

# Sistemas cuánticos abiertos

Dinámica de sistemas cuánticos abiertos mediante el formalismo  
de Feynman y Vernon

**Juan José Rodríguez Aldavero**

Trabajo Fin de Grado



Facultad de Ciencias Físicas  
Universidad Complutense de Madrid  
España

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Modelos sistema-baño</b>	<b>2</b>
2.1. Ecuaciones maestras de Born-Markov . . . . .	2
2.2. El modelo de Caldeira-Leggett . . . . .	3
<b>3. La integral de camino en mecánica cuántica estadística</b>	<b>7</b>
3.1. El propagador como integral de camino . . . . .	7
3.2. Integrales de camino imaginarias . . . . .	11
3.3. El método de Feynman-Vernon . . . . .	13
3.3.1. La acción efectiva . . . . .	13
3.3.2. Aplicación al modelo de Caldeira-Leggett . . . . .	14
<b>4. Aplicaciones</b>	<b>17</b>

## 1. Introducción

Un sistema cuántico perfectamente aislado de su entorno es un constructo matemático prácticamente irrealizable en la realidad. Por ello, para poder aplicar la mecánica cuántica al estudio de sistemas reales necesitamos considerar los sistemas cuánticos como sistemas abiertos que intercambian energía e información con el entorno que les rodea.

Una forma sencilla de considerar estos sistemas es tratar el entorno como un baño energético con un número de grados de libertad mucho mayor que los del sistema en consideración. El conjunto sistema-baño se podrá considerar como un sistema aislado de hamiltoniano total  $H(x, q) = H_S(q) + H_B(x) + H_I(x, q)$ , donde el hamiltoniano del sistema dependerá únicamente de los grados de libertad de este,  $H_S(q)$ , y asimismo para el baño. El acoplo entre ambos vendrá dado por el término de interacción  $H_I(x, q)$ .

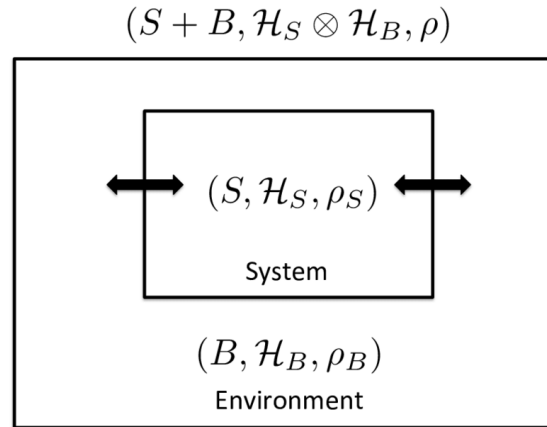


Figura 1: Diagrama ilustrativo del conjunto sistema-baño

La interacción del sistema,  $S$  con su entorno  $E$ , dará lugar al fenómeno de la disipación cuántica por el cual existirá un intercambio de energía entre ambos. Además de este intercambio de energía, se podrán producir diversos fenómenos de origen cuántico, como puede ser la decoherencia.

A grandes rasgos, el objetivo principal de la *mecánica cuántica disipativa* es la formulación de teorías de dinámica irreversible para sistemas cuánticos abiertos, algo así como la generalización de los conceptos de *fricción* o *amortiguación* a la mecánica cuántica. A diferencia de en mecánica clásica, existen grandes dificultades para incorporar estos conceptos debido, entre otras cosas, al carácter conservativo de la mecánica hamiltoniana sobre la que se construye la mecánica cuántica. En particular, en ausencia de *fuerzas externas* dependientes del tiempo el operador Hamiltoniano es constante e implica la conservación de la energía. Es por esto que, en general, no se puede hacer de manera análoga e introducir un término *ad hoc* dependiente de la velocidad como se podría hacer, por ejemplo, en el oscilador armónico clásico amortiguado.

Existen diferentes procedimientos para estudiar estos fenómenos de disipación, dentro del formalismo sistema-baño. Uno de los procedimientos estándar con más éxito es mediante el uso de la denominada **aproximación de Born-Markov** por la cual se desprecian los efectos de memoria del sistema a cambio de simplificar su dinámica. Otro de los procedimientos, sobre el cual se centrará este trabajo, es el denominado **método de Feynman-Vernon**, el cual utiliza las integrales de camino para resolver la dinámica de forma exacta, conservando estos efectos no-markovianos de memoria pero con la desventaja de presentar más dificultades matemáticas.

## 2. Modelos sistema-baño

Los modelos sistema-baño se pueden tratar de dos maneras distintas, según si estamos trabajando en la imagen de interacción o en la de Heisenberg. Al tratar el sistema en imagen de interacción, la dinámica del sistema se puede describir en términos de unas ecuaciones denominadas **ecuaciones maestras** para la matriz densidad reducida del sistema. Estas ecuaciones son susceptibles de ser aproximadas por otras más asequibles por medio de la aproximación de Born-Markov, a costa de perder información de los efectos de memoria del sistema y de otros detalles de la dinámica.

Por otro lado, al trabajar en imagen de Heisenberg, dicha dinámica puede quedar descrita en términos de un conjunto de **ecuaciones de Langevin generalizadas** para cada uno de los operadores del sistema.

### 2.1. Ecuaciones maestras de Born-Markov

En ocasiones es posible aplicar cierto tipo de aproximaciones sobre ecuaciones maestras que simplifican notablemente el estudio de la dinámica del sistema. En estos casos es más conveniente emplear la imagen de interacción. Partiendo del hamiltoniano anterior, la evolución temporal de la matriz densidad total vendrá dada por la ecuación de Liouville-von Neumann,

$$\frac{d}{dt}W(t) = -i[H_I(t), W(t)] \quad (1)$$

que posee una solución formal dada por:

$$W(t) = W(0) - i \int_0^t ds [H_I(s), W(s)]. \quad (2)$$

Si sustituimos esta solución formal en la ecuación anterior y tomamos la traza parcial sobre los grados de libertad del baño, obtenemos la primera ecuación de movimiento

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = - \int_0^t ds \operatorname{tr}_B [H_I(t), [H_I(s), W(s)]] \quad (3)$$

donde se ha asumido que

$$\text{tr}_B [H_I(t), W(0)] = 0. \quad (4)$$

Si asumimos que el acoplo entre el sistema y el entorno es pequeña (*aproximación de Born*) entonces la influencia del sistema sobre la matriz densidad del entorno  $\rho_B$  puede ser despreciada y el estado del sistema total puede ser aproximado por el producto tensorial:

$$W(t) \approx \rho(t) \otimes \rho_B. \quad (5)$$

Sustituyendo,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = - \int_0^t ds \text{tr}_B [H_I(t), [H_I(s), \rho(s) \otimes \rho_B]] \quad (6)$$

Observamos como en esta ecuación, la evolución temporal de  $\rho(t)$  depende de su valor a tiempos pasados y existen efectos de memoria. Si estos efectos no contribuyen en exceso a la dinámica del sistema (por ejemplo, si los tiempos de autocorrelación del baño son mucho menores que los del sistema  $\tau_B \ll \tau_S$ ) entonces es factible físicamente realizar la *aproximación de Markov*. Esta aproximación consta de dos partes:

1. En primer lugar sustituímos  $\rho(s)$  por  $\rho(t)$  para eliminar la dependencia sobre tiempos pasados.
2. La ecuación resultante será local en el tiempo, pero dependerá de la elección del tiempo inicial  $t = 0$  por tanto no es puramente Markoviana. Para resolver esto, podemos hacer la sustitución  $s \rightarrow t - s$  en el integrando de la ecuación y tomar el límite  $t \rightarrow \infty$  en la integral.

La ecuación maestra resultante,

$$\boxed{\frac{d}{dt}\rho(t) = - \int_0^\infty ds \text{tr}_B [H_I(t), [H_I(t-s), \rho(t) \otimes \rho_B]]} \quad (7)$$

es markoviana en el sentido de que procede de las aproximaciones de Born y de Markov. Esta aproximación es razonable físicamente siempre y cuando el *kernel* de la ecuación de movimiento,

$$K(t, s) = [H_I(t), [H_I(t-s), \rho(t) \otimes \rho_B]] \quad (8)$$

tenga un comportamiento parecido al de una *delta de Dirac*, esto es, contribuya principalmente en un entorno de  $s = t$ .

## 2.2. El modelo de Caldeira-Leggett

Al tratar el sistema en la imagen de Heisenberg, es posible realizar un tratamiento análogo al de un sistema hamiltoniano clásico en el sentido de que podemos emplear las ecuaciones de Liouville-von Neumann para, a partir de un hamiltoniano inicial, hallar sus ecuaciones de movimiento. Este procedimiento es especialmente apropiado para tratar los fenómenos de **movimiento browniano cuánticos** y sus análogos, los cuales son modelos sistema de interés + baño donde consideramos el acoplo con un baño térmico.

Para este caso en particular, consideramos un sistema con una cantidad reducida de grados de libertad acoplado a un baño con un número arbitrariamente grande de grados de libertad, los cuales se pueden representar por un conjunto de modos armónicos. La interacción del sistema con cada uno de los grados de libertad del baño es proporcional a la inversa de su volumen. Por lo tanto, si consideramos un baño de dimensiones lo suficientemente grandes, el acoplo a cada uno de sus modos se puede considerar *débil*. En particular, parece que para baños *macroscópicos* puede ser físicamente razonable el considerar que el acoplo es una función lineal de las coordenadas del baño.

Por esta razón, la aproximación de acoplo débil (*weak coupling*) que nos permite considerar acoplos lineales se puede generalizar a un conjunto muy grande de sistemas. Además, el hecho de que el acoplo sea lineal aporta muchas ventajas a la hora de calcular la dinámica. Por ejemplo, nos permite eliminar de manera exacta los grados de libertad del baño como se verá en el tratamiento posterior de este trabajo.

Consideramos el **modelo de Caldeira-Leggett**, el cual describe la dinámica de una partícula sometida a un potencial  $V(q)$  amortiguada por un baño de osciladores armónicos mediante un acoplo lineal entre  $q$  y las  $x_\alpha$ . Para tratarlo, consideramos la imagen de Heisenberg, donde la dependencia temporal recae en los operadores y no en el estado del sistema, y su dinámica viene dada por la ecuación de von-Neumann:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A] \quad (9)$$

El hamiltoniano de la partícula es:

$$H_S = \frac{p^2}{2M} + V(q) \quad (10)$$

correspondiente a una partícula ligada a un potencial arbitrario  $V(q)$ . Suponemos implícita de aquí en adelante la dependencia en  $t$ :  $q, p = q(t), p(t)$ . El del baño vendrá dado por un conjunto de osciladores con diferentes masas  $m_\alpha$  y frecuencias  $\omega_\alpha$ :

$$H_B = \sum_{\alpha=1}^N \left( \frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2}m_\alpha\omega_\alpha^2 x_\alpha^2 \right) \quad (11)$$

La interacción sistema-baño  $H_I$  es:

$$H_I = - \sum_{\alpha=1}^N F_\alpha(q)x_\alpha + \Delta V(q) \quad (12)$$

donde  $F_\alpha(q)$  es una función lineal de  $q$  y donde el término  $\Delta V(q)$  se introduce *a mano* para evitar una renormalización del potencial  $V(q)$  causada por el término de interacción.

Supongamos que no incluimos el término  $\Delta V(q)$ . Entonces, la superficie de mínima energía a  $q$  constante dada por la expresión

$$\frac{\partial H}{\partial x_n} = m_n\omega_n^2 x_n - F_\alpha(q) = 0 \quad (13)$$

no se encuentra en  $x_n = 0$  como debería ser para un conjunto de osciladores armónicos, sino en

$$x_\alpha = \frac{F_\alpha(q)}{m_\alpha\omega_\alpha^2} \quad (14)$$

Teniendo en cuenta este resultado, el mínimo del hamiltoniano total con respecto de la coordenada del sistema viene dado por

$$\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial V}{\partial q} - \sum_{\alpha=1}^N \frac{\partial F_\alpha(q)}{\partial q} x_\alpha \quad (15)$$

lo que quiere decir que, en ausencia del término  $\Delta V(q)$ , el potencial *efectivo* para la coordenada del sistema no es el potencial que esperaríamos,  $V(q)$ , sino que se renormaliza a:

$$V_{\text{eff}}(q) = V(q) - \sum_{\alpha=1}^N \frac{F_{\alpha}^2(q)}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} \quad (16)$$

para evitar este proceso, elegimos una forma adecuada para el término  $\Delta V(q)$ . En particular, la elección

$$\Delta V(q) = \sum_{\alpha=1}^N \frac{F_{\alpha}^2(q)}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} \quad (17)$$

nos elimina esta renormalización.

Si suponemos que la interacción es separable,

$$F_{\alpha}(q) = c_{\alpha}F(q) \quad (18)$$

y que es estrictamente lineal ( $F(q) = q$ ) entonces completando cuadrados, el hamiltoniano de Caldeira-Leggett toma la forma

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(q) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \left[ \frac{p_{\alpha}^2}{m_{\alpha}} + m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 \left( x_{\alpha} - \frac{c_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} q \right)^2 \right] \quad (19)$$

donde podemos separar el potencial total del sistema completo:

$$V(q, \mathbf{x}) = V(q) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 \left( x_{\alpha} - \frac{c_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} q \right)^2 \quad (20)$$

$$H = \frac{p^2}{2M} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V(q, \mathbf{x}) \quad (21)$$

Es posible resolver este sistema de manera formal a partir de la teoría de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Para ello, lo primero que debemos hacer es calcular las ecuaciones de movimiento empleando la ecuación de von-Neumann. Por ejemplo, para el caso del momento del baño:

$$\dot{p}_{\beta} = \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \left( \frac{p_{\alpha}^2}{m_{\alpha}} + m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 \left( x_{\alpha} - \frac{c_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} q \right)^2 \right), p_{\beta} \right] \quad (22)$$

$$= \frac{1}{2} m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 \left[ \sum_{\alpha=1}^N x_{\alpha}^2, p_{\beta} \right] - \frac{1}{2} \cdot 2 \frac{x_{\alpha} q}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} [x_{\alpha}, p_{\beta}] \quad (23)$$

por supuesto, en todo momento se aplican las reglas de conmutación canónica entre operadores:

$$[x_{\alpha}, p_{\beta}] = \delta_{\alpha\beta} i\hbar \quad [x_{\alpha}, x_{\beta}] = [p_{\alpha}, p_{\beta}] = 0 \quad (24)$$

Así, realizando el cálculo y teniendo en cuenta que  $[p_{\alpha}^2, x_{\beta}] = -2i\hbar\delta_{\alpha\beta}p_{\alpha}$  se tiene que:

$$\dot{p}_n = -m_n\omega_n^2 x_n + c_n q \quad \dot{x}_n = \frac{p_n}{m_n} \quad (25)$$

y lo mismo para las coordenadas del sistema:

$$\dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial q} + \sum_{n=1}^N c_n x_n - q \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \quad \dot{x} = \frac{p}{M} \quad (26)$$

Una vez tenemos las ecuaciones de movimiento, encontramos su solución a partir de la teoría de ecuaciones diferenciales inhomogéneas. Si tratamos la coordenada  $q(t)$  como dependiente explícitamente del tiempo, la solución inhomogénea para la coordenada  $x_n$  es de la forma:

$$x_n(t) = x_n(0) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) + \frac{c_n}{m_n \omega_n} \int_0^t ds \sin(\omega_n(t-s)) q(s) \quad (27)$$

Si sustituimos esta expresión en la ecuación (26) para el sistema, llegamos a:

$$m\ddot{q} - \int_0^t ds \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n(t-s)) q(s) + \frac{\partial V}{\partial q} + q \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \quad (28)$$

$$= \sum_{n=1}^N c_n \left[ x_n(0) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) \right] \quad (29)$$

es posible realizar una integración por partes en el término integral para despejar un *kernel*. En particular, se ve como:

$$\int_0^t ds \sin(\omega_n(t-s)) q(s) = q(s) \frac{1}{\omega_n} \cos(t-s) \Big|_0^t - \int_0^t \frac{1}{\omega_n} \cos(t-s) \dot{q}(s) ds \quad (30)$$

$$\Rightarrow \int_0^t ds \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n(t-s)) q(s) = \quad (31)$$

$$= \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} q(s) (\cos(0) - \cos(t)) - \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \int_0^t \cos(t-s) \dot{q}(s) ds \quad (32)$$

Esto nos permite dejar la ecuación efectiva de movimiento en la forma:

$$\boxed{M\ddot{q} + M \int_0^t ds \gamma(t-s) \dot{q}(s) + \frac{\partial V}{\partial q} = \xi(t)} \quad (33)$$

Donde  $\gamma(t)$  es el denominado **kernel de amortiguación** y contiene toda la información sobre los procesos de interacción.

$$\gamma(t) \equiv \frac{1}{M} \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \cos(\omega_n t) \quad (34)$$

Esta ecuación es el análogo cuántico de la ecuación de Langevin clásica para el movimiento browniano. Conocemos como una ecuación de Langevin a toda aquella ecuación diferencial estocástica que estudia el comportamiento de variables macroscópicas a partir de una descripción estocástica de los grados de libertad microscópicos. Para el caso clásico,  $\xi(t)$  consiste en una variable microscópica estocástica distribuida con una distribución de probabilidad gaussiana y de media cero,  $\langle \xi(t) \rangle = 0$ . Para el caso cuántico es algo análogo pero es una fuerza operador-valorada, en el sentido de que tanto  $x_n$ ,  $p$  y  $q$  son operadores canónicos. Para nuestro caso dicha fuerza toma la forma:

$$\xi(t) \equiv \sum_{n=1}^N c_n \left[ \left( x_n(0) - \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} q(0) \right) \cos(\omega_n t) + \frac{p_n(0)}{m_n \omega_n} \sin(\omega_n t) \right] \quad (35)$$

Es posible condensar todos los parámetros físicos que describen el baño en una magnitud denominada **densidad espectral de los modos del baño**  $J(\omega)$ , que nos permite caracterizar por sí sola la dinámica reducida del sistema. Por ejemplo, si consideramos una densidad espectral del tipo *peine de Dirac*,

$$J(\omega) \equiv \pi \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n} \delta(\omega - \omega_n) \quad (36)$$

entonces podemos, por ejemplo, expresar el *kernel de amortiguación* en términos de esta densidad en la forma:

$$\gamma(t) = \frac{1}{M} \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{m_n \omega_n^2} \cos(\omega_n t) = \frac{2}{M} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega t). \quad (37)$$

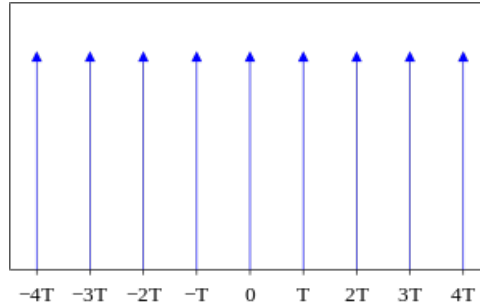


Figura 2: Distribución peine de Dirac

Definir una  $J(\omega)$  apropiada para el sistema es equivalente a definir los parámetros del hamiltoniano. Por ejemplo, para el caso que se está tratando, definir una  $J(\omega)$  apropiada hace innecesario especificar los parámetros  $m_n$ ,  $\omega_n$  y  $c_n$ .

### 3. La integral de camino en mecánica cuántica estadística

#### 3.1. El propagador como integral de camino

El propagador cuántico es el objeto central en la formulación de Feynman de la mecánica cuántica. En particular, su forma en integral de camino ofrece una conexión entre la formulación lagrangiana de la mecánica clásica y la teoría cuántica, como se mostrará a continuación. Si nos restringimos al uso de un hamiltoniano independiente del tiempo, la solución formal de la ecuación de Schrödinger para el propagador cuántico es:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) |\psi(0)\rangle. \quad (38)$$

Los elementos que preceden al estado inicial  $|\psi(0)\rangle$  son los denominados propagadores del sistema, que contienen toda la información correspondiente a la evolución temporal de este. En la representación de posiciones, mediante una resolución de la identidad apropiada, el estado toma la forma:

$$\psi(x, t) = \int dx' K(x, t, x', 0) \psi(x', 0) \quad (39)$$



donde  $K(x, t, x', 0)$  son los elementos de matriz del propagador

$$K(x, t, x', 0) = \langle x | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) | x' \rangle. \quad (40)$$

Debido a que la evolución temporal de un estado se puede considerar por partes, aplicando los propagadores en orden (por ejemplo, en dos partes):

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H (t - t_1)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t_1\right) |\psi(0)\rangle \quad (41)$$

o equivalentemente,

$$\psi(x, t) = \int dx' \int dx'' K(x, t, x'', t_1) K(x'', t_1, x', 0) \psi(x', 0) \quad (42)$$

vemos que el propagador satisface la propiedad de "semigrupo":

$$K(x, t, x', 0) = \int dx'' K(x, t, x'', t_1) K(x'', t_1, x', 0) \quad (43)$$

además, los propagadores contienen toda la información correspondiente a las autoenergías  $E_n$  del sistema y a sus correspondientes autoestados. Debido al teorema espectral de la mecánica cuántica:

$$K = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} H t\right) = \int dn |n\rangle \langle n| \exp\left(\frac{-i}{\hbar} E_n t\right) \quad (44)$$

$$K(x, t, x', 0) = \langle x | K | x' \rangle = \int dn \langle x | n \rangle \langle n | x' \rangle \exp\left(\frac{-i}{\hbar} E_n t\right) \quad (45)$$

$$K(x, t, x', 0) = \sum_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \psi_n(x) \psi_n^*(x') \quad (46)$$

Existe una conexión importante entre el propagador de un sistema cuántico y la acción correspondiente al sistema clásico análogo. Es fácil de ver si consideramos el propagador para una partícula libre cuántica de masa  $m$ , con hamiltoniano:

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad (47)$$

y autoestados en representación de momento

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) \quad (48)$$

Sustituyendo estos autoestados en la ecuación (46):

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p (x_f - x_i)\right) \quad (49)$$

vemos que podemos completar cuadrados hasta llevar esta integral a una forma gaussiana

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \frac{i}{\hbar} \left( - \left[ \sqrt{\frac{t}{2m}} p - \sqrt{\frac{m}{2t}} (x_f - x_i) \right]^2 + \frac{m}{2t} (x_f - x_i)^2 \right) \quad (50)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{im}{2t\hbar} (x_f - x_i)^2\right) \int dp \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \left[ \sqrt{\frac{t}{2m}} p - \sqrt{\frac{m}{2t}} (x_f - x_i) \right]^2\right) \quad (51)$$

Haciendo el cambio de variable  $\tilde{p} = \sqrt{\frac{t}{2m}}p - \sqrt{\frac{m}{2t}}(x_f - x_i)$  e integrando la gaussiana obtenemos el resultado final:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_f - x_i)^2}{2t}\right) \quad (52)$$

El término de la exponencial se puede igualar a la acción clásica de una partícula libre moviéndose entre los puntos  $x_i$  y  $x_f$  en un tiempo  $t$ . En particular, dada la trayectoria

$$x_{CL}(s) = x_i + (x_f - x_i) \frac{s}{t} \quad \Rightarrow \quad \dot{x}_{CL}(s) = \frac{(x_f - x_i)}{t} \quad (53)$$

entonces,

$$S_{cl} = \frac{m}{2} \int_0^t ds \dot{x}_{cl}^2 = \frac{m}{2} \frac{(x_f - x_i)^2}{t} \quad (54)$$

lo que nos permite expresar la expresión del propagador en términos de la acción clásica:

$$\boxed{K(x_f, t, x_i, 0) \propto \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[x_f, t, x_i, 0]\right)} \quad (55)$$

En una primera instancia, cabría esperar que este resultado sea único para el caso de la partícula libre. Sin embargo, se puede generalizar para cualquier propagador. Procedemos a motivar esta generalización considerando un hamiltoniano independiente del tiempo arbitrario  $H = T + V$  y descomponiendo la evolución temporal dada por el parámetro finito  $t$  en un conjunto infinito de  $N$  intervalos  $\Delta t = t/N$  donde tomaremos el límite  $N \rightarrow \infty$ . Así, el propagador tomará la forma:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) = \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} (T + V) \Delta t\right)\right]^N \quad (56)$$

Descomponemos el propagador en una parte dependiente de la energía cinética y en otra dependiente de la potencial. Para ello (debido a que son operadores que, en general, no conmutan entre sí) empleamos la fórmula de Baker-Hausdorff:

$$e^X e^Y = e^Z \quad \Rightarrow \quad Z = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}[X, [X, Y]] + \dots \quad (57)$$

así, aplicado a  $T$  y  $V$ :

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} (T + V) \Delta t\right) \approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} T \Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V \Delta t\right) \exp\left(\frac{1}{\hbar^2} [T, V] (\Delta t)^2\right) \dots \quad (58)$$

donde hemos despreciado términos de orden  $(\Delta t)^3$  y superiores. Además, para el límite  $\Delta t \rightarrow 0$  podemos despreciar también la contribución del orden  $(\Delta t)^2$  para llegar a la fórmula de Trotter:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} (T + V) t\right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} T \Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V \Delta t\right)\right]^N = \lim_{N \rightarrow \infty} [U(\Delta t)]^N \quad (59)$$

Expresamos este propagador en la representación de posiciones, utilizando la resolución de la identidad  $N - 1$  veces

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \langle x_f | \lim_{N \rightarrow \infty} [U(\Delta t)]^N | x_i \rangle \quad (60)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \right) \langle x_f | U(\Delta t) | x_{N-1} \rangle \dots \langle x_1 | U(\Delta t) | x_i \rangle \quad (61)$$

El potencial  $V(x)$  es diagonal en la representación de posiciones, por tanto empleando la expresión para el propagador de la partícula libre los elementos de matriz son de la forma:

$$\langle x_{j+1}|U(\Delta t)|x_j\rangle = \left\langle x_{j+1} \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}T\Delta t\right) \right| x_j \right\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(x_j)\Delta t\right) \quad (62)$$

$$= \int dp \langle x_{j+1}|p\rangle \langle p|x_j\rangle \exp\left(\frac{-i}{\hbar}(T\Delta t + V\Delta t)\right) \quad (63)$$

$$= \int dp \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\left[p(x_{j+1} - x_j) + \frac{p^2}{2m}\Delta t + V(x_j)\Delta t\right]\right) \quad (64)$$

$$= \exp\left(\frac{-i}{\hbar}V(x_j)\Delta t\right) \int dp \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m}\Delta t - p(x_{j+1} - x_j)\right]\right) \quad (65)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2}\frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\Delta t} - V(x_j)\Delta t\right)\right] \quad (66)$$

y podemos hallar una expresión final para el propagador de un potencial arbitrario:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \right) \quad (67)$$

$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \left( \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta t} \right)^2 - V(x_j) \right) \Delta t\right] \quad (68)$$

donde  $x_0$  y  $x_N$  han de ser identificados con  $x_i$  y  $x_f$  respectivamente. El argumento de la exponencial es una versión discretizada de la acción clásica. En particular, si consideramos la expresión formal de la integral de Riemann:

$$S = \int_a^b f = \lim_{|\Delta_i| \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n f(t_i) \Delta_i \quad (69)$$

vemos como, ya que los límites  $\Delta N \rightarrow \infty$  y  $\Delta t \rightarrow 0$  son equivalentes,

$$S[x] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{m}{2} \left[ \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta t} \right)^2 - V(x_j) \right] \Delta t \quad (70)$$

$$\approx \int_0^t ds \left( \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right) \quad (71)$$

esto nos permite reescribir el propagador en términos de una integral funcional sobre los distintos caminos que satisfacen las condiciones de contorno de extremos fijos  $x(0) = x_i$  y  $x(t) = x_f$ ,

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \int_{x(0)=x_i}^{x(t)=x_f} \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x]\right)$$

la trayectoria clásica es aquella que extrema la acción  $S[x]$ , mientras que el resto de trayectorias pueden ser interpretadas como fluctuaciones cuánticas alrededor de esta, del orden de  $\hbar$ .

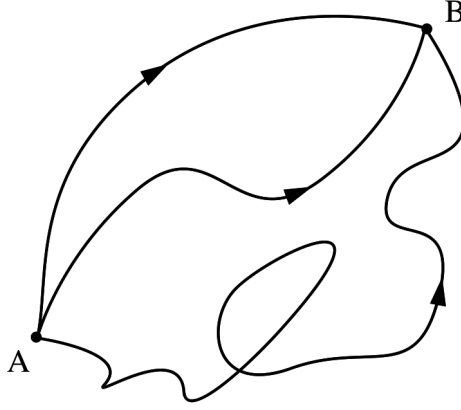


Figura 3: Posibles caminos entre dos puntos de una partícula

Todos los caminos posibles situados entre los puntos  $A$  y  $B$  del gráfico contribuyen una cierta cantidad a la amplitud de probabilidad, expresable mediante el propagador cuántico. Sin embargo, los caminos alejados del camino clásico (extremal de la acción) contribuyen con menor intensidad y, además, anulan de forma interferencial las contribuciones a la amplitud de probabilidad debido a las contribuciones en fase. Por esta razón, solo la trayectoria clásica y pequeñas fluctuaciones cuánticas alrededor de esta contribuyen de forma considerable.

### 3.2. Integrales de camino imaginarias

La aplicación de la integral de camino a la dinámica de sistemas cuánticos abiertos se puede dar por ejemplo mediante el cálculo de matrices densidad en equilibrio termodinámico a temperatura  $\beta$ .

La matriz densidad en equilibrio termodinámico de un sistema, derivable a partir de la física estadística para sistemas cuánticos, viene dada por:

$$W_{\beta}(x, x') = \frac{1}{Z} \langle x | \exp(-\beta H) | x' \rangle. \quad (72)$$

Además, el término de normalización o función de partición viene dada por:

$$Z = \int dx \langle x | \exp(-\beta H) | x \rangle \quad (73)$$

Comparando esta expresión con los elementos de matriz del propagador,

$$K(x, t, x', 0) = \langle x | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) | x' \rangle \quad (74)$$

se puede concluir que existe una relación mediante la llamada **rotación de Wick**:  $t \rightarrow -i\hbar\beta$ . Como curiosidad, la relación entre la ecuación de Schrödinger y la ecuación del calor viene también relacionada por una rotación de Wick.

Tras realizar una rotación de Wick, por ejemplo sobre la acción del propagador, es necesario hacer un cambio de variable adicional  $s \rightarrow -i\sigma$  de modo que el lagrangiano permanezca real. El resultado sobre una acción clásica general se resume como un cambio de signo sobre el término

potencial. En particular,

$$\int_0^t ds \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{ds} \right)^2 - V(x) \right] \rightarrow \int_0^{-i\hbar\beta} ds \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{ds} \right)^2 - V(x) \right] \quad (75)$$

$$\int_0^{\hbar\beta} (-id\sigma) \left( \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{ds} \frac{ds}{d\sigma} \right)^2 - V(x) \right) = i \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{d\sigma} \right)^2 + V(x) \right] \quad (76)$$

y por tanto vemos que la rotación de Wick nos cambia el signo del término potencial y nos vuelve la acción totalmente imaginaria.

La acción resultante a la rotación de Wick se denomina **acción euclídea**:

$$S^{(E)}[x] = \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right] \quad (77)$$

Esta relación resulta ser muy útil para el cálculo de funciones de partición de sistemas cuánticos. A partir de la definición de la función de partición, vemos existe una manera sencilla de calcularla para un sistema dado conocidos los elementos de matriz de su propagador haciendo la traza sobre su rotación de Wick.

Por ejemplo, los elementos de matriz de un oscilador armónico, que se pueden calcular resolviendo la integral de camino correspondiente, vienen dados por:

$$K(x_f, t, x_i, 0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega t)}} \exp \left[ -i \frac{m\omega}{2\hbar} \frac{(x_i^2 + x_f^2) \cos(\omega t) - 2x_i x_f}{\sin(\omega t)} \right] \quad (78)$$

haciendo una transformación a tiempo imaginario mediante una rotación de Wick y haciendo los cambios  $x_i \rightarrow x'$ ,  $x_f \rightarrow x$  obtenemos su matriz densidad en equilibrio termodinámico:

$$\rho_\beta(x, x') = \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\beta\omega)}} \exp \left[ -\frac{m\omega}{2\hbar} \frac{(x^2 + x'^2) \cosh(\hbar\beta\omega) - 2xx'}{\sinh(\hbar\beta\omega)} \right] \quad (79)$$

a partir de la cual, tomando la traza sobre sus grados de libertad,

$$Z = \int dx \langle x | \exp(-\beta H) | x \rangle = \int dx \rho_\beta(x, x) \quad (80)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\beta\omega)}} \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} \frac{2x^2 (\cosh(\hbar\beta\omega) - 1)}{\sinh(\hbar\beta\omega)} \right) \quad (81)$$

$$(82)$$

integrando la gaussiana y aplicando la identidad hiperbólica

$$\cosh(2x) = 2 \sinh^2(x) + 1 \Rightarrow \sqrt{2} \sqrt{\cosh(x) - 1} = 2 \sinh(x) \quad (83)$$

obtenemos, efectivamente, el resultado correcto para la función de partición del oscilador armónico:

$$Z = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega/2)} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[ -\beta \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (84)$$

### 3.3. El método de Feynman-Vernon

Como sabemos de mecánica cuántica, la incertidumbre sobre el estado de un sistema cuántico (ya sea incertidumbre estadística clásica o cuántica) queda plasmada en su representación como operador densidad:

$$W(t) = \sum_k p_k |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)|. \quad (85)$$

La representación en operadores densidad nos permite calcular valores esperados de manera muy sencilla, mediante las conocidas expresiones:

$$\langle A \rangle = \text{tr}\{WA\} \quad \langle A \rangle_\beta = \text{tr}\{W_\beta A\}. \quad (86)$$

Un ejemplo importante de operador densidad es el operador en equilibrio termodinámico visto en la sección anterior, para el cual los pesos  $p_k$  se encuentran canónicamente distribuidos en una distribución de Boltzmann y los proyectores  $|\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)|$  son sobre los autoestados de energía:

$$W_\beta = \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta H} = \frac{1}{Z_\beta} \sum_k e^{-\beta E_k} |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad (87)$$

En la base de posiciones:

$$\langle q' | W_\beta | q \rangle \equiv W_\beta(q', q) = \frac{1}{Z_\beta} \sum_n \psi_n(q') \psi_n^*(q) \exp(-\beta E_n). \quad (88)$$

En particular, para un sistema acoplado a un baño térmico, podemos expresar el operador densidad total (sistema más baño) como:

$$W_\beta(q', \mathbf{x}'; q, \mathbf{x}) = \frac{1}{Z_\beta} \sum_{\{n\}} \langle q', x'_1, \dots, x'_n | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | q, x_1, \dots, x_n \rangle \exp(-\beta E_{\{n\}}) \quad (89)$$

$$= \frac{1}{Z_\beta} \sum_{\{n\}} \Psi_{\{n\}}(q', \mathbf{x}') \Psi_{\{n\}}^*(q, \mathbf{x}) \exp(-\beta E_{\{n\}}) \quad (90)$$

donde  $\mathbf{x} = x_1, x_2, \dots, x_N$  es un vector que contiene los grados de libertad del baño,  $\Psi_{\{n\}}$  hace referencia a un etiquetado de los posibles estados en base a sus números cuánticos y  $\sum_{\{n\}}$  hace referencia a una suma sobre estos números cuánticos. Esto es análogo a lo que calculamos en el apartado de la integral de camino para el propagador pero para un número mucho mayor de grados de libertad, que etiquetan a los estados de forma general como números cuánticos.

#### 3.3.1. La acción efectiva

Haciendo uso de la ya conocida relación entre el propagador de un sistema cuántico y su matriz en equilibrio termodinámico por medio del tiempo imaginario, resulta sencillo calcular la forma en integral de camino imaginaria del operador densidad total como:

$$W_\beta(q', \mathbf{x}'; q, \mathbf{x}) = \frac{1}{Z_\beta} \langle \mathbf{x}' | e^{-\beta H/N} e^{-\beta H/N} \dots e^{-\beta H/N} | \mathbf{x} \rangle \langle q' | e^{-\beta H/N} e^{-\beta H/N} \dots e^{-\beta H/N} | q \rangle \quad (91)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}_{N-1} \dots d\mathbf{x}_1 \prod_{n=1}^N \langle \mathbf{x}_n | e^{-\beta H/N} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle dx \langle q' | e^{-\beta H/N} | q \rangle \quad (92)$$

$$= \frac{1}{Z_\beta} \int_{q(0)=q}^{q(\hbar\beta)=q'} \mathcal{D}q \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\hbar\beta)=\mathbf{x}'} \mathcal{D}\mathbf{x} \exp\left(-S^{(E)}[q, \mathbf{x}]/\hbar\right) \quad (93)$$

donde en el último paso hemos sustituido los propagadores por su expresión en integral de camino, las cuales integran sobre todos los posibles caminos tomados por las coordenadas  $q(\hbar\beta)$  y  $\mathbf{x}(\hbar\beta)$  con extremos  $q(0) = q$ ,  $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}$ ,  $q(\hbar\beta) = q'$  y  $\mathbf{x}(\hbar\beta) = \mathbf{x}'$ . La acción euclídea se descompone en las contribuciones del sistema, baño e interacción en la forma:

$$S^{(E)} = S_S^{(E)} + S_B^{(E)} + S_I^{(E)} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left( \mathcal{L}_S^{(E)} + \mathcal{L}_B^{(E)} + \mathcal{L}_I^{(E)} \right). \quad (94)$$

El término acción euclídea como ya se ha visto hace referencia al resultado de la acción clásica procedente del propagador cuántico  $\exp(-iHt/\hbar)$  al someterlo a la rotación de Wick. A partir de esta expresión resulta sencillo calcular la matriz densidad reducida tomando la traza parcial sobre los grados de libertad del baño:

$$\rho_\beta(q', q) = \text{tr}_B W_\beta = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{x} W_\beta(q', \mathbf{x}'; q, \mathbf{x}) \quad (95)$$

$$= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}q \int \prod_{i=1}^N dx_i \oint \prod_{i=1}^N \mathcal{D}x_i \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S^E[q, x_i]\right) \quad (96)$$

Tomamos la traza sobre  $\mathbf{x}$  con el objetivo de eliminar la dependencia de la matriz densidad en estas coordenadas. Sin embargo, como estamos trabajando con integrales de camino, al tomar la traza es necesario imponer la integración sobre caminos cerrados. En otras palabras, imponer una integral de camino cerrada con los límites  $x_n(0) = x_n(\hbar\beta) = x_n$  e integrar sobre estas  $x_n$  es equivalente a tomar la traza de la expresión. Las funciones de partición factorizan en las distintas componentes,

$$Z(\hbar\beta) = \frac{Z_\beta(\hbar\beta)}{Z_B(\hbar\beta)} \quad (97)$$

donde  $Z_B(\hbar\beta)$  es la función de partición únicamente del baño; y lo mismo ocurre para las funciones de partición del sistema. Como hemos considerado un baño de  $N$  modos armónicos sin interacción:

$$Z_B = \prod_{\alpha=1}^N \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega_\alpha / 2)}. \quad (98)$$

Separando las dependencias en los grados de libertad del sistema y del baño, es posible alcanzar una expresión para la matriz densidad reducida en la que se condensan todos los términos de interacción en uno solo. Así,

$$\rho_\beta(q', q) = \frac{1}{Z} \int_{q(0)=q}^{q(\hbar\beta)=q'} \mathcal{D}q \exp\left\{-S_S^{(E)}[q]/\hbar\right\} \mathcal{F}^{(E)}[q] \quad (99)$$

donde

$$\mathcal{F}^{(E)}[q] = \frac{1}{Z_B} \oint_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\hbar\beta)} \mathcal{D}\mathbf{x} \exp\left\{-\left(S_B^{(E)}[\mathbf{x}] + S_I^{(E)}[q, \mathbf{x}]\right)/\hbar\right\} \quad (100)$$

es un término que históricamente se ha llamado **funcional de influencia de Feynman-Vernon**.

### 3.3.2. Aplicación al modelo de Caldeira-Leggett

Procedemos a calcular el funcional de influencia para el hamiltoniano de Caldeira-Leggett, dado por la ecuación (19). La acción euclídea correspondiente vendrá dada por:

$$S^{(E)}[q, \mathbf{x}] = S_S^{(E)}[q] + S_B^{(E)}[\mathbf{x}] + S_I^{(E)}[q, \mathbf{x}] \quad (101)$$

donde podemos calcular cada contribución de la acción realizando una transformada de Legendre sobre los hamiltonianos y aplicando una rotación de Wick sobre los lagrangianos:

$$L(q, \dot{q}) = \sum_{n=1}^N p_n(q, \dot{q}) \dot{q}_n - H(q^n, p_n(\dot{q}_n)) \quad (102)$$

Por ejemplo, para el término del sistema,  $\dot{q} = \frac{\partial H_S}{\partial p} = \frac{p}{M} \Rightarrow p(\dot{q}) = M\dot{q}$ . Así,

$$L = M\dot{q}\dot{q} - \left[ \frac{m^2 \dot{q}^2}{2m} + V(q) \right] = \frac{1}{2} M \dot{q}^2 - V(q) \quad (103)$$

$$S_S^{(E)}[q] = \int_0^{t=-i\hbar\beta} ds \left( \frac{1}{2} M \left( \frac{dq}{ds} \right)^2 - V(q) \right) \quad (104)$$

$$= i \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \left( \frac{M}{2} \dot{q}^2 + V(q) \right) \quad (105)$$

El resto de componentes se calculan análogamente.

$$S_B^{(E)}[\mathbf{x}] = i \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \sum_{n=1}^N \frac{m_n}{2} (\dot{x}_n^2 + \omega_n^2 x_n^2) \quad (106)$$

$$S_I^{(E)}[q, \mathbf{x}] = i \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \left( -q \sum_{n=1}^N c_n x_n + q^2 \sum_{n=1}^N \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^2} \right) \quad (107)$$

y a partir de la ecuación (100),

$$\rho_\beta(q, q') = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}q \exp \left( -\frac{1}{\hbar} S_S^{(E)}[q] \right) \mathcal{F}[q] \quad (108)$$

Como los modos del baño se encuentran desacoplados, es posible factorizar el funcional de influencia en factores correspondientes a cada uno de los modos de oscilación:

$$\mathcal{F}[q] = \prod_{n=1}^N \frac{1}{Z_n} \mathcal{F}_n[q] \quad (109)$$

donde

$$Z_n = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\beta\omega_n/2)}, \quad \mathcal{F}_n[q] = \int dx_n \oint \mathcal{D}x_n \exp \left( -\frac{1}{\hbar} S_n^{(E)}[q, x_n] \right) \quad (110)$$

y como acción euclídea seleccionamos solo los términos con dependencias en  $x_n$ :

$$S_n^{(E)}[q, \mathbf{x}] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{m_n}{2} \left[ \dot{x}_n^2 + \omega_n^2 \left( x_n - \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} q \right)^2 \right] \quad (111)$$

Donde hemos hecho  $d\tau = i d\sigma$ . Si sustituimos esta expresión en la ecuación (110) obtenemos una expresión formal para el funcional. La evaluación no es un proceso sencillo, pero para el modelo de Caldeira-Leggett se puede hacer de diferentes maneras. Lo primero es hallar una solución para la acción euclídiana de la ecuación (111). Mediante las ecuaciones de Euler-Lagrange, se tiene que:

$$\ddot{x}_i^{\text{cl}} - \omega_i^2 x_i^{\text{cl}} = -\frac{c_i}{m_i} q \quad (112)$$



El siguiente paso es calcular las posibles trayectorias con límites  $x_i^{\text{cl}}(0) = x_i^{\text{cl}}(\hbar\beta) = x_i$  resolviendo el problema de contorno. Damos directamente la solución, que es:

$$x_i^{\text{cl}}(\tau) = \frac{\sinh(\omega_i\tau)}{\sinh(\hbar\beta\omega_i)} \left[ x_i + \frac{c_i}{m_i\omega_i} \int_{\tau}^{\hbar\beta} d\sigma \sinh[\omega_i(\hbar\beta - \sigma)] q(\sigma) \right] + \frac{\sinh[\omega_i(\hbar\beta - \tau)]}{\sinh(\hbar\beta\omega_i)} \left[ x_i + \frac{c_i}{m_i\omega_i} \int_0^{\tau} d\sigma \sinh(\omega_i\sigma) q(\sigma) \right] \quad (113)$$

A partir de aquí, integramos la ecuación (111) para obtener el valor de la acción clásica en función de las trayectorias. Debido a la presencia de términos cuadráticos, algunas de las integrales serán gaussianas aunque no todas. Así, llegamos a:

$$S_i^{\text{E,cl}}[q, x_i] = \frac{m_i}{2} \left[ x_i^{\text{cl}}(\hbar\beta) \dot{x}_i^{\text{cl}}(\hbar\beta) - x_i^{\text{cl}}(0) \dot{x}_i^{\text{cl}}(0) \right] + \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{m_i}{2} \left[ -\frac{c_i}{m_i} q x_i^{\text{cl}} + \frac{c_i^2}{m_i^2 \omega_i^2} q^2 \right] \quad (114)$$

Sustituyendo el valor de la trayectoria (113) y realizando una serie de operaciones algebraicas, podemos expresar esta acción en términos de un kernel  $k_n$  como:

$$S_i^{\text{E,cl}}[q, x_i] = m_i \omega_i \frac{\cosh(\hbar\beta\omega_i) - 1}{\sinh(\hbar\beta\omega_i)} \left( x_i - x^{(0)} \right)^2 - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\sigma K_i(\tau - \sigma) q(\tau) q(\sigma) + \frac{c_i^2}{2m_i \omega_i^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau q^2(\tau) \quad (115)$$

donde  $k(\tau)$  es un *kernel* que contiene todos los efectos de memoria del sistema, y puede ser desarrollado en términos de la densidad de modos y de unos parámetros denominados **frecuencias de Matsubara**:

$$k(\tau) = \frac{2}{\hbar\beta} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\nu_l^2}{\omega^2 + \nu_l^2} \exp(i\nu_l\tau). \quad (116)$$

Completando el cuadrado para su posterior integración en  $x_n$ :

$$S_n^{\text{E,cl}}[q] = m_n \omega_n \frac{\cosh(\hbar\beta\omega_n) - 1}{\sinh(\hbar\beta\omega_n)} \left( x_n - x_n^{(0)} \right)^2 \quad (117)$$

$$- \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\sigma K_n(\tau - \sigma) q(\tau) q(\sigma) \quad (118)$$

$$+ \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau q^2(\tau) \quad (119)$$

Por último, integramos la gaussiana para obtener el funcional de uno de los modos:

$$\mathcal{F}_n[q] = \mathcal{Z}_n \exp \left( -\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\sigma k_n(\tau - \sigma) q(\tau) q(\sigma) \right) \quad (120)$$

y utilizando la propiedad (109), terminamos el cálculo del funcional de influencia:

$$\boxed{\mathcal{F}[q] = \exp \left( -\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\sigma k(\tau - \sigma) q(\tau) q(\sigma) \right)} \quad (121)$$

A la hora de evaluar la densidad de modos en este kernel, hay que tener cuidado con la presencia de singularidades. Por ejemplo, si consideramos una densidad óhmica (lineal) en la forma:

$$J(\omega) = M\gamma\omega \quad (122)$$

obtenemos un *kernel* con singularidades, que se pueden resolver introduciendo una ligera modificación (*cutoff*) denominada **corte de Drude**:

$$J(\omega) = M\gamma\omega \frac{\omega_D^2}{\omega^2 + \omega_D^2} \quad (123)$$

que lo que hace es suprimir la influencia de frecuencias superiores a  $\omega_D$ .

El objetivo último de la evaluación del funcional de influencia es encontrar una expresión para la **acción efectiva** del sistema, que incorporará tanto a la acción euclídea como a los términos de influencia procedentes del funcional. Para el modelo de Caldeira-Leggett obtenemos la acción efectiva a partir de la expresión (108) y sumando los exponentes de  $S_S^{(E)}$  y del funcional:

$$S_{\text{eff}}^{(E)}[q] = S_S^{(E)}[q] + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma k(\tau - \sigma) q(\tau) q(\sigma). \quad (124)$$

A partir de este objeto lo último que quedaría por resolver para hallar la dinámica del sistema sería la integral de camino:

$$\rho_\beta(q'', q') = \frac{1}{Z} \int_{q(0)=q'}^{q(\hbar\beta)=q''} \mathcal{D}q \exp \left\{ -S_{\text{eff}}^{(E)}[q] \right\}. \quad (125)$$

## 4. Aplicaciones

El método de Feynman-Vernon es considerado muy potente a la hora de abordar el estudio de la dinámica de sistemas cuánticos abiertos. Debido al gran abarque de esta rama de la física, podemos encontrar problemas tratados con este procedimiento en multitud de disciplinas, como por ejemplo en materia condensada o información cuántica. Por ejemplo, los siguientes problemas han sido tratados con el formalismo de Feynman-Vernon:

- Materia condensada<sup>[3]</sup>
  1. Modelo espín-bosón: Se calcula el funcional de influencia del modelo espín-bosón, que es una instancia del modelo de Caldeira-Leggett consistente en dos estados con transiciones disipativas entre niveles.
  2. Modelos superconductores: Se calcula la función de partición por el método de la integral de camino de una interfaz de Josephson. El efecto Josephson es un efecto físico que se manifiesta por la aparición de una corriente eléctrica por efecto túnel entre dos superconductores separados.
- Información cuántica
  1. Estimación de errores<sup>[6]</sup>: Se representa una operación cuántica general como una integral de camino doble y se integra el entorno para obtener un funcional de influencia de Feynman para los qubits que permite estimar errores de un ordenador cuántico.
  2. Estudio de decoherencias<sup>[7]</sup>: Se estudian las propiedades de coherencia de un qubit *quantum dot* entrelazado de manera no-markoviana con su entorno.
- Física teórica
  1. Cosmología (inflación)<sup>[8]</sup>: Se describe el paso del régimen clásico al cuántico de las fluctuaciones cuánticas durante la inflación por medio de un funcional de influencia de Feynman y una ecuación maestra.
  2. QCD<sup>[9]</sup>: Se encuentra un funcional de Feynman-Vernon para una teoría efectiva de cromodinámica cuántica para gluones a alta temperatura denominada *ultrasoft QCD*.

## Referencias

- [1] R.P. Feynman & F.L. Vernon “*The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system,*” *Annals of Physics* 24, 118 – 173 (1963)
- [2] H. P. Breuer & F.Petruccione *The Theory of Open Quantum Systems*
- [3] U. Weiss *Quantum Dissipative Systems*
- [4] G. L. Ingold *Path Integrals and Their Application to Dissipative Quantum Systems*
- [5] T. Brandes *Lectures on Background to Quantum Information. Chapter 7 (Quantum Dissipation)*
- [6] Erik Aurell *Global estimates of errors in quantum computation by the Feynman-Vernon formalism* [arxiv.org/abs/1606.09407](https://arxiv.org/abs/1606.09407)
- [7] Tu, Lee, Zhang *Exact Master Equation and Non-Markovian Decoherence for Quantum Dot Quantum Computing* [arxiv.org/abs/0910.0302](https://arxiv.org/abs/0910.0302)
- [8] F.C. Lombardo *Influence functional approach to decoherence during Inflation* [arxiv.org/abs/gr-qc/0412069](https://arxiv.org/abs/gr-qc/0412069)
- [9] Guerin, Lancu *An influence functional for ultrasoft QCD* [arxiv.org/abs/hep-ph/0212036](https://arxiv.org/abs/hep-ph/0212036)