda?
- ¿Se pueden observar superposiciones macroscópicas de estados? (Gatos de Schrödinger)

Formulación de Von Neumann

MEDIDA = Pérdida de Correlaciones Cuánticas

$$|\psi\rangle = a|\psi_a\rangle + b|\psi_b\rangle$$

$$\rho_c = |\psi\rangle\langle\psi| = |a|^2|\psi_a\rangle\langle\psi_a| + ab^*|\psi_a\rangle\langle\psi_b| + ba^*|\psi_b\rangle\langle\psi_a| + |b|^2|\psi_b\rangle\langle\psi_b|$$



$$\rho_r = |\psi\rangle\langle\psi| = |a|^2|\psi_a\rangle\langle\psi_a| + |b|^2|\psi_b\rangle\langle\psi_b|$$

CUESTIONES PRECISAS:

- 1) ¿Qué estado “clásico” se selecciona en el output?
- 2) ¿En qué momento se pierden las correlaciones cuánticas?
- 3) ¿Por qué esta base y no otra? (BASES PREFERIDAS)

CUANTIZACIÓN DE SISTEMAS DISIPATIVOS

A. Cuantización Directa de la Teoría Clásica

$$m\ddot{q} + m\gamma\dot{q} + \frac{dV}{dq} = F(q, t)$$

- **Cuantización canónica/Integral de camino/Semiclásica:**

Requieren Hamiltoniano/Lagrangiano/Función generatriz dependiente del tiempo

En general aparecen problemas con el principio de incertidumbre

Avance Reciente: Magpantay, cond-mat/0101084 (Julio 2006)

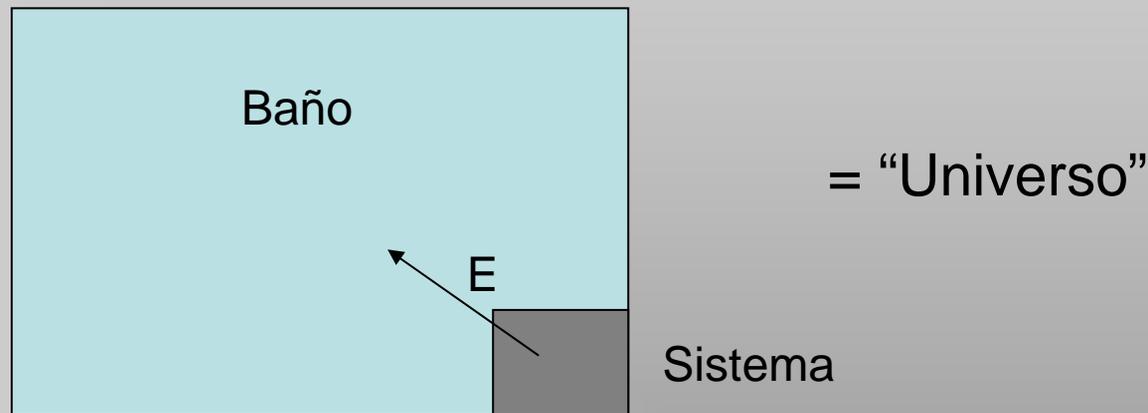
- **Otras aproximaciones:**

- Cuantización “Estocástica” → Schrödinger no lineal → Viola Ppo. Superposición

- ...

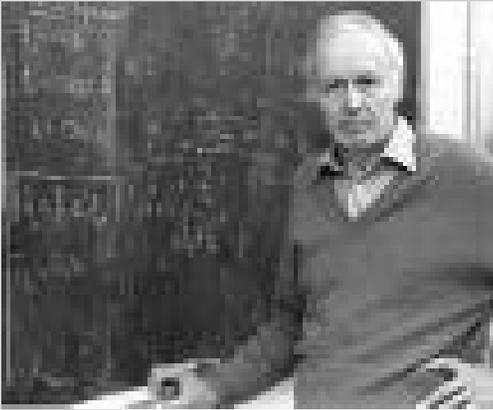
CUANTIZACIÓN DE SISTEMAS DISIPATIVOS

B. Cuantización de una Teoría Sistema - Baño



- Permite usar formalismo Hamiltoniano / Lagrangiano → Energía total se conserva → CUANTIZACIÓN CANÓNICA
- Requiere de un modelo microscópico del baño
- Al final nos interesan las ecuaciones clásicas (efectivas) del sistema → Hay que integrar "out" el baño

EL MODELO DE CALDEIRA - LEGGETT



Tony Leggett

Amir Caldeira



PHYSICAL REVIEW LETTERS

VOLUME 46

26 JANUARY 1981

NUMBER 4

Influence of Dissipation on Quantum Tunneling in Macroscopic Systems

A. O. Caldeira and A. J. Leggett

School of Mathematical and Physical Sciences, University of Sussex, Brighton BN1 9QH, Sussex, United Kingdom

(Received 28 July 1980)

Construyendo el modelo...

Objetivo: Teoría Cuántica que en el límite clásico reproduzca las ecuaciones del movimiento de una partícula con disipación

La descripción concreta del baño y del mecanismo de disipación no es importante mientras reproduzca correctamente el límite clásico

Mecanismo de disipación

- Baño de osciladores armónicos (Feynman – Vernon)
- Cada oscilador está debilmente perturbado por el sistema
- El sistema puede ser fuertemente perturbado por el baño
- **IRREVERSIBILIDAD:** Conjunto infinito de osciladores, para evitar que la energía fluya de nuevo al sistema (recurrencias de Poincaré)

$$\sum_k \rightarrow \int_0^\Lambda$$

Construyendo el modelo...

$$L = \underbrace{\frac{1}{2}M\dot{q}^2 - V(q)}_{\text{Partícula cuántica}} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_j (m_j\dot{x}_j^2 - m_j\omega_j^2 x_j^2)}_{\text{Baño}} - \underbrace{\sum_j F_j(q)x_j}_{\text{Acoplo lineal}} - \underbrace{\sum_j \frac{F_j^2(q)}{2m_j\omega_j^2}}_{\text{Contratérmino}}$$

El asunto del contratérmino...

$$V(q, \{x_j\}) = \frac{1}{2}\sum_j m_j\omega_j^2 x_j^2 + V(q) + \sum_j F_j(q)x_j$$

$$\frac{\partial V(q, \{x_j\})}{\partial x_i} = m_i\omega_i^2 x_i + F_i(q) = 0 \rightarrow x_i = -\frac{F_i(q)}{m_i\omega_i^2}$$

$$V_{\text{eff}}(q) = V(q) - \sum_i \frac{F_i^2(q)}{m_i\omega_i^2}$$

← Renormalización del potencial de la partícula

Construyendo el modelo...

$$L = \underbrace{\frac{1}{2}M\dot{q}^2 - V(q)}_{\text{Partícula cuántica}} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_j (m_j\dot{x}_j^2 - m_j\omega_j^2 x_j^2)}_{\text{Baño}} - \underbrace{\sum_j F_j(q)x_j}_{\text{Acoplo lineal}} - \underbrace{\sum_j \frac{F_j^2(q)}{2m_j\omega_j^2}}_{\text{Contratérmino}}$$

Ligadura (disipación lineal):

(Ec's clásicas del movimiento)

$$M\ddot{q} + \eta\dot{q} + \frac{\partial V}{\partial q} = F(t)$$

$$F_j(q) = qC_j$$

$$\eta(q) = \eta$$

Disipación lineal en derivada

$$J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_j \frac{C_j^2}{m_j\omega_j} \delta(\omega - \omega_j) = \eta\omega$$

↑
Función espectral

Caldeira and Leggett, *Annals of Physics* 149, 374 (1983). Pag.447

El modelo de Caldeira - Leggett

$$L = \frac{1}{2} M \dot{q}^2 - V(q) + \frac{1}{2} \sum_j (m_j \dot{x}_j^2 - m_j \omega_j^2 x_j^2) - q \sum_j C_j x_j - q^2 \sum_j \frac{C_j^2}{2m_j \omega_j^2}$$

Baño de bosones

Acoplo lineal en la posición

Contratérmino: Compensa
potencial parabólico
disipativo

$$J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_j \frac{C_j^2}{m_j \omega_j} \delta(\omega - \omega_j) = \eta \omega \quad \leftarrow \text{Ligadura}$$

La acción efectiva de Caldeira - Leggett

1) Cuantizar el modelo en términos de integrales de camino

Propagador
total
(Euclídeo)

$$W(q'', x''; q', x') = Z^{-1} \int_{q'}^{q''} Dq(\tau) \int_{x'}^{x''} Dx(\tau) e^{iS^E[q,x]/\hbar}$$

2) Trazar (integrar out) los grados de libertad del baño

Propagador
sistema

$$\rho(q''; q') = \int_{q'}^{q''} Dq(\tau) e^{iS_S^E[q]/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{x'}^{x'} Dx(\tau) e^{i(S_I^E[q,x] + S_E^E[x])/ \hbar}$$

Sistema

Acoplo

Baño

Traza: $x = \{x_i\}$

La acción efectiva de Caldeira - Leggett

$$\rho(q''; q') = Z^{-1} \int_{q'}^{q''} Dq(\tau) e^{iS_{eff}^E[q]/\hbar}$$

$$S_{eff}^E[q] = \int_0^T d\tau \left[\frac{1}{2} M \dot{q}^2 + U(q) \right] - \frac{1}{2} \int_0^T d\tau \int_0^T d\tau' \alpha(\tau - \tau') [q(\tau) - q(\tau')]^2$$

$$\alpha(\tau - \tau') \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty J(\omega) e^{-\omega|\tau - \tau'|} d\omega$$

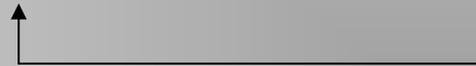
- **Acción efectiva para la partícula cuántica**
- **No local: Interacciones efectivas partícula - baño - partícula**
- **El término no local se puede generalizar a otros modelos**
- **Aproximaciones típicas:**
 - Tiempos cortos:** $T \rightarrow 0: \alpha(\tau) \sim e^{-\frac{2\pi\tau}{T}}$
 - Tiempos largos:** $T \rightarrow \infty: \alpha(\tau) \sim \frac{1}{\tau^2}$

Ecuaciones clásicas

Hacemos la aproximación de punto de silla ($\hbar \rightarrow 0$) \rightarrow Ecuaciones de Euler – Lagrange \rightarrow Ecuaciones del movimiento

$$M\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} - \int_0^T d\tau' \alpha(\tau - \tau')(q(\tau) - q(\tau'))$$

$$= -\frac{\partial V}{\partial q} - \int_0^T d\tau' K(\tau - \tau')\dot{q}(\tau')$$



Correlaciones a tiempos distintos

Baño Markoviano (tiempos cortos):

$$K(\tau - \tau') = \eta\delta(\tau - \tau') \rightarrow M\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} - \eta\dot{q}$$

Fluctuaciones (fuerza estocástica): Aproximación Semiclásica

UNA SOLUCIÓN EXACTA

PHYSICAL REVIEW A

VOLUME 32, NUMBER 1

JULY 1985

Quantum theory of a free particle interacting with a linearly dissipative environment

Vincent Hakim* and Vinay Ambegaokar†

Institute for Theoretical Physics, University of California, Santa Barbara, Santa Barbara, California 93106

(Received 11 February 1985)

- Solución exacta del modelo de Caldeira para una partícula libre
- Formalismo Hamiltoniano
- Análisis del resultado en términos del problema de la medida

Interpretación

Estado fundamental: $|p\rangle = \int dq \langle q|p\rangle |q\rangle = \int dq e^{iqp} |q\rangle$

$$|\epsilon_0\rangle = \int dq |q\rangle \otimes U_{1,q} U_3 |0\rangle$$

$$|A_q\rangle = U_{1,q} U_3 |0\rangle$$

El baño mide la posición de la partícula:

$$|\psi\rangle \otimes |A\rangle \rightarrow |q\rangle \otimes |A_q\rangle$$

El experimental detecta un estado del BAÑO (detector)

Resolución:

$$\langle A_{q_2} | A_{q_1} \rangle = \exp \left[-\frac{1}{2} (q_1 - q_2)^2 \frac{\eta}{\pi} \ln \left[\frac{M\omega_c}{\eta} \right] \right]$$

Anchura

Volviendo al Problema de la Medida...

- El efecto del baño sobre la partícula es “medir” su posición con una cierta resolución
- El acoplo al baño es responsable:
 - De destruir las correlaciones cuánticas entre estados (decoherencia)
 - De seleccionar una BASE PREFERIDA de estados
- No es, sin embargo, responsable:
 - De seleccionar qué estado de la base preferida se obtendrá como output de la medida



Seguimos necesitando una Interpretación de la Mecánica Cuántica: Copenhague, Everett, Bohn,...

CONCLUSIONES

- **El problema de la Disipación Cuántica consiste en estudiar Sistemas Cuánticos que en el límite clásico sean disipativos**
- **El modelo de Caldeira – Leggett es un modelo mínimo que permite recuperar en el límite clásico las ecuaciones disipativas**
- **El problema de la Disipación Cuántica está muy relacionado con el de la Decoherencia, y en última instancia con el problema de la Medida**