

DECOHERENCIA EN PUNTOS CUANTICOS VIA FONONES OPTICOS Y  
ACUSTICOS.



JUAN PABLO HOYOS DAZA.

Trabajo de grado en la modalidad de trabajo de investigación presentado como requisito  
parcial para optar al título de Ingeniero Físico.

Director:

Ph.D. SERVIO TULIO PÉREZ MERCHANCANO.

UNIVERSIDAD DEL CAUCA.

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE EDUCACIÓN.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA.

INGENIERÍA FÍSICA.

POPAYÁN.

2011.

DECOHERENCIA EN PUNTOS CUANTICOS VIA FONONES OPTICOS Y  
ACUSTICOS.

JUAN PABLO HOYOS DAZA.

UNIVERSIDAD DEL CAUCA.

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE EDUCACIÓN.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA.

INGENIERÍA FÍSICA.

POPAYÁN.

2011.

Nota de aceptación

\_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_

Director \_\_\_\_\_

SERVIO TULIO PEREZ

Ph.D en Ciencias-Físicas.

Jurado: \_\_\_\_\_

LUZ ELENA BOLIVAR.

Ph.D en Ciencias-Físicas.

Jurado: \_\_\_\_\_

JORGE WASHINGTON CORONEL GARCÍA.

MsC. En Ciencias- Físicas.

Fecha de sustentación: Popayán, 18 de Enero de 2011.

## **AGRADECIMIENTOS**

A:

Mis padres, por su apoyo incondicional.

Las personas que me enseñaron a leer y escribir.

Los maestros: Jorge Washington Coronel, Álvaro Efraín Bastidas y Luis Fernando Echeverri, quienes a través de la enseñanza me incentivaron y motivaron el amor y pasión por la física.

La Universidad del Cauca, grupo SENUMA y director de grupo Ph. Servio Tulio Pérez.

# CONTENIDO

## INTRODUCCIÓN

### **1. PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS Y DECOHERENCIA**

1.1 Puntos cuánticos.

1.2 Decoherencia.

### **2. SISTEMAS ABIERTOS Y CERRADOS**

2.1 Dinámica de sistemas cerrados.

2.1.1 Matriz de densidad(operador estadístico).

2.2 Dinámica de sistemas abiertos.

### **3. ECUACIÓN MAESTRA PARA LA DECOHERENCIA**

3.1 Formalismo general.

3.2 Ecuación maestra de Born-Markov.

### **4. SISTEMAS CUÁNTICOS DISIPATIVOS**

4.1 Movimiento browniano cuántico.

4.2 Disipación en sistemas de dos niveles.

### **5. BAÑOS EFECTIVOS PARA ESPIN EN PUNTOS CUANTICOS**

5.1 Acoplamiento espín-orbita.

5.2 Interacción fonón-electrón.

5.3 Interacción piezoeléctrica.

5.4 Interacción de Fröhlich.

5.5 Función espectral de la interacción con fonones acústicos.

5.6 Función espectral de la interacción con fonones ópticos.

## **6. CONCLUSIONES**

### **APÉNDICES**

- A. Representación de Heisenberg y de interacción.
- B. Procesos de diagonalización.
- C. Oscilador armónico como sistema central.

### **REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

## INTRODUCCIÓN

Con el surgimiento de técnicas capaces de crecer y manipular estructuras cada vez menores, cuyo objetivo es el de la nanotecnología, surgen desafíos que involucran efectos cuánticos. Al hablar de nanotecnología nos referimos al mundo en el que prevalece la mecánica cuántica.

En el ámbito de la nanotecnología y la nanociencia es inevitable referirnos a los llamados puntos cuánticos [1]. Estas son estructuras capaces de almacenar electrones, lo cual abre una gran posibilidad tecnológica particularmente en la construcción y desempeño de swiches, cavidades cuánticas, nanocapacitadores, láseres, etc. Para dar uso a estos sistemas es necesario un conocimiento de los fenómenos cuánticos que para ellos son importantes, tales como el acoplamiento espín-orbita, interacciones entre los electrones y los iones de la red cristalina, decoherencia entre otros.

Lo interesante de este trabajo se relaciona con la delicada transición del mundo cuántico al mundo clásico. Esto tiene que ver específicamente con la decoherencia de espín electrónico almacenado en puntos cuánticos.

Como sabemos de la mecánica cuántica, el medio que cubre a un sistema puede “observar” el comportamiento del sistema. Como resultado, los estados propios observables del sistema pierden coherencia y se convierten en sistemas clásicos [2,3,4]. Los efectos de la decoherencia dependen del acoplamiento entre el sistema cuántico y los grados de libertad del resto del universo donde está inmerso el sistema. Entonces al hablar de decoherencia de espín en puntos cuánticos necesariamente trataremos con el medio del cual hacen parte esos puntos cuánticos

Entretanto, la propuesta de la computación cuántica [5,6], surge como una posible aplicación, que requiere sistemas de dos niveles preparados a partir de la superposición de estados cuánticos. Así sistemas de dos niveles tales como el espín electrónico y el espín del núcleo se avizoran como los mejores candidatos para ser estudiados e implantados.

La posibilidad de fabricar puntos cuánticos capaces de almacenar un único electrón hará posible usar el espín electrónico en el campo de la información cuántica. El aprovechamiento del espín como “qubit” (es el estado lógico en información cuántica, que está conformado por dos niveles como en informática usual 0 o 1, solo que los qubits pueden tener infinitos grados de libertad, al superponer sus dos niveles base) [6], es preciso que cumpla con un límite de tiempo de coherencia, lo que lleva a indagar específicamente sobre la decoherencia del espín electrónico en puntos cuánticos.

El objetivo de este trabajo es estudiar la decoherencia de espín electrónico en puntos cuánticos, a través de la interacción con fonones ópticos y acústicos. Aquí la decoherencia surge del hecho de que el espín del electrón inmerso en el punto cuántico interactúa con un baño de energía el cual está conformado por los fonones de la red cristalina. El acoplamiento ocurre a través de la interacción espín-orbita. En puntos cuánticos “grandes” (cuya frecuencia característica es mucho menor que la frecuencia de los modos ópticos) el reservorio es de fonones acústicos. Mientras para el caso de puntos cuánticos con frecuencia próxima a la frecuencia de los fonones ópticos, el acoplamiento electrón-fonón óptico es el primordial en los procesos de relajación del electrón y por lo tanto, la decoherencia del espín estará muy ligada a este tipo de interacción.

El esquema adoptado para el estudio de estos sistemas es el modelo fenomenológico de Caldeira-Leggett, que permite enfocar el problema, y conduce a la función espectral, la cual se usa para responder la cuestión sobre la decoherencia del espín electrónico en puntos cuánticos. Para tal fin en la siguiente sección se tratará la temática concerniente a puntos cuánticos y decoherencia.



# CAPITULO 1: PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS Y DECOHERENCIA

## 1.1. PUNTOS CUANTICOS

El término punto cuántico se utiliza, generalmente, para describir un nano-cristal (en nuestro caso el de un material semiconductor) en el cual el confinamiento es en las tres dimensiones espaciales. Las fronteras físicas de los puntos cuánticos (PCs) confinan a los portadores de carga dentro del material.

Estas estructuras se comportan como átomos artificiales donde el potencial del núcleo es sustituido por el potencial de confinamiento, y conduce a la cuantización de los niveles de energía. El confinamiento da lugar a propiedades inusuales que no se manifiestan en materiales en forma de bloque o tamaños macroscópicos. Por ejemplo, el silicio, material usado en las aplicaciones tecnológicas, se caracteriza por ser débil emisor de luz en su forma en bloque, debido a que su estructura de bandas de energía es indirecta, y se vuelve un buen emisor de luz cuando se le confina en forma de PCs [7]. El confinamiento de los portadores de carga se puede ajustar variando el tamaño de los PCs, lo cual afecta algunas propiedades fundamentales del material.

De las propiedades más interesantes de los puntos cuánticos es que, al ser iluminados, remiten luz en una longitud de onda muy específica que depende del tamaño del punto. Cuanto más pequeños sean los puntos, menor es la longitud de onda y más acusadas las propiedades cuánticas de la luz que emiten.

Una medida del tamaño del nano-cristal requerido para observar efectos cuánticos es la longitud de onda de Broglie de los portadores de carga dentro del material huésped, que es típicamente del orden de algunas decenas de nanómetros. Si se considera PCs esféricos con un diámetro ( $D$ ), el nivel de confinamiento se puede caracterizar por su relación con el radio de Bohr ( $a_B$ ) del excitón (par electrón-hueco ligados electrostáticamente). Fuerte

confinamiento ocurre cuando  $D < 2a_B$ , confinamiento intermedio cuando  $D \sim 2a_B$ , y el confinamiento se considera débil cuando  $D > 2a_B$  [8]

Las funciones de onda correspondientes están espacialmente localizadas dentro del punto cuántico, pero se extienden sobre muchos períodos de la red cristalina. Un punto cuántico contiene un número reducido, y finito, de electrones de la banda de conducción, huecos en la banda de valencia, o de excitones, es decir, un número finito de cargas eléctricas elementales.

En el mundo macroscópico, los puntos cuánticos pueden tener el aspecto de una simple pastilla plana, o estar disueltos en un líquido. Nadie sospecharía que la muestra ha sido elaborada en el laboratorio partiendo de unos pocos átomos, con técnicas que manipulan la materia a escalas de nanómetros. A esas dimensiones el material se convierte en una matriz sobre la que han crecido estructuras, como pirámides o montañas, formadas por unos pocos cientos o miles de átomos.

Los PCs se pueden preparar usando varias técnicas incluyendo las siguientes: litografía, epitaxia de haces moleculares y métodos coloidales [9-11]. Todos estos métodos comparten la característica común de que el PC es delimitado con un material distinto como frontera. Hay otros métodos para crear los PCs donde bloqueos o trampas eléctricas se utilizan para añadir confinamiento a electrones de un gas bidimensional dentro de un pozo cuántico.

En cualquiera de estos casos, los sistemas electrónicos contenidos dentro de los PCs se aíslan mejor del ambiente y tienen menores grados de libertad internos que otros sistemas con más dimensiones. Ambas características son útiles para aumentar los tiempos de coherencia de los estados cuánticos del punto. De aquí las potenciales aplicaciones que los PCs exhibe para la computación e información cuántica de estado sólido, dado que la dinámica del sistema, debe mantenerse sin destruirse hasta un tiempo considerable para hacer las operaciones necesarias, por lo tanto, se ha causado gran interés en los usos potenciales que tienen los PCs.

Los puntos cuánticos auto ensamblados son más beneficiosos ya que evitan emplear técnicas costosas para delimitar estas nano estructuras. Adicionalmente, no hay daño en los PCs durante su fabricación ya que en todo el proceso se realiza el crecimiento de los

materiales. Sin embargo, para lograr buenos resultados en la aplicación de PCs autoensamblados se deben mantener requerimientos estrictos en cuanto a la uniformidad en el tamaño, forma y densidad. El mecanismo más efectivo para la construcción de estas estructuras a escala manométrica es por epitaxia de haces moleculares (**MBE, molecular beam epitaxy**) [12]. En este tipo de punto cuántico existe la posibilidad de almacenar un único electrón por punto cuántico con relativa facilidad. Se espera que con técnicas de resonancia de espín, se puedan manipular los niveles arriba-abajo tanto del electrón como del núcleo, convirtiéndose en un sistema de dos niveles manipulable, y de semejanza al espín nuclear, por eso el espín electrónico es objeto de estudio.

En este trabajo el interés está en el fenómeno de decoherencia de espín de los electrones confinados en lo PCs, entonces a continuación daremos una breve información sobre decoherencia.

## 1.2. DECOHERENCIA

Para hablar de decoherencia se debe tener en cuenta el principio de superposición de la mecánica cuántica. De acuerdo a este principio, los estados de un sistema físico pertenecen a un espacio lineal y por tanto se superponen linealmente. Dichos estados de un sistema cuántico evolucionan de acuerdo con la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad (1.1)$$

Dado un estado inicial del sistema y su Hamiltoniano  $H$ , se puede calcular el estado para cualquier tiempo después, el sistema descrito por  $|\psi\rangle$  evoluciona a uno que contiene simultáneamente muchas alternativas que en el mundo clásico no pueden coexistir: una superposición lineal de estados. Sin embargo ¿cuál es la probabilidad de observar uno de esos estados?

Por simplicidad se considera un sistema de dos niveles cuyos estados propios son  $|a\rangle$  y  $|b\rangle$ , con energías  $E_a$  y  $E_b$  respectivamente. Como condición inicial se impone que el sistema fue preparado en el estado:  $|\psi\rangle = \alpha|a\rangle + \beta|b\rangle$ , entonces su operador densidad es:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = |\alpha|^2|a\rangle\langle a| + |\beta|^2|b\rangle\langle b| + 2\text{Re}(\alpha\beta^*|a\rangle\langle b|) \quad (1.2)$$

Los detalles del operador densidad están en el siguiente capítulo. El resultado anterior tiene un término de interferencia entre el estado  $|a\rangle$  y el estado  $|b\rangle$  que clásicamente no existe y que mientras el sistema este “aislado” estará oscilante, la probabilidad de encontrar el sistema en uno de los dos estados. Se dice entonces que el sistema es coherente siempre que presente dicho fenómeno de interferencia, que lo diferencia de cualquier sistema clásico.

El proceso de decoherencia induce la transición desde el mundo cuántico al mundo clásico destruyendo la interferencia y las correlaciones cuánticas. La superposición lineal de estados se vuelve una mezcla clásica, a través de diferentes mecanismos como la interacción con un medio o con otros grados de libertad.

Para representar gráficamente el desaparecimiento de la interferencia, sean dos paquetes de onda gaussianos localizados en un potencial armónico unidimensional. Como se ve en la figura 1.1. El estado inicial es la suma de dos estados coherentes y su evolución temporal está determinada por la energía cinética y el potencial armónico, cuando los paquetes se aproximan espacialmente, se crea un patrón de interferencia.

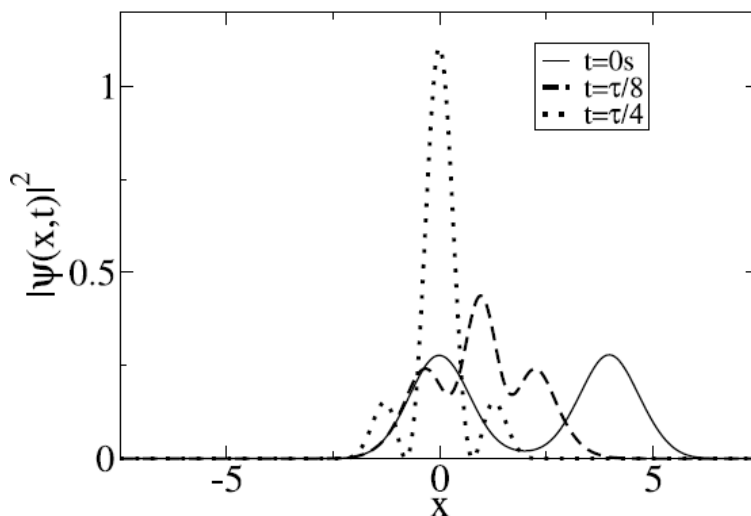


Figura 1.1: dos paquetes de onda gaussianos coherentes, en un potencial armónico.

Una vez que la coherencia del sistema desaparece el patrón de interferencia también lo hace dando paso a las probabilidades clásicas, figura 1.2.

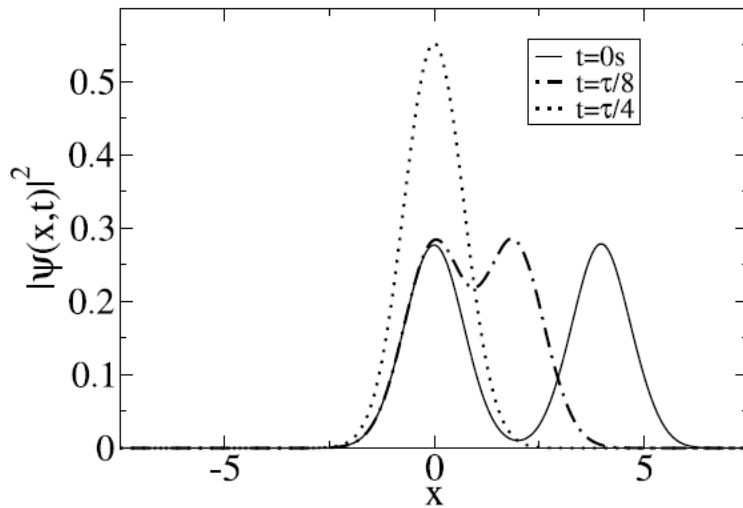


Figura 1.2: mezcla estadística de dos paquetes de onda en un potencial armónico en función de la posición.

En el siguiente capítulo se detallará sobre el operador densidad y su utilidad para la descripción de sistemas aislados, como para aquellos que interactúan con sus alrededores.

## **CAPITULO 2: SISTEMAS ABIERTOS Y CERRADOS**

### **2.1 DINÁMICA DE SISTEMAS CERRADOS**

#### **2.1.1 MATRIZ DE DENSIDAD (OPERADOR ESTADÍSTICO U OPERADOR DENSIDAD)**

En el estudio de sistemas cuánticos se usa con entera libertad frases como “supongamos que el sistema se encuentra en el estado  $n$ ”, sobreentendiendo que el estado  $|n\rangle$  es un estado propio de un conjunto de operadores conmutativos y que esta clasificación es suficiente para el estudio de los sistemas cuánticos. Sin embargo un sistema físico no necesariamente puede ser caracterizado con una función de onda  $\psi_n(x)$ . Sucede con frecuencia que el ensemble cuántico de interés está constituido a su vez por varios subensembles independientes entre sí. En tales casos una variable dinámica  $A$  puede estar bien definida en cada uno de los subensembles y tener el valor  $A_i$ ; por lo que el valor medio sobre todo el ensemble que se le debe asignar a esta variable depende de que tanto contribuye (que tanto pesa) cada uno de los subensembles.

Se trata de pasar de la teoría cuántica que utiliza un vector de estado, para la descripción de los sistemas, a la de sistemas cuya descripción requiere un conjunto apropiado de vectores de estado y los pesos correspondientes. Una forma simple de lograr este propósito se obtiene con la introducción de la llamada matriz de densidad, propuesta independientemente por Lev D. Landau y J. Von Neumann en 1927.

## ESTADOS PUROS

Si los sistemas o objetos bajo investigación están todos en el mismo estado  $|\psi\rangle$  se habla de un ensamble puro, o se dice que el sistema está en un estado puro.

Sea un sistema que está en el estado  $|\psi\rangle$ . En este estado, el observable  $A$  tiene el valor esperado:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Utilizando la relación de clausura:

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbf{1}$$

Se tiene:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \mathbf{1} | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | A | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | A | n \rangle$$

La estructura del valor esperado sugiere que se defina la matriz densidad de la siguiente manera:

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi| \Rightarrow \langle A \rangle = \sum_n \langle n | \rho A | n \rangle \quad (2.1)$$

De la definición de traza, se puede expresar el valor esperado como:

$$\text{tr}\{X\} = \sum_n \langle n | X | n \rangle \Rightarrow \langle A \rangle = \sum_n \langle n | \rho A | n \rangle = \text{tr}\{\rho A\} \quad (2.2)$$

Algunas propiedades del operador  $\rho$  son: si se hace  $A=\mathbf{1}$  en la ecuación (2.2), se tiene:

$$\langle A \rangle = \langle \mathbf{1} \rangle = \mathbf{1} = \sum_n \langle n | \rho | n \rangle = \text{tr}\{\rho\} \Rightarrow \text{tr}\{\rho\} = \mathbf{1}$$

Otra es:

$$\rho^2 = \rho \cdot \rho = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho$$

Además la traza es independiente de la base. Para demostrar esto sean  $\{|n\rangle\}$  y  $\{|m\rangle\}$  dos bases de sistemas diferentes, se tiene:

$$\text{tr}\{X\} = \sum_n \langle n|X|n\rangle = \sum_n \langle n|X\mathbf{1}|n\rangle = \sum_m \sum_n \langle n|X|m\rangle\langle m|n\rangle = \sum_m \sum_n \langle m|n\rangle \langle n|X|m\rangle$$

Utilizando la relación de clausura se logra lo que se afirmo:

$$\text{tr}\{X\} = \sum_m \langle m|X|m\rangle$$

Para probar la superposición coherente característica de un estado puro, es decir, un estado capaz de dar lugar a la interferencia, se parte de:

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$$

La matriz de densidad, con la representación de este estado puede representarse así:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{n,q} C_n C_q^* |n\rangle\langle q| = \sum_n |C_n|^2 |n\rangle\langle n| + \sum_{n \neq q} C_n C_q^* |n\rangle\langle q|$$

El grupo de términos diagonales puede expresarse de esta manera:

$$\sum_n |C_n|^2 |n\rangle\langle n| = \rho_n$$

Es decir como una suma incoherente (Sin interferencias) de las contribuciones de cada uno de los estados puros  $|n\rangle$  con matriz de densidad  $\rho_n = |n\rangle\langle n|$ . El resto de términos en la expresión para  $\rho$ , constituye la contribución de las interferencias entre los estados  $|n\rangle$  y  $|q\rangle$ , Si la superposición fuera incoherente estos términos no podrían aparecer.



## ESTADOS MIXTOS O MEZCLADOS

Como el ensemble cuántico está constituido por varios subensembles independientes entre ellos, si al ensemble  $i$  se le asigna peso  $p_i$  (lo que equivale a suponer que del total de sistemas que componen el ensemble, una fracción  $p_i$  de ellos se encuentra o ha sido preparado en el estado  $i$  el promedio de un observable  $A$  sobre el ensemble se define de esta manera:

$$\langle A \rangle = \sum_i P_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle \quad (2.3)$$

Nuevamente utilizando la relación de clausura.

$$\langle A \rangle = \sum_i P_i \langle \psi_i | A \mathbf{1} | \psi_i \rangle = \sum_i \sum_n P_i \langle \psi_i | A | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle = \sum_i \sum_n P_i \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | A | n \rangle \quad (2.4)$$

Esta estructura para el valor esperado sugiere definir la matriz densidad como:

$$\rho = \sum_i P_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \Rightarrow \langle A \rangle = \sum_n \langle n | \rho A | n \rangle = \text{tr}\{\rho A\} \quad (2.5)$$

Como por definición los pesos  $p_i$  son positivos y reales :  $p_i \geq 0, p_i^* = p_i$  . Algunas propiedades de  $\rho$  son:

$$\rho^\dagger = \left( \sum_i P_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right)^\dagger = \sum_i P_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \rho, \text{ vemos que } \rho \text{ es hermitica}$$

$$\rho^2 = \sum_i \sum_j P_i P_j |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle\langle\psi_j| \neq \rho$$

Nuevamente haciendo  $A=1$  en la ecuación (2.5), se tiene:

$$\langle I \rangle = I = \text{tr}\{\rho\} \Rightarrow \text{tr}\{\rho\} = 1$$

Para cada  $|\psi\rangle$ , el valor esperado de  $\rho$ :

$$\langle \psi | \rho | \psi \rangle = \sum_i P_i \langle \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi \rangle = \sum_i P_i |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2 \geq 0$$

Por lo tanto  $\rho$  es un operador positivo, como  $\rho$  es hermitico, sus valores propios son positivos y reales.

Para dos distintos estados, no necesariamente ortogonales se tiene:

$$\text{tr}\{\rho^2\} = \sum_n \sum_{i,j} P_i P_j \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi_j \rangle \langle \psi_j | n \rangle = \sum_n \sum_{i,j} P_i P_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle \langle \psi_j | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle$$

Utilizando la relación de clausura:

$$\text{tr}\{\rho^2\} = \sum_{i,j} P_i P_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \psi_i \rangle = \sum_{i,j} P_i P_j |\langle \psi_i | \psi_j \rangle|^2$$

Como:

$$\sum_i P_i = \sum_j P_j = 1 \Rightarrow \text{tr}\{\rho^2\} = \sum_{i,j} P_i P_j |\langle \psi_i | \psi_j \rangle|^2 < \sum_i P_i \sum_j P_j = 1$$

El criterio para que un estado sea puro o mezcla es :  $\text{tr}\{\rho^2\} = 1$  o  $\text{tr}\{\rho^2\} < 1$ , respectivamente. Cualquier matriz hermitiana positiva y definida (es decir con elementos en la diagonal principal no negativos) de traza 1 puede ser tomada como una matriz densidad.

Ahora se derivara la ecuación del movimiento para una matriz de densidad arbitraria  $\rho$ , derivando  $\rho$  respecto al tiempo, se tiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_i P_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) = \sum_i P_i \frac{\partial}{\partial t} (|\psi_i\rangle \langle \psi_i|) = \sum_i P_i (|\dot{\psi}_i\rangle \langle \psi_i| + |\psi_i\rangle \langle \dot{\psi}_i|) \quad (2.6)$$

De la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_i\rangle = H |\psi_i\rangle \quad y \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_i| = \langle \psi_i| H$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_i P_i \left( \frac{H}{i\hbar} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| - \frac{1}{i\hbar} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| H \right) = \frac{1}{i\hbar} \sum_i P_i (H |\psi_i\rangle \langle \psi_i| - |\psi_i\rangle \langle \psi_i| H)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}(H\rho - \rho H) \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] \quad (2.7)$$

A esta expresión se le conoce como ecuación de Von Neumann. La ecuación cuántica (2.7) es análoga al teorema de Liouville de la mecánica estadística clásica, la cual establece que el número de estados contenidos en una región dada del espacio de fases se conserva.

Se puede definir el operador de Liouville tal que  $L \cdot := [H, \cdot]$ , resultando  $L\rho = [H, \rho]$  y la ecuación de Von Neumann tome la forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}L\rho \quad (2.8)$$

Que es la ecuación de Liouville-Von Neumann, que aplica para Hamiltonianos dependientes del tiempo.

## 2.2. DINÁMICA DE SISTEMAS ABIERTOS

Después de haber descrito brevemente las ecuaciones de la dinámica del Hamiltoniano de un sistema cuántico cerrado, se describe las nociones de un sistema abierto.

En términos generales, un sistema abierto es un sistema cuántico  $s$  que esta acoplado a otro sistema cuántico  $\varepsilon$  llamado ambiente (medio, reservorio). El sistema  $s$  representa un subsistema del sistema combinado total  $s + \varepsilon$ , por lo cual en la mayoría de los casos se asume que el sistema combinado es cerrado siguiendo la dinámica ya vista. El estado del subsistema  $s$ , sin embargo, cambiara como una consecuencia de sus dinámicas internas y de la interacción con los alrededores. La interacción conduce a ciertas correlaciones sistema-ambiente de forma que los cambios del estado  $s$  ya no pueden, en general ser representadas en términos de dinámicas unitarias del Hamiltoniano. La dinámica del subsistema  $s$  inducida por la evolución del Hamiltoniano del sistema total es a menudo llamada como dinámica del sistema reducido y  $s$  es llamado el sistema reducido. El espacio de Hilbert del sistema total  $s + \varepsilon$  es dado por el producto tensorial:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_\varepsilon .$$

Donde:

$\mathcal{H}_S$ -Espacio de Hilbert del sistema

$\mathcal{H}_\varepsilon$ -Espacio de Hilbert del ambiente (reservorio)

El Hamiltoniano total puede ser tomado de la forma:

$$H(t) = H_S \otimes I_\varepsilon + I_S \otimes H_\varepsilon + H_{int}$$

Donde:

$H_S$ - Hamiltoniano del sistema abierto  $s$ .

$H_\varepsilon$ - Hamiltoniano libre del medio

$H_{int}$ - Hamiltoniano que describe la interacción entre el sistema y el ambiente.

Los observables referidos a  $s$  son todos de la forma  $A \otimes I_\varepsilon$ , donde  $A$  es un operador que actúa sobre el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_S$  y  $I_\varepsilon$  denota la identidad en el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_\varepsilon$ . Si el estado del sistema total es descrito por alguna matriz de densidad  $\rho$ , entonces el valor esperado de todos los observables actuando sobre el espacio de Hilbert del sistema abierto son determinados a través de la formula:

$$\langle A \rangle = tr_S \{ A \rho_S \} \tag{2.9}$$

Aquí  $tr_S$  es la traza parcial sobre el espacio de Hilbert del sistema abierto y:

$$\rho_S = tr_\varepsilon \{ \rho \} \tag{2.10}$$

Donde  $tr_\varepsilon$  es la traza parcial sobre los grados de libertad de  $\varepsilon$ ,  $\rho_S$  es la matriz densidad reducida del sistema cuántico abierto  $s$  y es la cantidad central de interés en la descripción de sistemas cuánticos abiertos.

La matriz densidad reducida  $\rho_S(t)$  para un tiempo  $t$  es obtenida de la matriz densidad  $\rho(t)$  del sistema total la cual evoluciona unitariamente:  $\rho(t) = U^\dagger(t, t_0) \rho(t_0) U(t, t_0)$ , tomando la traza parcial sobre los grados de libertad del ambiente:

$$\rho_s(t) = \text{tr}_\varepsilon\{U^\dagger(t, t_0)\rho(t_0)U(t, t_0)\} \quad (2.11)$$

De una manera análoga la ecuación dinámica para la matriz de densidad reducida, es obtenida tomando la traza parcial sobre el ambiente en ambos lados de la ecuación de Liouville-Von Neumann (2.7) para el sistema total:

$$\frac{\partial}{\partial t} \text{tr}_\varepsilon\{\rho(t)\} = -\frac{i}{\hbar} \text{tr}_\varepsilon[H(t), \rho(t)]$$

Por lo que en virtud de la ecuación (2.10):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_s(t) = -\frac{i}{\hbar} \text{tr}_\varepsilon[H(t), \rho(t)] \quad (2.12)$$

Una vez vista la herramienta para tratar de manera más general tanto los sistemas cerrados como abiertos, en el siguiente capítulo se describirá la dinámica de la decoherencia en términos de la llamada ecuación maestra.

## CAPITULO 3: ECUACIÓN MAESTRA PARA LA DECOHERENCIA

Contrario a lo mostrado en sistemas cerrados, la dinámica cuántica de un sistema abierto no puede en general ser representado en términos de una evolución temporal unitaria. Resulta útil analizar la dinámica cuántica de un sistema abierto por medio de una ecuación maestra. El énfasis está sobre la dinámica Markoviana de un sistema abierto, el cual puede ser considerado como una generalización directa del concepto clásico de probabilidad. La dinámica de un semi-grupo cuántico da surgimiento a una ecuación diferencial lineal de primer orden para la matriz de densidad reducida, que es conocida como la ecuación maestra Markoviana.

Se introduce la descripción de la dinámica de la Decoherencia en términos de la ecuación maestra, ya que esta produce la evolución temporal de la matriz de densidad reducida  $\rho_S(t)$  para el sistema cuántico abierto  $s$  interactuando con un ambiente  $\varepsilon$ .

### 3.1 FORMALISMO GENERAL

Del capítulo 2 se tiene que la matriz densidad reducida es calculada por la ecuación (2.11). Este enfoque inevitablemente requiere que primero se determine las dinámicas  $\rho(t)$  del sistema total  $s + \varepsilon$  antes de que se pueda llegar a la descripción reducida a través de la operación traza. Esta tarea es muy difícil, si no imposible para llevarla a la práctica. Por contraste, en el formalismo de la ecuación maestra, en cambio se puede calcular  $\rho_S(t)$  directamente de una expresión de la forma:

$$\rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) \tag{3.1}$$

Donde el operador  $V(t)$  es el llamado mapa dinámico que genera la evolución de  $\rho_S(t)$ . Esta ecuación es llamada la ecuación maestra para  $\rho_S(t)$ , y representa la forma más general que tal ecuación maestra puede tomar.

Obviamente si la ecuación maestra es exacta, entonces las ecuaciones (2.11) y (3.1) deben ser equivalentes:

$$V(t)\rho_S(0) = \text{tr}_E\{U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)\}$$

Y la ecuación maestra no sería nada más que una reescritura trivial de la ecuación (2.11). Por lo tanto el poder de la ecuación maestra es solamente desbloqueado una vez se impongan ciertas suposiciones sobre los estados y la dinámica del sistema-medio. Tales suposiciones entonces permitirán determinar la evolución temporal aproximada de  $\rho_S(t)$  incluso cuando es imposible calcular la dinámica global exacta de  $\rho(t)$ . Se limitara a ecuaciones maestras que pueden ser escritas como ecuaciones diferenciales de primer orden que son locales en el tiempo. Por ejemplo que puede expresarse en la forma:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = L[\rho_S(t)] = -i[H'_S, \rho_S(t)] + D[\rho_S(t)] \quad (3.2)$$

Esta ecuación es local en el tiempo el sentido que el cambio de  $\rho_S$  para un tiempo  $t$  depende solamente sobre  $\rho_S$  evaluada para un tiempo  $t$  pero no para cualquier otros tiempos  $t' \neq t$ . El súper operador  $L$  actúa sobre  $\rho_S$  y típicamente depende de los estados iniciales del medio y los diferentes términos del Hamiltoniano. Para expresar la idea física detrás de este súper operador,  $L$  ha sido descompuesto en dos partes:

1. una parte unitaria que está dada por el conmutador de Liouville-Von Neumann con el Hamiltoniano  $H'_S$ . Es importante notar que este Hamiltoniano no es en general idéntico al Hamiltoniano libre sin perturbar  $H_S$  de  $s$  que generaría la evolución de  $s$  en ausencia del medio, porque la presencia del medio a menudo perturba al Hamiltoniano libre, produciendo una renormalización de los niveles de energía del sistema.
2. Una parte no unitaria  $D[\rho_S(t)]$  que representa la Decoherencia (y posiblemente también disipación) debido al medio. Este término será de nuestro mayor interés, en lo que sigue.

### 3.2. ECUACIÓN MAESTRA DE BORN-MARKOV

Esta ecuación tiene un gran papel en el estudio de sistemas cuánticos abiertos y la Decoherencia. Comparaciones entre las predicciones de modelos basados en esta ecuación y datos experimentales comprueban que las suposiciones de Born y Markov sobre las cuales la ecuación maestra está basada son razonables en muchos casos.

#### ESTRUCTURA DE LA ECUACIÓN MAESTRA DE BORN-MARKOV

La ecuación maestra de Born-Markov está basada sobre dos principales aproximaciones que pueden ser en general afirmadas como sigue:

1. Aproximación de Born: establece que el acoplamiento sistema-medio es suficientemente débil, el medio es razonablemente grande en comparación al sistema, tal que cambios del operador de densidad del medio son insignificantes y el estado del sistema-medio permanece aproximadamente en un producto de estado todo el tiempo:

$$\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_\varepsilon$$

Con  $\rho_\varepsilon$  aproximadamente constante todo el tiempo.

2. Aproximación de Markov: establece que los “Efectos de memoria” del medio son insignificantes, en el sentido que cualquier auto correlación del ambiente creado por el acoplamiento al sistema decae rápidamente comparado con las escalas de tiempo características sobre el cual el estado del sistema varía notablemente.

Se Asumen estas dos suposiciones. Además supóngase que el sistema  $s$  tiene un Hamiltoniano propio  $H_S$  y que su acoplamiento al medio esta descrito por el Hamiltoniano de interacción  $H_{int}$ , que se puede escribir en la forma diagonal:



$$H_{int} = \sum_{\alpha} S_{\alpha} \otimes E_{\alpha} \quad (3.3)$$

La interpretación física intuitiva de la descomposición diagonal de la ecuación (3.3) es que los operadores  $S_{\alpha}$  corresponden a las cantidades físicas del sistema que están continuamente “monitoreadas” por el medio.

La evolución del operador de matriz de densidad reducida esta dado por la ecuación maestra de Born-Markov:

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i[H_S, \rho_S(t)] - \sum_{\alpha} \{[S_{\alpha}, B_{\alpha} \rho_S(t)] + [\rho_S(t) C_{\alpha}, S_{\alpha}]\} \quad (3.4)$$

Para detalles de la derivación de la ecuación anterior el lector puede remitirse a la siguiente referencia [21].

Los operadores del sistema  $B_{\alpha}$  y  $C_{\alpha}$  que aparecen en esta ecuación son definidos como:

$$B_{\alpha} \equiv \int_0^{\infty} \sum_{\beta} C_{\alpha\beta}(\tau) S_{\beta}^{(I)}(\tau) d\tau \quad (3.5)$$

$$C_{\alpha} \equiv \int_0^{\infty} \sum_{\beta} C_{\beta\alpha}(-\tau) S_{\beta}^{(I)}(-\tau) d\tau \quad (3.6)$$

Aquí  $S_{\alpha}^{(I)}(-\tau)$  denota el operador del sistema  $S_{\alpha}$  en la representación de interacción. La cantidad  $C_{\alpha\beta}(\tau)$  es dada por:

$$C_{\alpha\beta}(\tau) \equiv \langle E_{\alpha}(\tau) E_{\beta} \rangle_{\rho_{\varepsilon}} \quad (3.7)$$

Donde el promedio es tomado sobre el estado inicial  $\rho_{\varepsilon}$  del medio (recordando que la aproximación de Born dice que  $\rho_{\varepsilon}$  permanece aproximadamente constante todo el tiempo). La ecuación (3.7) será referida como las funciones de auto correlación del medio. Dichas funciones del nos dicen hasta qué punto el resultado de una medida en un observable  $E_{\alpha}$  particular, esta correlacionado con el resultado de una medida de un observable llevada un tiempo  $\tau$  después. Hablando en general estas funciones cuantifican en qué grado el medio retiene información sobre las veces que este interactúa con el sistema. Así la aproximación

de Markov corresponde a la suposición de un decaimiento rápido de las funciones de autocorrelación del medio cercanas al conjunto de las escalas de tiempo para la evolución del sistema.

La forma de la ecuación maestra de Born-Markov (3.4) puede verse difícil para aplicarse a casos concretos debido a que para determinar explícitamente las cantidades  $B_\alpha$  y  $C_\alpha$  en un modelo dado, se necesitaría calcular (i) los operadores  $S_\alpha(\tau)$  y  $E_\alpha(\tau)$  en la representación de interacción (cuya evolución temporal es dada por los Hamiltonianos del sistema  $\mathcal{H}_S$  y el medio  $\mathcal{H}_\varepsilon$ ), y (ii) las funciones de autocorrelación del medio  $C_{\alpha\beta}(\tau)$ .

Sin embargo en diversas situaciones de interés, la ecuación maestra (3.4) se simplifica considerablemente, por ejemplo en muchos casos se considera solamente un solo observable  $S$  del sistema que es monitoreado por el medio. Entonces la suma en la descomposición diagonal del Hamiltoniano de interacción(3.3) se reduce a:

$$H_{int} = S \otimes E \tag{3.8}$$

También la dependencia temporal de los operadores  $S_\alpha(\tau)$  y  $E_\alpha(\tau)$  en la representación de interacción es a menudo muy simple (algunas veces incluso trivial), facilitando el cálculo de las cantidades  $B_\alpha$  y  $C_\alpha$ . Esto se verá en el siguiente capítulo donde se aplicara la ecuación maestra de Born-Markov a un caso concreto, así como en el apéndice C.

## **CAPITULO 4: SISTEMAS CUÁNTICOS DISIPATIVOS**

Cuando se estudian sistemas cuánticos disipativos la dificultad está en cómo cuantizar sistemas que no están aislados, es decir que interactúan con el medio que los rodea [13-16]. Este tipo de sistemas no permite la aplicación de la formulación de cuantización canónica.

Una manera de proceder consiste en el estudio de la dinámica de subsistemas, o sea, una aproximación del sistema de interés en contacto con un reservorio. Los enfoques comunes para sistemas cuánticos abiertos basados en los modelos de sistema más un reservorio son generalmente divididos en dos clases: primero trabajando en el cuadro de representación de Schrödinger, la dinámica es descrita en términos de la ecuación maestra para la matriz de densidad reducida u operador densidad, y segundo trabajando en el cuadro de representación de Heisenberg, la descripción es dada en términos de la ecuación de Langevin para el conjunto de los operadores importantes del sistema reducido [16] (para detalles de las representaciones de Schrödinger y Heisenberg referirse al apéndice A). Se adoptara en este trabajo el cuadro de representación de Schrödinger y se tomara como referencia el movimiento Browniano cuántico, a partir del cual se obtendrá la ecuación maestra de Born-Markov, con el motivo de relacionar el sistema y la función de densidad espectral.

### **4.1. MOVIMIENTO BROWNIANO CUÁNTICO**

El modelo para el movimiento browniano cuántico consiste de una partícula moviéndose en una dimensión espacial e interactuando linealmente con un medio de osciladores armónicos independientes en equilibrio térmico a una temperatura  $T$ . el movimiento Browniano cuántico probablemente es el modelo de Decoherencia más importante y más estudiado.

## OBTENCION DE LA ECUACIÓN MAESTRA DE BORN-MARKOV PARA EL MOVIMIENTO BROWNIANO CUÁNTICO.

Se descompone el Hamiltoniano total  $H$  (Sistema-medio), en tres partes:

$$H = H_s + H_\varepsilon + H_{int} \quad (4.1)$$

Por el momento se deja el Hamiltoniano del sistema ( $H_s$ ) sin especificar. El Hamiltoniano  $H_\varepsilon$  del medio, describe una colección de osciladores armónicos. Se supone que estos osciladores no interactúan unos con otros. El Hamiltoniano  $H_\varepsilon$  es simplemente la suma de todos los Hamiltonianos de un oscilador simple:

$$H_\varepsilon = \sum_i \left( \frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 q_i^2 \right) \quad (4.2)$$

Donde  $m_i$  y  $\omega_i$  denotan las masas y las frecuencias naturales de los  $n_i$ -osciladores del medio,  $q_i$  y  $p_i$  son los operadores canónicos de posición y momentum. La forma de interacción entre el sistema y el medio es tal que la coordenada de posición  $x$  de la partícula central (El sistema  $s$ ) está unida linealmente a las posiciones  $q_i$  de los osciladores en el medio, con acoplamientos  $c_i$ . El Hamiltoniano de interacción es:

$$H_{int} = x \otimes \sum_i c_i q_i = x \otimes E \quad (4.3)$$

La suposición de un acoplamiento bilineal (entre  $x$  y  $q_i$ ) es una suposición importante del modelo, que por lo tanto a menudo es referido explícitamente como “Movimiento Browniano lineal”

El primer objetivo es determinar las funciones de auto correlación del medio, a saber la ecuación (3.7), que para este caso es:

$$C(\tau) = \langle E(\tau)E \rangle_{\rho_\varepsilon} \quad (4.4)$$

Donde  $\rho_\varepsilon = \rho_\varepsilon(0)$  (Aproximación de Born), de la ecuación (4.3), la expresión anterior produce:

$$C(\tau) = \sum_{i,j} c_i c_j \langle q_i(\tau) q_j \rangle_{\rho_\varepsilon} = \sum_i c_i^2 \langle q_i(\tau) q_i \rangle_{\rho_\varepsilon} \quad (4.5)$$

La desaparición de los términos  $i \neq j$  es debido al hecho que los osciladores del medio no interactúan unos con otros y por lo tanto están completamente sin correlación, entonces para  $i \neq j$ :

$$\langle q_i(\tau) q_j \rangle_{\rho_\varepsilon} = \langle q_i(\tau) \rangle_{\rho_\varepsilon} \langle q_j \rangle_{\rho_\varepsilon} = 0$$

La evaluación de  $C(\tau)$  ahora se reduce al cálculo del promedio  $\langle q_i(\tau) q_i \rangle_{\rho_\varepsilon}$ , para esto se cambia a la representación  $q_i$  en términos de los operadores de ascenso y descenso ( $a_i^\dagger$  y  $a_i$ ) los cuales son:

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2m_i\omega_i\hbar}} (m_i\omega_i q_i + jp_i)$$

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m_i\omega_i\hbar}} (m_i\omega_i q_i - jp_i)$$

Sumando estas expresiones es fácil obtener:

$$q_i = \frac{1}{\sqrt{2m_i\omega_i}} (a_i + a_i^\dagger), \text{ con } \hbar = 1$$

La evolución temporal del operador  $q_i$  en la representación de interacción puede escribirse así:

$$q_i(\tau) = e^{iH_\varepsilon\tau} q_i e^{-iH_\varepsilon\tau} = \frac{1}{\sqrt{2m_i\omega_i}} (a_i e^{-i\omega_i\tau} + a_i^\dagger e^{i\omega_i\tau}) \quad (4.6)$$

Por lo tanto:

$$\langle q_i(\tau) q_i \rangle_{\rho_\varepsilon} = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2m_i\omega_i}} (a_i e^{-i\omega_i\tau} + a_i^\dagger e^{i\omega_i\tau}) \frac{1}{\sqrt{2m_i\omega_i}} (a_i + a_i^\dagger) \right\rangle_{\rho_\varepsilon}$$

$$\langle q_i(\tau) q_i \rangle_{\rho_\varepsilon} = \frac{1}{2m_i\omega_i} \langle a_i a_i^\dagger e^{-i\omega_i\tau} + a_i^\dagger a_i e^{i\omega_i\tau} \rangle_{\rho_\varepsilon} \quad ; \quad \langle a_i^2 \rangle = \langle a_i^{\dagger 2} \rangle = 0$$

$$\langle q_i(\tau)q_i \rangle_{\rho\varepsilon} = \frac{1}{2m_i\omega_i} \{ \langle a_i a_i^\dagger \rangle_{\rho\varepsilon} e^{-i\omega_i\tau} + \langle a_i^\dagger a_i \rangle_{\rho\varepsilon} e^{i\omega_i\tau} \} \quad (4.7)$$

La cantidad  $N_i = \langle a_i^\dagger a_i \rangle_{\rho\varepsilon}$ , es simplemente el número promedio de ocupación del i-esimo oscilador del medio.

Por suposición el medio esta en equilibrio térmico, así que  $N_i$  corresponde a:

$$N_i \equiv N_i(\tau) = \frac{1}{e^{\omega_i/K_B T} - 1} \quad (4.8)$$

De la relación de conmutación para los operadores  $a_i, a_i^\dagger$ :

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \Rightarrow a_i a_i^\dagger = 1 + N$$

La ecuación (4.7) será:

$$\langle q_i(\tau)q_i \rangle_{\rho\varepsilon} = \frac{1}{2m_i\omega_i} \{ [1 + N_i(\tau)] e^{-i\omega_i\tau} + N_i(\tau) e^{i\omega_i\tau} \}$$

Utilizando que  $e^{\pm i\omega_i\tau} = \cos(\omega_i\tau) \pm i \sin(\omega_i\tau)$ , y agrupando términos se logra:

$$\langle q_i(\tau)q_i \rangle_{\rho\varepsilon} = \frac{1}{2m_i\omega_i} \{ [1 + 2N_i(\tau)] \cos(\omega_i\tau) - i \sin(\omega_i\tau) \}$$

Con la ecuación (4.8), se obtiene:

$$\langle q_i(\tau)q_i \rangle_{\rho\varepsilon} = \frac{1}{2m_i\omega_i} \left\{ \left[ 1 + \frac{2}{e^{\omega_i/K_B T} - 1} \right] \cos(\omega_i\tau) - i \sin(\omega_i\tau) \right\}$$

Recordando la función cotangente hiperbólica:

$$\coth(\theta) = \frac{e^\theta + e^{-\theta}}{e^\theta - e^{-\theta}}$$

Finalmente se llega a:

$$\langle q_i(\tau)q_i \rangle_{\rho\varepsilon} = \frac{1}{2m_i\omega_i} \left\{ \coth\left(\frac{\omega_i}{2K_B T}\right) \cos(\omega_i\tau) - i \sin(\omega_i\tau) \right\} \quad (4.9)$$

Por lo que las funciones de auto-correlación del medio pueden ahora escribirse como:

$$C(\tau) = \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \left\{ \coth\left(\frac{\omega_i}{2K_B T}\right) \cos(\omega_i\tau) - i \sin(\omega_i\tau) \right\} \quad (4.10)$$

La ecuación (4.10) se la puede ver de la manera:  $C(\tau) = v(\tau) - i\eta(\tau)$

Donde las funciones  $v(\tau)$  y  $\eta(\tau)$  son:

$$v(\tau) = \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \coth\left(\frac{\omega_i}{2K_B T}\right) \cos(\omega_i\tau) \quad \text{y} \quad \eta(\tau) = \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \sin(\omega_i\tau)$$

Utilizando la función  $\delta$ :

$$\delta(x - x') = 0 \quad \forall \quad x' \neq x, \quad \wedge \quad \psi(x') = \int \delta(x - x')\psi(x)dx$$

Se puede escribir a  $v(\tau)$  y  $\eta(\tau)$  de esta forma:

$$v(\tau) = \sum_i \int_0^\infty \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \coth\left(\frac{\omega}{2K_B T}\right) \cos(\omega\tau) d\omega$$

$$v(\tau) = \int_0^\infty J(\omega) \coth\left(\frac{\omega}{2K_B T}\right) \cos(\omega\tau) d\omega \quad (4.11)$$

$$\eta(\tau) = \sum_i \int_0^\infty \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \sin(\omega\tau) d\omega$$

$$\eta(\tau) = \int_0^\infty J(\omega) \sin(\omega\tau) d\omega \quad (4.12)$$

Las funciones  $v(\tau)$  y  $\eta(\tau)$  están referenciadas comúnmente en la literatura como los kernel's de ruido y disipación respectivamente. La función  $J(\omega)$  definida como:

$$J(\omega) \equiv \sum_i \frac{c_i^2}{2m_i\omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \quad (4.13)$$

Es la llamada función de **DENSIDAD ESPECTRAL** del medio. Esta encapsula las propiedades físicas del efecto del medio sobre el sistema y juega un papel relevante en el estudio teórico y experimental de la Decoherencia. La obtención de esta función es la clave

para hacer la relación entre el sistema cuántico y la dinámica disipativa, es la que dirá cuan relevante es el acoplamiento con el medio o baño.

Continuando en la derivación de la ecuación maestra para el movimiento Browniano cuántico los operadores  $B$  y  $C$  (ecuaciones (3.5) y (3.6)) son escritos como:

$$B = \int_0^{\infty} C(\tau)X(-\tau)d\tau \quad \wedge \quad C = \int_0^{\infty} C(-\tau)X(-\tau)d\tau$$

Donde  $X(\tau) = e^{iH_S\tau}Xe^{-iH_S\tau}$ , es el operador de posición del sistema en la representación de interacción. Insertando  $B$ ,  $C$ ,  $C(\tau)$  en la expresión general para la ecuación maestra de Born-Markov (3.4). Se tiene:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_S, \rho_S(t)] - \int_0^{\infty} \{C(\tau)[X, X(-\tau)\rho_S(t)] + C(-\tau)[\rho_S(t)X(-\tau), X]\}d\tau$$

Usando la forma  $C(\tau) = \nu(\tau) - i\eta(\tau)$ , se involucra a los kernels de ruido y disipación y teniendo en cuenta que  $C(-\tau) = \nu(\tau) + i\eta(\tau)$ , ya que  $\nu(\tau)$  es función par y  $\eta(\tau)$  es función impar, reorganizando términos se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) = & -i[H_S, \rho_S(t)] \\ & - \int_0^{\infty} \{\nu(\tau)[X, [X(-\tau), \rho_S(t)]] - i\eta(\tau)[X, \{X(-\tau), \rho_S(t)\}]\}d\tau \end{aligned} \quad (4.14)$$

Se observa que la Decoherencia debida al medio es completamente descrita por integrales sobre los kernels de ruido y disipación, multiplicada por productos de operadores de posición del sistema (tales operadores están en las representaciones de Schrödinger e interacción). Por curiosidad si se toma un oscilador armónico como sistema central se puede deducir la ecuación maestra de Caldeira-Leggett (este proceso está en el apéndice C). Pero lo importante es que por medio de este tratamiento a sistemas de este tipo se pudo deducir la función de densidad espectral.



## 4.2. DISIPACIÓN EN SISTEMAS DE DOS NIVELES

### MODELO DE ESPÍN-BOSON

El modelo de espín-Boson corresponde a un sistema de dos niveles interactuando con un gran reservorio de modos de campo Bosonico, por ejemplo una partícula de espín  $\frac{1}{2}$  acoplada a un medio de osciladores armónicos. Como el propósito es estudiar decoherencia de espín de un electrón confinado en un punto cuántico, es necesario introducir las técnicas para estudiar disipación en dos niveles [17].

En diversos casos las dinámicas importantes del sistema central pueden ser escritas por una o dos coordenadas de interés, incluso si estas son muy complicadas. Estas coordenadas pueden ser continuas o discretas. La situación más importante físicamente que involucra coordenadas discretas es el caso de un sistema central actuando como un sistema de dos niveles. Esto sucede típicamente si el sistema tiene dos mínimos de energía separados por una barrera, y si la energía de este es suficientemente baja (por ejemplo muy cerca de las energías mínimas y mucho menor que el alto de la barrera) entonces las dinámicas del sistema son las de una partícula confinada en un doble pozo de potencial, como se ve en la figura 4.1. El sistema ocupa solamente el estado más bajo situado en cada pozo y puede ser descrito por dos estados bases  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ , correspondientes a la localización en la izquierda y derecha del pozo respectivamente.

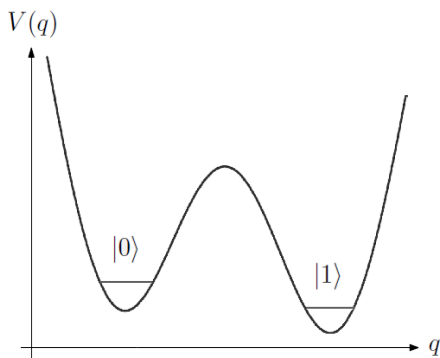


Figura 4.1: Sistema descrito por una coordenada  $q$  y moviéndose en pozo de doble potencial  $V(q)$ .

El Hamiltoniano que describe el modelo de dos niveles con coordenadas discretas es:

$$H_{DN} = H_s + H_s^{tunnel} \quad (4.15)$$

Para un modelo de este tipo nada mejor que escoger las matrices de Pauli. Los estados del Hamiltoniano del sistema  $H_s$  pueden ser expresados en términos de estas matrices:

$$H_s = \frac{1}{2} \hbar \varepsilon \sigma_z \quad (4.16)$$

Donde la energía  $\hbar \varepsilon$  es la diferencia en energía entre los estados bases  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  del sistema, esta diferencia en energía (llamada “energía asimétrica”) es a menudo pequeña en comparación con el espaciamiento entre los estados en un pozo dado.

El Hamiltoniano  $H_s^{tunnel}$  representa las dinámicas intrínsecas del sistema de dos niveles las cuales son creadas por el túnelamiento cuántico, que resulta debido a las transiciones entre los dos estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ . Tomando estos como los estados propios del operador de espín de Pauli  $\sigma_z$ , el túnelamiento es por lo tanto mediado por un término en el Hamiltoniano del sistema de la forma:

$$H_s^{tunnel} = -\frac{\hbar}{2} \Delta (|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|) = -\frac{\hbar}{2} \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \Delta \sigma_x \quad (4.17)$$

Donde  $\Delta$  es el llamado elemento de matriz de túnelamiento.

Así que el Hamiltoniano para el sistema de dos niveles, ecuación (4.15), toma la forma:

$$H = \frac{1}{2} \hbar \varepsilon \sigma_z - \frac{1}{2} \hbar \Delta \sigma_x = \frac{1}{2} \hbar \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \hbar \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \varepsilon & \Delta \\ \Delta & -\varepsilon \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

Aquí el término  $\frac{1}{2} \hbar \varepsilon \sigma_z$  es el Hamiltoniano del sistema, y el término de túnelamiento  $-\frac{1}{2} \hbar \Delta \sigma_x$  es el que genera las dinámicas intrínsecas del espín central. Los estados propios de  $\sigma_z$  se denotan por  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ .

El reservorio o baño puede ser modelado como un conjunto de osciladores armónicos:

$$\sum_{\alpha=1}^N \left( \frac{1}{2m_{\alpha}} p_{\alpha}^2 + \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha}^2 \right) \quad (4.19)$$

En muchos casos de interés experimental el acoplamiento principal del sistema con el baño es a través de un término de la forma  $\sigma_z \Omega$ , donde  $\Omega$  es cualquier operador del baño. Lo que significa que dependiendo del grado de acoplamiento el baño puede destruir rápidamente el comportamiento oscilatorio de  $\sigma_z$  destruyendo así la coherencia del sistema. En general cuando el acoplamiento es débil, la interacción puede ser escrita como:

$$\frac{1}{2} q_0 \sigma_z \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha}$$

En la expresión anterior  $q_0$  es un parámetro que depende del sistema, y  $c_{\alpha}$  es una fuerza de acoplamiento del sistema con el  $\alpha$ -ésimo oscilador. Describiendo así un acoplamiento lineal de la coordenada  $\sigma_z$  del sistema a las coordenadas de las posiciones  $x_{\alpha}$ , de cada oscilador armónico del baño o medio.

El Hamiltoniano global serán las sumas de los Hamiltonianos de las ecuaciones (4.18) y (4.15):

$$H_{DN} = \frac{1}{2} \hbar \varepsilon \sigma_z - \frac{1}{2} \hbar \Delta \sigma_x + \sum_{\alpha=1}^N \left( \frac{1}{2m_{\alpha}} p_{\alpha}^2 + \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha}^2 \right) + \frac{1}{2} q_0 \sigma_z \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha} \quad (4.20)$$

El cual es conocido como el Hamiltoniano de espín-Boson.

La ecuación (4.20) puede ser expresada en términos de los operadores de ascenso y descenso  $a^{\dagger}$  y  $a$ , que satisfacen las reglas de cuantización bosónicas  $[a, a^{\dagger}] = 1$ . Sabiendo que:

$$x_{\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}}} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger}) \quad y \quad P_{\alpha} = i \sqrt{\frac{\hbar m_{\alpha} \omega_{\alpha}}{2}} (a_{\alpha} - a_{\alpha}^{\dagger})$$

El Hamiltoniano toma la forma:

$$\begin{aligned}
H_{SB} &= H_{DN} + \sum_{\alpha=1}^N \left( -\frac{\hbar\omega_{\alpha}}{4} (a_{\alpha} - a_{\alpha}^{\dagger})(a_{\alpha} - a_{\alpha}^{\dagger}) + \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{4} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger})(a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger}) \right) \\
&\quad - \frac{1}{2} q_0 \sigma_z \sum_{\alpha} c_{\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}}} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger}) \\
&= H_{DN} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2} (a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + a_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}) - \frac{1}{2} \sigma_z \sum_{\alpha} \hbar\lambda_{\alpha} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger})
\end{aligned}$$

Donde:

$$\lambda_{\alpha} = q_0 c_{\alpha} \sqrt{\frac{1}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}\hbar}}$$

De la relación de conmutación  $[a_{\alpha}, a_{\alpha}^{\dagger}] = 1$ , se tiene:

$$H_{SB} = H_{DN} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2} (2a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + 1) - \frac{1}{2} \sigma_z \sum_{\alpha} \hbar\lambda_{\alpha} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger})$$

Omitiendo la energía de punto cero, la cual es irrelevante, el Hamiltoniano toma la forma:

$$H_{SB} = \frac{1}{2} \hbar\varepsilon\sigma_z - \frac{1}{2} \hbar\Delta\sigma_x - \frac{1}{2} \sigma_z \sum_{\alpha} \hbar\lambda_{\alpha} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger}) + \sum_{\alpha=1}^N \hbar\omega_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \quad (4.21)$$

La ecuación (4.21) hace notar como en el caso del movimiento Browniano que los efectos del medio son encapsulados en la función espectral  $J(\omega)$  ecuación (2.13). Usualmente se asume que la función  $J(\omega)$  es bien comportada en  $\omega$ , y su dependencia con la frecuencia es tomada de la forma  $J(\omega) \propto \omega^s$  (aproximación como ley de potencias), para  $s > 0$  y  $\omega_c \gg \Delta$ , donde  $\omega_c$  es una frecuencia de corte (una frecuencia característica del baño: frecuencia de Drude, de Debye, de Fermi, etc...) esta frecuencia aparece debido a que cualquier función espectral “real” debe tender a cero cuando  $\omega \rightarrow \infty$  de lo contrario, algunas cantidades físicas podrían divergir. El sentido físico esta en el hecho de existir siempre un tiempo de memoria finito que define la escala de tiempo para efectos de inercia del baño. Considerando esto:

$$J(\omega) = A\omega^s e^{(-\omega/\omega_c)} \quad (4.22)$$

Siendo  $A = \eta_s \omega_{ph}^{1-s}$  una constante que se ha introducido para  $s \neq 1$ ,  $\omega_{ph}$  una frecuencia de referencia fononica. La constante de acoplamiento  $\eta_s$  tiene dimensiones de viscosidad.

Asumida una forma general para  $J(\omega)$  es posible tabular los comportamientos que siguen los sistemas según la intensidad del acoplamiento con el baño y la temperatura. Siguiendo la terminología impuesta por Leggett y colaboradores [17], llamamos caso óhmico a  $s = 1$ ; caso súper-óhmico a  $s > 1$  y caso sub-óhmico para  $0 < s < 1$ . La dinámica que seguirá el sistema para cada tipo de acoplamiento se encuentra en la tabla 4.1.

<b>Disipación</b>	<b>s</b>	<b>T</b>	<b>Comportamiento</b>
Sub-óhmica	$0 < s < 1$	T = 0 T ≠ 0	Localizado Súper- amortiguado
Óhmica	$s = 1$	T = 0 T ≠ 0	Amortiguado Súper- amortiguado
Súper-óhmica	$s > 1$	T = 0 T = T*	Sub- amortiguado Súper- amortiguado

Tabla 4.1. Comportamiento de un sistema de dos niveles según el tipo de disipación.

Para disipación sub-óhmica el sistema es localizado para temperatura  $T=0$ . A temperatura finita se espera relajación no coherente. Para disipación óhmica existen varios regímenes dependiendo de las constantes del problema y de la temperatura, que se resumen en tres posibles comportamientos: amortiguado, sub-amortiguado, súper-amortiguado o localizado.

La atención se focalizara en el caso súper-óhmico, el cual restringe las posibilidades al caso sub o súper-amortiguado. Un comportamiento súper-amortiguado aparece solamente a partir de una temperatura  $T^*$  que depende de la función espectral.

Como es conocido el acoplamiento de los electrones con los fonones acústicos en un sólido presenta una dependencia de  $J(\omega)$  con  $\omega^3$  (interacción piezoeléctrica) o  $\omega^5$  (potencial de deformación), con  $\omega_c = \omega_D$  (frecuencia de Debye).

El resultado general para disipación súper-óhmica es que para  $T=0$  y  $\epsilon = 1$ , no importa que tan grande sea la constante  $A$ , el sistema siempre va a presentar oscilaciones coherentes sub-amortiguadas y:

$$P(t) = \langle \sigma_z(t) \rangle = \cos(\tilde{\Delta}t) \exp(-\Gamma_s t) \quad (4.23)$$

Donde  $\Gamma_s$  es la tasa de amortiguamiento dada por:

$$\Gamma_s = \frac{q_0^2}{4\hbar} J(\tilde{\Delta})$$

Y  $\tilde{\Delta}$  una frecuencia re normalizada dada por:

$$\tilde{\Delta} = \Delta \exp\left(-\frac{q_0^2}{2\pi\hbar} \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega^2} d\omega\right) \quad (4.24)$$

## CAPITULO 5: BAÑOS EFECTIVOS PARA ESPÍN EN PUNTOS CUÁNTICOS

Como se ha dicho el sistema a tratar es un sistema de dos niveles, el espín, y para que este pierda coherencia por disipación necesita de un medio o baño. Dependiendo del grado de acoplamiento entre ellos, el sistema puede presentar diversos comportamientos. En este caso particular el medio está determinado por los grados de libertad del electrón, los átomos que hacen parte del punto cuántico, las vibraciones de la red (fonones). En este estudio se consideran solamente las interacciones con la órbita electrónica y con el campo magnético externo. La influencia de los fonones será solamente mediante el acoplamiento electrón-fonón, constituyéndose lo que se denomina: baños efectivos para espín.

Ahora se va estudiar la interacción espín orbita en materiales semiconductores y las interacciones importantes electrón-fonón, para poder hallar la función espectral de los baños efectivos que afectan la coherencia del sistema.

Específicamente el interés está en puntos cuánticos auto-ensamblados de InAs o GaAs. El GaAs y el InAs son uniones tipo  $A_3B_5$ , estructura blanda de zinc, y gap directo localizado sobre el punto  $\Gamma(k = 0)$ . Para el caso de InAs/GaAs, considerando al electrón en la banda de conducción, las posibles interacciones con los fonones acústicos son la interacción piezoeléctrica (PZ) y el potencial de deformación (PD), mientras que con los fonones ópticos el acoplamiento es por medio de la interacción de Fröhlich, con la participación solamente de los modos longitudinales (LO), tabla 3.1.

Fonón	Interacción (GaAs)
TA	PZ
LA	DP, PZ
TO	-
LO	Fröhlich

Tabla 5.1. Resumen de las interacciones electrón-fonón para el GaAs en la banda de conducción [18].

Inicialmente se hará una breve descripción de la interacción espín-orbita y después se estudia las interacciones electrón-fonón y el papel que desempeñan los fonones como fuente de la decoherencia para el espín.

## 5.1. ACOPLAMIENTO ESPIN-ORBITA

En los sólidos los desplazamientos de la red generan campos eléctricos, que el electrón siente, y éste al moverse por influencia de dichos campos genera un campo magnético el cual se acopla con el espín.

De la física atómica se conoce que al moverse el electrón en un campo electrostático  $E$  creado por el protón, la relatividad especial indica que en el marco de referencia del electrón aparece un campo magnético, el cual puede interactuar con el momento magnético del espín del electrón. El campo magnético experimentado por el electrón es:

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{c}\mathbf{V} \times \mathbf{E} \quad (5.1)$$

El electrón se mueve a una velocidad:

$$\mathbf{V} = \frac{\mathbf{P}}{m_e} \quad \text{y} \quad \mathbf{E} = \frac{1}{e}\mathbf{F} = -\frac{1}{e}\text{grad}\phi(r) = -\frac{1}{e}\frac{\mathbf{r}}{r}\frac{d\phi(r)}{dr}$$

Así que el campo magnético del núcleo calculado en el marco de referencia del electrón es obtenido por:

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{c}\frac{\mathbf{P}}{m_e} \times \left( -\frac{1}{e}\frac{\mathbf{r}}{r}\frac{d\phi(r)}{dr} \right) = \frac{1}{cm_e e r}\frac{d\phi(r)}{dr}\mathbf{P} \times \mathbf{r}$$

Como se sabe:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{P} \Rightarrow \mathbf{B} = -\frac{1}{cm_e e r}\frac{d\phi(r)}{dr}\mathbf{L}$$

La energía del momento magnético de espín en el campo magnético exterior es:



$$w = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = -\frac{e}{m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{m_e^2 c^2 r} \frac{d\phi(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (5.2)$$

En realidad esto no es correcto, ya que esta expresión es calculada en el marco de reposo del electrón, y este marco no es inercial, debido a que el electrón se acelera mientras se mueve alrededor del núcleo. Para un tratamiento correcto se debe transformar al marco de reposo del núcleo. Esta transformación produce una reducción de la energía de interacción por un factor de 2:

$$H_{so} = \frac{1}{2m_e^2 c^2 r} \frac{d\phi(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (5.3)$$

Ahora la forma general de la interacción espín-orbita, es la siguiente:

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} (\nabla\phi \times \mathbf{P}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (5.4)$$

Donde las componentes de  $\boldsymbol{\sigma}$ , son las matrices de Pauli,  $\mathbf{P}$  y  $m_e$ , son el momentum y la masa del electrón respectivamente. Para semiconductores, esta interacción de debe abordar dentro de la aproximación  $\mathbf{K} \cdot \mathbf{P}$ . Considerando las diferentes bandas y aprovechando las simetrías específicas de dichas bandas [19], se llega a lo que se conoce como interacción de Dresselhaus [18].

Para el caso de los electrones localizados sobre el punto  $\Gamma$ , punto central de la celda unitaria y coincidentalmente punto extremo de las bandas de valencia en un semiconductor de gap directo como GaAs, la interacción resultante es:

$$H_{so} = H_{c3} = \gamma_c \sum \sigma_i \kappa_i \quad (5.5)$$

Despreciando órdenes mayores en  $k$ , donde:

$$\begin{aligned} \kappa_x &= K_x(K_y^2 - K_z^2) \\ \kappa_y &= K_y(K_z^2 - K_x^2) \\ \kappa_z &= K_z(K_x^2 - K_y^2) \end{aligned} \quad (5.6)$$

Y  $\gamma_c = \frac{2}{3} \frac{\Delta}{\sqrt{2m^*E_g}m_{vc}E_g}$ ,  $\Delta$  es la energía de Zeeman. Para puntos cuánticos auto ensamblados se puede asumir que los grados de libertad están fijos en el eje z, de tal manera que la ecuación (5.5), se reduce a:

$$H_{so} = \zeta(-\sigma_x K_x + \sigma_y K_y) \quad (5.7)$$

Donde  $\zeta = \gamma_c \langle K_z^2 \rangle$ . Si se asume un pozo de potencial cuadrado en la dirección z, se tiene:

$$\langle K_z^2 \rangle \approx \frac{\pi^2}{l^2}$$

Aquí  $l$  es la altura del punto. La cuantización es a lo largo del eje z ([001]).

## 5.2. INTERACCIÓN FONÓN-ELECTRÓN

La ecuación de Schrödinger es el punto de partida para todos los cálculos cuantitativos de las propiedades del estado sólido. El sólido está compuesto de dos grupos de electrones (electrones de valencia, que contribuyen al enlace químico, y los electrones de núcleo, que están fuertemente enlazados en las celdas de los iones de la red y que apenas influyen en las propiedades del sólido). Usualmente se consideran los electrones de valencia y los iones de la red como componentes independientes del sólido.

El Hamiltoniano entonces consiste en la energía cinética de todos los electrones de valencia y de todos los iones, de la energía asociada con las interacciones entre estas partículas, y la energía asociada de las interacciones con campos externos.

$$H = H_{el} + H_{ion} + H_{el-ion} + H_{ex} \quad (5.8)$$

Para comenzar se desprecia el ultimo termino de la ecuación (5.8). Para la parte del electrón se escribe:

$$H_{el} = H_{el,cin} + H_{el-el} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (5.9)$$

La suma se hace sobre todos los índices del electrón, excluyendo desde luego  $r_i = r_j$  para el término de interacción entre ellos. Los términos  $p_i, r_i, y m_i$  son el momentum, posición y masa de un electrón de índice  $i$ .

La parte del Hamiltoniano del ion, o parte atómica describe los modos normales de vibración de un sólido, se escribe:

$$H_{ion} = H_{ion,cin} + H_{ion-ion} = \sum_{q\lambda} \omega_{q\lambda} \left( a_{q\lambda}^\dagger a_{q\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (5.10)$$

Para la interacción electrón-ion, se tiene:

$$H_{el-ion} = \sum_{i,j} V_{el-ion}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) \quad (5.11)$$

Ahora una característica de los cristales es su simetría, resultado del arreglo periódico de los iones de la red, no obstante son las posiciones de equilibrio sobre la que los iones vibran que demuestran fuerte periodicidad, en vez de sus posiciones reales para cualquier instante. Por lo tanto se divide la interacción electrón-ion en dos componentes, una describiendo la interacción cuando los iones están en sus posiciones de equilibrio, y la otra una corrección para dar razón de las vibraciones de la red.

$$H_{el-ion} = H_{el-ion}^0 + H_{el-phon}$$

El índice fon para el término de la vibración de la red es para indicar los fonones, que se usan para describir las vibraciones. Separando el vector de posición del ion, en la posición de equilibrio del  $\alpha$ -esimo ion en la  $n$ -esima celda unitaria, y el desplazamiento instantáneo del ion desde su posición de equilibrio, se puede escribir:

$$V_{el-ion}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n\alpha} - \delta\mathbf{R}_{n\alpha})$$

Tomando  $\delta\mathbf{R}$  muy pequeño, se expande el potencial, y tomando solamente términos lineales (aproximación armónica) se tiene:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n\alpha} - \delta\mathbf{R}_{n\alpha}) = V_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n\alpha}) - \delta\mathbf{R}_{n\alpha} \nabla V_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n\alpha}) \quad (5.12)$$

El segundo término a la derecha de la ecuación (5.12) sencillamente es el Hamiltoniano para la interacción electrón-fonón. Nótese que el desplazamiento desde el equilibrio puede expandirse en términos de los operadores de  $a^\dagger$  y  $a$  y da la siguiente forma:

$$\delta\mathbf{R}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \left( \frac{\hbar}{2NV\rho\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} \{ (a_{\mathbf{q}} \exp[-i\omega t] + a_{-\mathbf{q}}^\dagger \exp[-i\omega t]) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \} \quad (5.13)$$

Donde  $N$  es el número de celda unitarias del cristal,  $\omega_{\mathbf{q}}$  es la dispersión de los fonones,  $V$  el volumen de la celda primitiva,  $\rho$  la densidad y  $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$  el vector de polarización.

Los efectos responsables por la perturbación pueden ser divididos en dos: de corto alcance, determinados por los desplazamientos de los átomos vecinos, y de largo alcance, creados por la polarización debida a desplazamientos atómicos de todo el material. Las fuerzas de corto alcance son las que corresponden con el potencial de deformación, mientras que las de largo alcance estas asociadas con campos eléctricos que surgen de la polarización de la red. A esos campos eléctricos se asocian la interacción piezoeléctrica en el caso de fonones acústicos y la interacción de Fröhlich en el caso de fonones ópticos.

### 5.3. INTERACCIÓN PIEZOELÉCTRICA

En estructuras cristalinas no centro-simétricas (es decir sin simetría de inversión) una “fuerza” puede inducir un campo eléctrico de polarización macroscópico  $\mathbf{E}$  y a su vez un campo eléctrico genera una fuerza. Este fenómeno es conocido como efecto piezoeléctrico. Los fonones acústicos crean modulaciones de densidades periódicas y por lo tanto, campos eléctricos periódicos. En primer orden la relación entre el campo eléctrico  $E_k$  y la deformación  $S_{ij}$  es lineal, y ambos están relacionados por el tensor electromecánico de tercer orden  $M_{ijk}$  [20], como:

$$E_k = \sum_{i,j} M_{ijk} S_{ij} \quad (5.14)$$

El tensor de deformaciones o tensor de fuerza, es definido como la derivada simétrica del desplazamiento atómico (para pequeños desplazamientos):

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \delta \mathbf{R}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \delta \mathbf{R}_j}{\partial x_i} \right) \quad (5.15)$$

Utilizando la ecuación (5.13), la expresión anterior se escribe:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar}{2NV\rho\omega_q} \right)^{1/2} i \sum_q (e_j q_i + e_i q_j) (a_q + a_{-q}^\dagger) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (5.16)$$

Como el campo eléctrico es creado por los fonones longitudinales (y considerando solamente compresiones de longitud de onda grandes para ignorar los efectos atómicos), este debe señalar en la dirección  $\mathbf{q}$  del fonón. Entonces se puede expresar en términos del gradiente de un potencial escalar piezoeléctrico  $\phi$ :

$$E_k = -\frac{\partial}{\partial x_k} \phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q i q_k \phi_q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (5.17)$$

Y el potencial es proporcional al desplazamiento:

$$\phi(\mathbf{r}) = i \sum_{q\lambda} \left( \frac{\hbar}{2NV\rho\omega_{q\lambda}} \right)^{1/2} M_{q\lambda} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} (a_{q\lambda} + a_{-q\lambda}^\dagger) \quad (5.18)$$

Siendo  $\lambda$  la polarización del fonón acústica (LA o AT).  $M_{q\lambda}$  No depende de la magnitud de  $\mathbf{q}$  más si de la dirección. A partir de este potencial se puede llegar al Hamiltoniano de interacción electrón–fonón, el cual es:

$$H_{ep} = \sum_{q\lambda} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} (a_{q\lambda} + a_{-q\lambda}^\dagger) b_{\mathbf{q}} \quad (5.19)$$

Donde  $b_{\mathbf{q}} = M_{\mathbf{q}\lambda} \left( \frac{\hbar}{2NV\rho\omega_{\mathbf{q}\lambda}} \right)^{1/2}$  depende del tipo de material. A diferencia de la interacción de Fröhlich, la interacción piezoeléctrica no puede ser expresada con parámetros macroscópicos.

#### 5.4. FONONES ÓPTICOS: INTERACCIÓN DE FRÖHLICH

Este mecanismo ocurre cuando portadores de carga interactúan con la polarización eléctrica,  $\mathbf{P}(\mathbf{r})$  producida por el desplazamiento relativo de los iones positivos y negativos.

En semiconductores tales como GaAs, InP y GaN, la dispersión de portadores en semiconductores polares a temperatura ambiente es dominada por este mecanismo de dispersión, fonón-óptico-polar (FOP). La interacción FOP-Portador es referida como la interacción de Fröhlich.

La energía potencial asociada con la interacción de Fröhlich será denotada por  $\Phi_{Fr}(\mathbf{r})$ . La polarización  $\mathbf{P}$  asociada los fonones ópticos-polares y la energía potencial asociada con la interacción de Fröhlich  $\Phi_{Fr}(\mathbf{r})$ , son relacionados por:

$$\nabla^2 \Phi_{Fr}(\mathbf{r}) = 4\pi e \nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}) \quad (5.20)$$

En términos de los operadores  $a_{\mathbf{q}}^\dagger$  y  $a_{\mathbf{q}}$ ,  $\mathbf{P}(\mathbf{r})$  puede ser escrito como:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \zeta \sum_{j=1,2,3} \int (a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{e}_{\mathbf{q},j} + a_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{e}_{\mathbf{q},j}^*) \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \quad (5.21)$$

Donde  $\mathbf{e}_{\mathbf{q},j}$  representa el vector de polarización asociado con  $\mathbf{P}(\mathbf{r})$  y  $\mathbf{q}$  es el vector de onda del fonón, se deduce que:

$$4\pi \nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}) = 4\pi i \zeta \sum_{j=1,2,3} \int (a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q},j} - a_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q},j}^*) \frac{d^3q}{(2\pi)^3}$$

Considerando el caso de un cristal polar con dos átomos por celda unitaria, tal como el GaAs la contribución dominante de  $\mathbf{P}(\mathbf{r})$  resulta de los modos del fonon en el cual la

distancia normal entre los planos de cargas positivas y negativas varia. Tales modos son obviamente los modos LO. Así en el caso de los modos LO,  $\mathbf{e}_{q,j}$  es paralelo a  $\mathbf{q}$ . No obstante, los fonones OT producen desplazamientos de los planos de carga tales que ellos permanecen fijos para distancias fijas uno del otro; esto es, los planos de carga se “deslizan” uno a otro pero la distancia normal entre planos de carga no cambia, así los modos OT realizan contribuciones insignificantes a  $\mathbf{P}(r)$ . Para fonones OT  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{q,j} = 0$ . Por consiguiente:

$$4\pi\nabla \cdot \mathbf{P}(r) = 4\pi i\zeta \sum_{j=1,2,3} \int (a_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{q} - a_q^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{q}) \frac{d^3q}{(2\pi)^3}$$

Y la energía potencial asociada con la interacción de Fröhlich es dada por:

$$H_{Fr} = \Phi_{Fr}(r) = -4\pi i e \zeta \int \frac{1}{q} (a_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} - a_q^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \quad (5.22)$$

La dependencia de  $\Phi_{Fr}(r)$  de  $q^{-1}$  es similar a la interacción de Coulomb; la constante de acoplamiento  $\zeta$  permanece por determinar.

La polarización eléctrica puede ser escrita como:

$$\mathbf{P}(r) = \frac{Ne}{\epsilon(\infty)} u_q(r) \quad (5.23)$$

$N$  – numero de parejas por celda unitaria

$$u_q(r) = \frac{1}{\sqrt{VN}} \sum_q \sum_{j=1,2,3} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_{LO}}} (a_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{e}_{q,j} + a_q^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{e}_{q,j}^*)$$

$$\mathbf{P}(r) = \frac{Ne}{\epsilon(\infty)} \frac{1}{\sqrt{NV}} \sum_q \sum_{j=1,2,3} \sqrt{\frac{\hbar}{2\left(\frac{mM}{m+M}\right)\omega_{LO}}} (a_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{e}_{q,j} + a_q^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{e}_{q,j}^*) \quad (5.24)$$

Donde la división por  $\epsilon(\infty)$  da razón del apantallamiento. Notando que:

$$\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q \leftrightarrow \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \quad (5.25)$$

$$P(r) = \frac{Ne}{\epsilon(\infty)} \sqrt{\frac{\hbar}{2N \left(\frac{mM}{m+M}\right) \omega_{LO}}} \sum_{j=1,2,3} \int (a_q e^{iq \cdot r} \mathbf{e}_{q,j} + a_q^\dagger e^{-iq \cdot r} \mathbf{e}_{q,j}^*) \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \quad (5.26)$$

Comparando las ecuaciones (5.21) y (5.25) fácilmente se ve que:

$$\zeta = \frac{Ne}{\epsilon(\infty)} \sqrt{\frac{\hbar}{2N \left(\frac{mM}{m+M}\right) \omega_{LO}}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{LO}} \frac{Ne^2}{\epsilon(\infty)^2} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)} \quad (5.27)$$

Se conoce lo siguiente (Véase sesión 2.3.3 [22] )

$$\omega_{LO}^2 = \omega_{TO}^2 + 4\pi \frac{Ne^2}{\epsilon(\infty)} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \Rightarrow \frac{\omega_{LO}^2}{4\pi} \left[ \frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(\infty)} \frac{\omega_{TO}^2}{\omega_{LO}^2} \right] = \frac{Ne^2}{\epsilon(\infty)^2} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)$$

De la relación de Lyddane-Sachs-Teller (Véase sección 2.3.3 [22])

$$\frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)} = \frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2}$$

Resulta:

$$\frac{\omega_{LO}^2}{4\pi} \left[ \frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right] = \frac{Ne^2}{\epsilon(\infty)^2} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)$$

Por lo que se puede escribir la ecuación (5.27) de la siguiente manera:

$$\zeta = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{LO}} \frac{\omega_{LO}^2}{4\pi} \left[ \frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right]}$$

Y utilizando la relación dada en la ecuación (5.25), se escribe  $H_{Fr}$ , como:

$$H_{Fr} = -4\pi i e \zeta \sum_q \frac{1}{q\sqrt{V}} (a_q e^{iq \cdot r} - a_q^\dagger e^{-iq \cdot r})$$



Finalmente se obtiene una expresión para la interacción del electrón con los fonones ópticos:

$$H_{Fr} = -i \left[ \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{LO}^2}{V} \left[ \frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right] \right]^{1/2} \sum_q \frac{1}{q} (a_q e^{iq \cdot r} - a_q^\dagger e^{-iq \cdot r}) \quad (5.28)$$

## 5.5. FUNCIÓN ESPECTRAL DE LA INTERACCIÓN CON FONONES ACÚSTICOS

Cabe diferenciar los regímenes en los que van a ser permitidas las interacciones con los diferentes tipos de fonones, por lo que la reducción en el tamaño del punto cuántico refleja la separación entre sus niveles de energía. La energía de confinamiento depende del inverso al cuadrado del tamaño del punto cuántico: entre mayor tamaño, menor la energía de confinamiento, es decir, menor energía de espaciamiento entre niveles. Esto lleva a un problema reportado en la literatura como “phonon bottleneck”. Este fenómeno se da debido a la poca dispersión de los modos ópticos. Para que dé lugar el acoplamiento electrón-LO es necesario que la energía de confinamiento del electrón corresponda a la energía de los fonones ópticos, cumpliendo el principio de conservación de la energía y del momento. En puntos cuánticos “grandes” ( $\omega_0 < \omega_{LO}$ ) queda bloqueada la interacción electrón-LO, y el paso a seguir es estudiar el acoplamiento del electrón con los fonones acústicos, como baño efectivo para el espín.

Como esta en la tabla 5.1 existen dos posibles interacciones de los modos acústicos con un electrón localizado en la banda de conducción: el potencial de deformación y la interacción piezoeléctrica, pero el potencial de deformación como mecanismo de interacción electrón-LA/TA se refleja en disipación coherentemente amortiguada para el espín, por lo que se referirá solamente a la interacción piezoeléctrica.

Para construir el Hamiltoniano global del universo compuesto por: el electrón dentro del punto cuántico, el espín del electrón, el campo magnético externo (constante), los modos

acústicos, y las formas de interacción de los elementos mencionados, se usaran los ingredientes preparados en el capítulo.

$$H = H_e + H_{Spin} + H_{SO} + H_{Ac} + H_{e-Ac} \quad (5.29)$$

El confinamiento al cual está sujeto el electrón en el punto cuántico y el campo magnético externo definen los auto-estados, los cuales se conocen como estados de Fock-Darwin [23]. Despreciando la parte diamagnética del Hamiltoniano de Fock-Darwin por simplicidad, se puede separar los términos correspondientes al eje  $x$  y al eje  $y$ , el Hamiltoniano correspondiente es:

$$H_e = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{m_e}{2} \tilde{\omega}^2 (x^2 + y^2) \quad (5.30)$$

El espín interacciona directamente con el campo magnético:

$$H_{Spin} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Para mayor claridad se conservara la notación del capítulo 4 reescribiendo la ecuación anterior como:

$$H_S = -\frac{\hbar}{2} \Delta \sigma_x \quad (5.31)$$

La interacción espín-orbita será descrita por la ecuación (5.7)

$$H_{SO} = \gamma_c \langle K_z^2 \rangle (-\sigma_x K_x + \sigma_y K_y)$$

La forma para el Hamiltoniano de los modos acústicos ecuación (5.10), es:

$$H_{Ac} = \sum_{q\lambda} \omega_q \lambda \left( a_{q\lambda}^\dagger a_{q\lambda} + \frac{1}{2} \right)$$

La interacción electrón-fonón merece una atención especial, está determinada por la ecuación (5.19). Si se considera  $qr \ll 1$ , se puede aplicar la aproximación dipolar, es decir, se restringe el estudio a fonones con comprimimiento de onda larga. El resultado de la aproximación es:

$$H_{ep} = \sum_{q\lambda} \left( \frac{\hbar}{2NV\rho\omega_{q\lambda}} \right)^{1/2} (1 + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})(a_{q\lambda} + a_{-q\lambda}^\dagger)b_q \quad (5.32)$$

De la cual se obtiene un término que no depende de la posición del electrón y que traslada el punto de oscilación de los fonones. El segundo término es lineal a la posición del electrón y por lo tanto se puede separar en coordenadas. Reescribiendo solamente la coordenada  $x$ :

$$H_{int} = \frac{\hbar}{2\sqrt{m_e\omega_0}} (c_x^\dagger + c_x) \sum_{qx} b_q (a_{qx}^\dagger + a_{qx}) \quad (5.33)$$

Para la coordenada  $y$  corresponde una ecuación totalmente similar a la anterior. En la tabla 5.2 aparecen algunos valores experimentales de  $b_q$  en estructuras tipo blenda de zinc,  $b_q$  se reduce a:

$$b_{q\lambda} = b(\hat{\mathbf{q}}_i \hat{\mathbf{q}}_j)_\lambda$$

Y específicamente para el caso del AsGa.

$$b = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty} \frac{e_{14}}{e}$$

Donde  $e_{14}$  es la constante elástica determinada a partir de las propiedades de simetría del cristal y  $\epsilon_\infty$  la constante dieléctrica del material.

	b(eV/Å)
Si	0
Ge	0
AsGa	0.166
AsIn	0.041

Tabla 5.2. Constante piezoeléctrica

Finalmente se tiene el Hamiltoniano completo que describe el problema, pero falta el método a seguir. Si se observa con cuidado en el Hamiltoniano global la mitad es semejante al Hamiltoniano de espín boson y la otra mitad al Hamiltoniano descrito en el capítulo 4,

ecuación (4.1), y son justamente esas semejanza las que definen el camino a seguir. Como se sabe los fonones acústicos forman un baño para el electrón, entonces la forma de proceder es resolver el baño del electrón diagonalizando el: Hamiltoniano del electrón + fonones acústicos + interacción electrón-fonón. Esta diagonalización se realiza usando una transformación canónica el procedimiento se encuentra en el apéndice B.1.

¿Qué tanto influenciara a la coherencia del espín el hecho de que el electrón este ligado a los fonones acústicos? Para resolver esta pregunta, una vez conocidos los modos de oscilación del conjunto electrón- fonón, se incluye la interacción espín orbita y se procede a diagonalizar nuevamente (apéndice B.2) con la intención de llegar a una ecuación del tipo espín-boson (descrita en la sección 4.2), de la cual es fácilmente extraída la función espectral efectiva. Una vez conocida esa función se conoce el comportamiento del sistema (el espín) en presencia de un baño efectivo de fonones acústicos.

La forma general de la función espectral del acoplamiento electrón-fonón es:

$$J(\omega) = \eta_s \frac{\omega^s}{\omega_D^{s-1}} e^{(-\omega/\omega_D)} \quad (5.34)$$

El término  $\eta_s$  para el caso particular de la interacción piezoeléctrica,  $s = 3$  es:

$$\eta_s = \frac{b^2 \omega_D^2}{35\pi\rho} \left( \frac{1}{v_l^5} + \frac{4}{3v_t^5} \right) \quad (5.35)$$

Donde  $v_l$  y  $v_t$  son las velocidades longitudinales y transversales de los modos acústicos y  $\omega_D$  es la frecuencia de Debye.

Que la función espectral del electrón acoplado con un baño de fonones dependa de  $s = 3$  quiere decir que la disipación es súper-ohmica, o sea, presenta un comportamiento sub-amortiguado. Partiendo de la función espectral para el electrón en un baño de fonones (acústicos u ópticos) se llega a que la función espectral efectiva para el espín es:

$$J_{Eff}(\omega) = \frac{4}{\pi} \left( \frac{\zeta}{\omega_0} \right)^2 \left( \frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 J(\omega) \quad (5.36)$$

Específicamente  $J(\omega)$  para el baño de fonones acústicos, ecuación (5.34), se tiene:

$$J_{Eff}(\omega) = \frac{4}{\pi} \left( \frac{\zeta}{\omega_0} \right)^2 \left( \frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \eta_s \frac{\omega^3}{\omega_D^2} e^{-\omega/\omega_D} \quad (5.37)$$

Para este tipo de dependencia en  $\omega$  el comportamiento del sistema es súper-ohmico, presentando oscilaciones coherentemente amortiguadas, es decir que el baño de fonones acústicos no representa una fuente significativa de Decoherencia para el espín confinado en un punto cuántico.

## 5.6. FUNCIÓN ESPECTRAL DE LA INTERACCIÓN CON FONONES ÓPTICOS

En el caso de puntos cuánticos grandes lo suficiente como para que la energía entre niveles sea mucho menor a la energía de los fonones ópticos (en GaAs), la posibilidad del acoplamiento no existe. Pero si se reduce el tamaño del punto cuántico de manera de que dichas energías se aproximen, queda abierta la posibilidad del acoplamiento electrón-fonón óptico como fuente de relajación para el electrón y por lo tanto se puede considerar al electrón acoplado con los modos ópticos (además de los mecanismos de amortiguamiento como los fonones acústicos) como un nuevo baño efectivo para el espín.

Como se ha dicho, solamente existe una forma de interacción electrón- fonón óptico para un electrón localizado en la banda de conducción (GaAs), y es la interacción de Fröhlich.

El problema ahora es extraer la función espectral del nuevo baño efectivo para espín: el electrón acoplado con los modos ópticos que a su vez se acoplan con un baño de fonones acústicos. Una vez se conozca dicha función espectral se procede de igual manera que en el caso del baño de fonones acústicos para finalmente conocer el tipo de disipación al cual está sujeto el espín debido a este baño efectivo (dentro de las aproximaciones hechas)

Lo primero es asumir un tipo de acoplamiento entre los modos ópticos y el baño de fonones acústicos: se asume disipación óhmica (con base al comportamiento amortiguado de los modos ópticos confinados en puntos cuánticos, véase tabla 4.1) y se lleva a una forma diagonal el Hamiltoniano pertinente. Paralelamente se reduce la interacción de Fröhlich a un Hamiltoniano de dos osciladores acoplados, por medio de la aproximación dipolar. Hecho esto, se introduce la forma resultante de la interacción de Fröhlich en el

Hamiltoniano diagonal del acoplamiento entre fonones y se lleva nuevamente a una forma diagonal para obtener la función espectral del baño efectivo.

Así que si se Parte de la ecuación (5.28) se reduce el acoplamiento electrón-LO por medio de una aproximación dipolar a una interacción de dos osciladores armónicos acoplados, considerando el vector de onda de los fonones sobre el plano. Se define:

$$\alpha = -i \left[ \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{LO}^2}{V} \left[ \frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right] \right]^{1/2}$$

Sea:

$$e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = e^{-i(q_x x + q_y y)} \quad (5.38)$$

Como se sabe:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (c_x + c_x^\dagger) \Rightarrow c_x + c_x^\dagger = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \quad (5.39)$$

Y

$$P_x = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (c_x^\dagger - c_x) \Rightarrow c_x - c_x^\dagger = i \sqrt{\frac{2}{\hbar m \omega}} P_x \quad (5.40)$$

Sumando las expresiones (5.39) y (5.40) y tomando el conjugado se, obtiene:

$$c_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \frac{P_x}{\sqrt{2\hbar m \omega}} ; c_x^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - i \frac{P_x}{\sqrt{2\hbar m \omega}} \quad (5.41)$$

Análogamente para y:

$$c_y = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} y + i \frac{P_y}{\sqrt{2\hbar m \omega}} ; c_y^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} y - i \frac{P_y}{\sqrt{2\hbar m \omega}} \quad (5.42)$$

Además sean:

$$c_d = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_x - i c_y); c_d^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_x^\dagger + i c_y^\dagger); n = c_d c_d^\dagger \quad (5.43)$$

$$c_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_x + ic_y); c_g^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_x^\dagger - ic_y^\dagger); m = c_g c_g^\dagger \quad (5.44)$$

Escribiendo las componentes en el plano  $x$ - $y$  del vector de onda  $\mathbf{q}$ , de la siguiente manera:

$$q_x = \frac{1}{2}[q + q^*]; q_y = \frac{i}{2}[q - q^*]$$

Y utilizando las relaciones dadas en (5.39) y (5.40), en la ecuación (5.38):

$$\begin{aligned} \exp\{-i(q_x x + q_y y)\} &= \exp\left\{\frac{i}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_e}}[(q + q^*)(c_x + c_x^\dagger) - i(q - q^*)(c_y + c_y^\dagger)]\right\} \\ &= \exp\left\{\frac{i}{2\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_e}}[q(c_x - ic_y + c_x^\dagger - ic_y^\dagger) + q^*(c_x + ic_y + c_x^\dagger + c_y^\dagger)]\right\} \end{aligned}$$

De las relaciones dadas en (5.43) y (5.44) se tiene:

$$\exp\left\{\frac{i}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_e}}[q(c_d + c_g^\dagger) + q^*(c_d^\dagger + c_g)]\right\}$$

Como el término  $\left(\frac{\hbar}{m\omega_e}\right)^{\frac{1}{2}}$  tiene unidades de longitud, se le llamara el comprimiento eléctrico  $L$ . Así la expresión anterior es:

$$e^{-i(q_x x + q_y y)} = \exp\left\{-\frac{i}{2}L[q(c_d + c_g^\dagger) + q^*(c_d^\dagger + c_g)]\right\} \quad (5.45)$$

Análogamente para:

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = e^{i(q_x x + q_y y)} = \exp\left\{\frac{i}{2}L[q(c_d + c_g^\dagger) + q^*(c_d^\dagger + c_g)]\right\} \quad (5.46)$$

Ahora dentro de la aproximación dipolar:

$$\{a_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} - a_q^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\} = a_q \left\{1 + \frac{i}{2}Lq(c_d + c_g^\dagger) + \frac{i}{2}Lq^*(c_d^\dagger + c_g)\right\}$$

$$-a_q^\dagger \left\{ 1 - \frac{i}{2} Lq(c_d + c_g^\dagger) - \frac{i}{2} Lq^*(c_d^\dagger + c_g) \right\}$$

Como  $q$  es complejo se puede escribir como  $q = qe^{i\theta_q}$ , y sustituyéndolo en el Hamiltoniano de la ecuación (5.28):

$$\begin{aligned} H_{Fr} &= i\alpha \sum_q \frac{1}{q} \left\{ a_q \left\{ 1 + \frac{i}{2} Lqe^{i\theta_q}(c_d + c_g^\dagger) + \frac{i}{2} Lqe^{-i\theta_q}(c_d^\dagger + c_g) \right\} \right. \\ &\quad \left. - a_q^\dagger \left\{ 1 - \frac{i}{2} Lqe^{i\theta_q}(c_d + c_g^\dagger) - \frac{i}{2} Lqe^{-i\theta_q}(c_d^\dagger + c_g) \right\} \right\} \\ &= i\alpha \sum_q \left[ \frac{a_q - a_q^\dagger}{q} \right] - \frac{L\alpha}{2} (c_d + c_d^\dagger + c_g + c_g^\dagger) \sum_q \cos(\theta_q) (a_q + a_q^\dagger) \\ &\quad - i \frac{L\alpha}{2} (c_d + c_g^\dagger - c_d^\dagger - c_g) \sum_q \sin(\theta_q) (a_q + a_q^\dagger) \end{aligned} \quad (5.47)$$

Teniéndose en cuenta las expresiones (5.41) y (5.42):

$$x = \frac{L}{2} (c_d + c_d^\dagger + c_g + c_g^\dagger); \quad y = i \frac{L}{2} (c_d + c_g^\dagger - c_d^\dagger - c_g) \quad (5.48)$$

Donde  $x$  e  $y$  son las coordenadas del electrón.

Para el fonón se puede hacer la misma definición, sabiendo que  $a_q + a_q^\dagger$  se puede leer como un operador de “posición” en el espacio de  $k$ :

$$k_x = \sum_q \cos(\theta_q) (a_q + a_q^\dagger) = b_x + b_x^\dagger \quad (5.49)$$

$$k_y = \sum_q \sin(\theta_q) (a_q + a_q^\dagger) = b_y + b_y^\dagger \quad (5.50)$$

Y sustituyendo en el Hamiltoniano de interacción ecuación (5.47):

$$H_{Fr} = i\alpha \sum_q \left[ \frac{a_q - a_q^\dagger}{q} \right] - \frac{L\alpha}{\sqrt{2}} (c_x + c_x^\dagger) (b_x + b_x^\dagger) - i \frac{L\alpha}{\sqrt{2}} (c_y + c_y^\dagger) (b_y + b_y^\dagger) \quad (5.51)$$



Así que se desacopla el problema en las dos coordenadas, como resultado de la aproximación dipolar. Se puede notar que el primer término va a ser absorbido por los operadores de ocupación. El Hamiltoniano del electrón con un baño de fonones ópticos es:

$$H \simeq \omega_{LO}(b_x^\dagger b_x + b_y^\dagger b_y) + \omega(c_x^\dagger c_x + c_y^\dagger c_y) - \frac{L\alpha}{\sqrt{2}}(c_x + c_x^\dagger)(b_x + b_x^\dagger) - i \frac{L\alpha}{\sqrt{2}}(c_y + c_y^\dagger)(b_y + b_y^\dagger) \quad (5.52)$$

El siguiente es el Hamiltoniano de un sistema compuesto por dos osciladores, uno de ellos acoplado con un baño. Los  $\beta$ 's son operadores en forma diagonal del Hamiltoniano de un oscilador (cuyos operadores de ascenso y descenso son  $b_0$  y  $b_0^\dagger$ ) acoplado con un baño de osciladores. Los  $c$ 's corresponden al otro oscilador.

$$H = \sum_{i=0}^N \Omega_i \beta_i^\dagger \beta_i + \omega_c c^\dagger c + \frac{L\alpha}{\sqrt{2}}(c^\dagger + c)(b_0^\dagger + b_0)$$

Utilizando los resultados para llevar a una forma diagonal del Hamiltoniano de un oscilador armónico (véase apéndice B).

$$= \sum_{i=0}^N \Omega_i \beta_i^\dagger \beta_i + \omega_c c^\dagger c + \frac{L\alpha}{\sqrt{2}}(c^\dagger + c) \left[ \sum_{l=0}^N (u_0^l \beta_l^\dagger + v_0^l \beta_l) + \sum_{l=0}^N (u_0^l \beta_l + v_0^l \beta_l^\dagger) \right]$$

Agrupando términos:

$$H = \sum_{i=0}^N \Omega_i \beta_i^\dagger \beta_i + \omega_c c^\dagger c + \frac{L\alpha}{\sqrt{2}}(c^\dagger + c) \sum_{l=0}^N (u_0^l + v_0^l) (\beta_l^\dagger + \beta_l) \quad (5.53)$$

Sea:

$$C_l = \frac{\alpha}{\sqrt{2}L} (u_0^l + v_0^l)$$

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_l \frac{C_l^2}{m_l \omega_{LO}^2} \delta(\omega - \Omega_l) = \frac{\pi}{4\rho NV \omega_{LO}^2} \sum_l \left[ \frac{\alpha}{L} (u_0^l + v_0^l) \right]^2 \delta(\omega - \Omega_l)$$

$$= \frac{\pi\alpha^2}{4\rho NV\omega_{LO}^2 L^2} \sum_l Z_l^2 \delta(\omega - \Omega_l) = \frac{\pi\alpha^2}{4\rho NV\omega_{LO}^2 L^2} \oint \frac{\delta(\omega - \Omega) d\Omega}{f(\Omega) - 1} \frac{1}{i\pi}$$

Una de las formas de escribir la función delta de Dirac es:

$$\delta(\omega - \Omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{\pi} \frac{1}{(\omega - \Omega)^2 + \epsilon^2}$$

$$J(\omega) = \frac{\alpha^2}{4i\rho NV\omega_{LO}^2 L^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{\pi} \oint \frac{d\Omega}{(f(\Omega) - 1)[(\omega - \Omega)^2 + \epsilon^2]}$$

Para calcular la integral se utiliza el método de los residuos, la cual da:

$$\oint \frac{d\Omega}{(f(\Omega) - 1)[(\omega - \Omega)^2 + \epsilon^2]} = \frac{\pi}{\epsilon} \left[ \frac{1}{f(\omega - i\epsilon) - 1} - \frac{1}{f(\omega + i\epsilon) - 1} \right]$$

$$J(\omega) = \frac{\alpha^2}{4i\rho NV\omega_{LO}^2 L^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon \pi}{\pi \epsilon} \left[ \frac{1}{f(\omega - i\epsilon) - 1} - \frac{1}{f(\omega + i\epsilon) - 1} \right]$$

$$J(\omega) = \frac{\alpha^2}{4i\rho NV\omega_{LO}^2 L^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{f(\omega - i\epsilon) - 1} - \frac{1}{f(\omega + i\epsilon) - 1} \right]$$

Se asume disipación óhmica en el acoplamiento del primer oscilador con el baño de osciladores:

$$\omega_{LO}^2 (f(\omega + i\epsilon) - 1) = \omega^2 - \omega_{LO}^2 + 2i\gamma\omega \text{sign}(\epsilon)$$

$$J(\omega) = \frac{\alpha^2}{4i\rho NVL^2} \left[ \frac{1}{\omega^2 - \omega_{LO}^2 - 2i\gamma\omega} - \frac{1}{\omega^2 - \omega_{LO}^2 + 2i\gamma\omega} \right]$$

La función espectral es:

$$J(\omega) = \frac{\alpha^2}{\rho NVL^2} \frac{\gamma\omega}{(\omega^2 - \omega_{LO}^2)^2 + 4(\gamma\omega)^2} \quad (5.54)$$

Donde  $\alpha$  es la constante de acoplamiento de Fröhlich,  $L^2$  el comprimido eléctrico y  $\gamma$  es la constante de amortiguamiento de los fonones ópticos ( $\gamma \sim 1.4 \times 10^{11} \text{s}^{-1}$  para el GaAs).

Se observa que el acoplamiento óhmico de los fonones ópticos con el baño de los fonones acústicos se traduce en un comportamiento óhmico también para el electrón

Esta función espectral tiene interés para el caso específico de  $\omega \sim \omega_{LO}$ . Partiendo del tipo de disipación del baño efectivo para el electrón se llega a la función espectral para el espín la cual es:

$$J_{Eff}(\omega) = \frac{4\alpha^2}{\rho NV L^2 \pi} \left(\frac{\zeta}{\omega_0}\right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 \frac{\gamma\omega}{(\omega^2 - \omega_{LO}^2)^2 + 4(\gamma\omega)^2} \quad (5.54)$$

Para bajas frecuencias, esta función espectral efectiva corresponde a disipación súper-ohmica, así el sistema presenta nuevamente un comportamiento oscilatorio cuya amplitud decae con el tiempo. La rata de amortiguamiento en este caso depende de  $\Delta^3$  y el tiempo de decoherencia como  $\Delta^{-3}$

## CAPITULO 6: CONCLUSIONES

En este trabajo se muestra como el espín electrónico en puntos cuánticos acoplados actúa como un sistema disipativo debido a las interacciones electrón-fonón (interacción de Fröhlich y la interacción piezoeléctrica), las cuales se presentan como un baño efectivo para el espín al interactuar con la órbita electrónica.

Se mostro que en una molécula diatómica constituida por puntos cuánticos grandes (mayores que  $25 \text{ nm}$  en adelante y energías menores a  $50 \text{ meV}$ ) la principal fuente de decoherencia es la interacción piezoeléctrica (causantes de los fonones acústicos), que por sí misma es una fuente de disipación súper-ohmica para el electrón, esto se traduce en una dinámica sub amortiguada para el espín, dentro de la aproximación dipolar, la cual permite determinar que se retenga información cuántica en base al espín hasta tiempos del orden de  $\omega^{-5}$ , resultado optimo para la transferencia masiva de información.

En los resultados del análisis del electrón y los fonones ópticos (o sea puntos cuánticos pequeños menores a  $25 \text{ nm}$  y energías mayores a  $50 \text{ meV}$ ) se muestra que un acoplamiento óhmico entre los fonones ópticos y acústicos genera un baño óhmico para el electrón, que corresponde en la aproximación dipolar a la interacción de dos osciladores armónicos bidimensionales desacoplados en las direcciones que es analizado a través de la interacción de Fröhlich. Lo cual se traduce en una dependencia de la función espectral de  $\omega^3$  lo que con lleva a tiempos del orden de  $\omega^{-3}$  esto conduce a un sistema más estable y de más tiempo para la transferencia de información que en el caso anterior.

Dentro del tratamiento fenomenológico dado a las interacciones del electrón con el baño o reservorio, se nota que tanto para puntos cuánticos grandes como para puntos pequeños el

modelo de Caldeira- Leggett es apropiado para describir este tipo de sistemas disipativos sin enfrascarse en primeros principios y cálculos complicados.

## APENDICES

## APÉNDICE A: REPRESENTACIÓN DE HEISENBERG Y DE INTERACCIÓN.

En la representación de Schrödinger la dependencia temporal de la matriz de densidad es gobernada por la ecuación de Liouville-Von Neumann, como se tiene en la ecuación (1.8).

Si se asume que para algún tiempo inicial fijo  $t_0$ , los estados cuanticos en ambas representaciones coinciden, esto es  $\rho(t_0) = \rho_H(t_0)$ . Los operadores en la representación de Heisenberg y Schrödinger son relacionados a través de una transformación canónica de la forma:

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0)A(t)U(t, t_0) \quad (\text{A.1})$$

En la representación de Schrödinger los operadores dependen explícitamente del tiempo, obviamente para el tiempo  $t_0$  los operadores en ambas representaciones coinciden  $A_H(t_0) = A(t_0)$ . En la representación de Heisenberg los valores esperados son determinados a través de la matriz de densidad fija  $\rho_H(t_0)$ . La equivalencia física de las dos representaciones se hace evidente por el hecho que el valor esperado de un observable  $A(t)$  es el mismo en ambas representaciones:

$$\langle A(t) \rangle = \text{tr}\{\rho(t)A(t)\} = \text{tr}\{\rho_H(t_0)A_H(t)\} \quad (\text{A.2})$$

Para derivar la ecuación de movimiento de los operadores en la representación de Heisenberg, se deriva ambos lados de (A.1) con respecto al tiempo.

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = \frac{dU^\dagger(t, t_0)}{dt}A(t)U(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0)\frac{dA(t)}{dt}U(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0)A(t)\frac{dU(t, t_0)}{dt}$$

Como:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad y \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0)$$

Análogamente:

$$\langle\psi(t)| = \langle\psi(t_0)|U^\dagger(t, t_0) \quad y \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi(t)| = \langle\psi(t)|H$$

$$\Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger(t, t_0) = U^\dagger(t, t_0)H$$

Entonces, se tendrá:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_H(t) &= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, t_0) H A(t) U(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0) \frac{dA(t)}{dt} U(t, t_0) \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t, t_0) A(t) H U(t, t_0) \end{aligned}$$

Introduciendo el operador identidad  $U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) = 1$ , en el primer y último término de esta ecuación y teniendo en cuenta la ecuación (A.1) y que:

$$H_H(t) = U^\dagger(t, t_0)H(t)U(t, t_0)$$

Se tiene:

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = -\frac{1}{i\hbar} H_H(t)A_H(t) + \frac{1}{i\hbar} A_H(t)H_H(t) + U^\dagger(t, t_0) \frac{dA(t)}{dt} U(t, t_0)$$

Con:

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) \frac{dA(t)}{dt} U(t, t_0)$$

Finalmente:

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{i}{\hbar} [H_H(t), A_H(t)] + \frac{dA_H(t)}{dt} \quad (\text{A. 3})$$

Ahora para la ecuación de movimiento del valor esperado de un observable arbitrario (en la representación de Schrödinger) que en general dependerá explícitamente del tiempo

derivando la ecuación (A.2) con respecto al tiempo y utilizando la ecuación de movimiento de Heisenberg se encuentra:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A(t)\rangle &= \left\langle \frac{d}{dt}A_H(t)\right\rangle = \frac{d}{dt}\text{tr}\{\rho_H(t_0)A_H(t)\} = \text{tr}\left\{\rho_H(t_0)\frac{dA_H(t)}{dt}\right\} \\ \frac{d}{dt}\langle A(t)\rangle &= \text{tr}\left\{\rho_H(t_0)\left(\frac{i}{\hbar}[H_H(t), A_H(t)] + \frac{dA_H(t)}{dt}\right)\right\}\end{aligned}\quad (\text{A. 4})$$

Esta ecuación es conocida como la ecuación de Ehrenfest. Dice que la variación en el tiempo del valor esperado de un observable  $A(t)$  es igual al valor esperado de la derivada con respecto al tiempo del correspondiente observable  $A_H(t)$  de Heisenberg.

Las representaciones de Heisenberg y Schrödinger son casos límites de una representación más general que es llamada la representación de interacción. Escribiendo el Hamiltoniano del sistema como la suma de dos partes:

$$H(t) = H_0 + \hat{H}_I(t)$$

La forma precisa del desdoblamiento del Hamiltoniano depende de la situación física especial bajo estudio. En general  $H_0$  representa la suma de las energías de dos sistemas cuando la interacción entre ellos es ignorada y suponiendo que es independiente del tiempo.  $\hat{H}_I(t)$  Es el Hamiltoniano que describe la interacción entre los sistemas. El valor esperado de un observable de Schrödinger (que puede depender explícitamente del tiempo) para un tiempo  $t$  es dado por:

$$\langle A(t)\rangle = \text{tr}\{A(t)\rho(t)\} = \text{tr}\{A(t)e^{-iHt}\rho(0)e^{iHt}\}$$

Se reescribe esta expresión como:

$$\langle A(t)\rangle = \text{tr}\left\{(e^{iH_0t}A(t)e^{-iH_0t})(e^{iH_0t}e^{-iHt}\rho(0)e^{iHt}e^{-iH_0t})\right\}\quad (\text{A. 5})$$

Insertando los operadores de evolución  $e^{\pm iH_0t}$ , al comienzo y al final de la expresión se uso el hecho que la traza es cíclica bajo permutaciones de los argumentos, esto es:

$$\text{tr}\{ABC \dots\} = \text{tr}\{BC \dots A\}, \text{ etc.}$$



La ecuación (A.5) motiva a introducir la forma de los operadores y la matriz densidad en la representación de interacción de la manera siguiente:

$$A^{(I)}(t) = e^{iH_0 t} A(t) e^{-iH_0 t}$$

$$\rho^{(I)}(t) = e^{iH_0 t} \rho(t) e^{-iH_0 t} = e^{iH_0 t} e^{-iHt} \rho(0) e^{iHt} e^{-iH_0 t}$$

La dinámica de los operadores en la representación de interacción está completamente determinada por el Hamiltoniano sin perturbar (libre) en vez del Hamiltoniano total.

Con estas definiciones la ecuación (A.5) se escribe escrita en la forma compacta:

$$\langle A(t) \rangle = \text{tr}\{A^{(I)}(t)\rho^{(I)}(t)\}$$

La evolución para la matriz de densidad en la representación de interacción es:

$$\frac{d}{dt}\rho^{(I)}(t) = i[H_0, \rho^{(I)}(t)] + e^{iH_0 t} \left( \frac{d}{dt}\rho^{(I)}(t) \right) e^{-iH_0 t} \quad (\text{A. 6})$$

Usando la ecuación estándar de Liouville-Von Neumann para la matriz densidad en la representación de Schrödinger se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho^{(I)}(t) &= i[H_0, \rho^{(I)}(t)] - ie^{iH_0 t} [H, \rho(t)] e^{-iH_0 t} \\ &= i[H_0, \rho^{(I)}(t)] - ie^{iH_0 t} [H_0 + V, \rho(t)] e^{-iH_0 t} \end{aligned}$$

Desarrollando el segundo conmutador se logra:

$$\frac{d}{dt}\rho^{(I)} = i[H_0, \rho^{(I)}] - i[H_0, \rho^{(I)}] - i[V^{(I)}(t), \rho^{(I)}(t)]$$

Entonces:

$$\frac{d}{dt}\rho^{(I)} = -i[V^{(I)}(t), \rho^{(I)}(t)] \quad (\text{A. 7})$$

La evolución temporal del operador densidad en la representación de interacción está dada por una ecuación de tipo Liouville-Von Neumann, pero con la perturbación  $V^{(I)}(t)$  en la representación de interacción en lugar del Hamiltoniano total.

## APENDICE B: PROCESOS DE DIAGONALIZACION

### B.1 MODOS DE OSCILACIÓN DE UN OSCILADOR HARMÓNICO ACOPLADO CON UN BAÑO DE OSCILADORES, MEDIANTE UNA TRANSFORMACIÓN CANÓNICA.

Se describirá el Hamiltoniano de un oscilador armónico con acoplamiento entre la coordenada del oscilador y el conjunto de coordenadas del baño.

Comenzando con el Hamiltoniano de un solo oscilador armónico, el cual es:

$$H_{os} = \hbar\omega_0 \left( b_0^\dagger b_0 + \frac{1}{2} \right)$$

Se toma  $\hbar = 1$ , y la energía de punto cero del baño es irrelevante, se tiene:

$$H_{os} = \omega_0 b_0^\dagger b_0 \tag{B.1}$$

Ahora, se tomara el acoplamiento con la coordenada de la siguiente forma:

$$\frac{1}{2} \sum_j K_j X^2 \quad ; \quad X = \frac{1}{\sqrt{2m_0\omega_0}} (b_0^\dagger + b_0)$$

$$\frac{1}{2} \sum_j \frac{K_j}{2m_0\omega_0} (b_0^\dagger + b_0)^2 = \frac{\lambda}{2} (b_0^\dagger + b_0)^2 \quad (B.2)$$

Con:

$$\lambda = \frac{1}{2m_0\omega_0} \sum_j K_j$$

El acoplamiento entre la coordenada del oscilador y el conjunto de coordenadas del baño es:

$$\frac{1}{2} \sum_j K_j \tilde{X}_j X \quad ; \quad \tilde{X}_j = \frac{1}{\sqrt{2m_j\omega_j}} (b_j^\dagger + b_j)$$

$$\frac{1}{2} \sum_j K_j \frac{1}{\sqrt{2m_j\omega_j}} (b_j^\dagger + b_j) \frac{1}{\sqrt{2m_0\omega_0}} (b_0^\dagger + b_0) = (b_0^\dagger + b_0) \sum_j C_j (b_j^\dagger + b_j) \quad (B.3)$$

Donde:

$$C_j = \frac{K_j}{4\sqrt{m_0\omega_0 m_j\omega_j}}$$

El Hamiltoniano de un baño de N osciladores

$$\sum_j \omega_j b_j^\dagger b_j \quad (B.4)$$

Se tiene el Hamiltoniano total:

$$H = \omega_0 b_0^\dagger b_0 + \frac{\lambda}{2} (b_0^\dagger + b_0)^2 + (b_0^\dagger + b_0) \sum_j C_j (b_j^\dagger + b_j) + \sum_j \omega_j b_j^\dagger b_j \quad (B.5)$$

Este Hamiltoniano se lleva a una forma diagonal para que quede de la siguiente forma:

$$H = \sum_{l=0}^N \Omega_l \beta_l^\dagger \beta_l \quad (B.6)$$

A través de una transformación canónica del tipo:

$$\beta_l^\dagger = \sum_j (u_j^l b_j^\dagger - v_j^l b_j) \quad (B.7)$$

Usando la ecuación del movimiento de Heisenberg, para el Hamiltoniano de la ecuación (B.6), y el operador de la transformación canónica ecuación (B.7), se tiene:

$$-i \frac{d}{dt} \beta_l^\dagger(t) = [H, \beta_l^\dagger] = \Omega_l \beta_l^\dagger(t) \quad (B.8)$$

El cual se obtiene de la operación del conmutador con el Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} & \left[ \sum_j \omega_j b_j^\dagger b_j, \beta_l^\dagger \right] + \left[ (b_0^\dagger + b_0) \sum_j C_j (b_j^\dagger + b_j), \beta_l^\dagger \right] + \\ & + \left[ \frac{\lambda}{2} (b_0^\dagger + b_0)^2, \beta_l^\dagger \right] = \Omega_l \beta_l^\dagger \end{aligned} \quad (B.9)$$

Para el desarrollo de cada término, es útil usar la siguiente propiedad del conmutador:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (B.10)$$

Para el primer conmutador se tiene:

$$\begin{aligned} & \left[ \sum_j \omega_j b_j^\dagger b_j, \beta_l^\dagger \right] = \sum_j \omega_j [b_j^\dagger b_j, u_j^l b_j^\dagger - v_j^l b_j] \\ & = \sum_j \omega_j \{ u_j^l b_j^\dagger (b_j b_j^\dagger - b_j^\dagger b_j) + v_j^l (b_j b_j^\dagger - b_j^\dagger b_j) b_j \} \end{aligned}$$

De la relación de conmutación:

$$[b_j, b_k^\dagger] = b_j b_k^\dagger - b_k^\dagger b_j = \delta_{kj} = \begin{cases} 1 & \text{si } k = j \\ 0 & \text{si } k \neq j \end{cases}$$

$$\left[ \sum_j \omega_j b_j^\dagger b_j, \beta_l^\dagger \right] = \sum_j \omega_j (u_j^l b_j^\dagger + v_j^l b_j) \quad (B.11)$$

El término siguiente es:

$$\begin{aligned}
& \left[ (b_0^\dagger + b_0) \sum_j C_j (b_j^\dagger + b_j), \beta_l^\dagger \right] = \left[ (b_0^\dagger + b_0) \sum_j C_j (b_j^\dagger + b_j), \sum_j (u_j^l b_j^\dagger - v_j^l b_j) \right] \\
& = (b_0^\dagger + b_0) \sum_j C_j [b_j^\dagger + b_j, u_j^l b_j^\dagger - v_j^l b_j] + \sum_j C_j [b_0^\dagger + b_0, u_0^l b_0^\dagger - v_0^l b_0] (b_j^\dagger + b_j) \\
& = (b_0^\dagger + b_0) \sum_j C_j \{u_j^l (b_j b_j^\dagger - b_j^\dagger b_j) + v_j^l (b_j b_j^\dagger - b_j^\dagger b_j)\} \\
& \quad + \{u_0^l (b_0 b_0^\dagger - b_0^\dagger b_0) + v_0^l (b_0 b_0^\dagger - b_0^\dagger b_0)\} \sum_j C_j (b_j^\dagger + b_j) \\
& = \sum_j C_j (u_j^l + v_j^l) (b_0^\dagger + b_0) + \sum_j C_j (b_j^\dagger + b_j) (u_0^l + v_0^l) \tag{B.12}
\end{aligned}$$

Para el último término:

$$\begin{aligned}
& \left[ \frac{\lambda}{2} (b_0^\dagger + b_0)^2, \beta_l^\dagger \right] = \frac{\lambda}{2} [(b_0^\dagger + b_0)(b_0^\dagger + b_0), u_0^l b_0^\dagger - v_0^l b_0] \\
& = \frac{\lambda}{2} \{ (b_0^\dagger + b_0) [b_0^\dagger + b_0, u_0^l b_0^\dagger - v_0^l b_0] + [b_0^\dagger + b_0, u_0^l b_0^\dagger - v_0^l b_0] (b_0^\dagger + b_0) \} \\
& = \frac{\lambda}{2} \{ (b_0^\dagger + b_0) (u_0^l + v_0^l) + (u_0^l + v_0^l) (b_0^\dagger + b_0) \} \\
& \left[ \frac{\lambda}{2} (b_0^\dagger + b_0)^2, \beta_l^\dagger \right] = \lambda (u_0^l + v_0^l) (b_0^\dagger + b_0) \tag{B.13}
\end{aligned}$$

Sustituyendo las relaciones (B.11), (B.12), (B.13), en la ecuación de movimiento (B.8):

$$\begin{aligned}
& \sum_j \omega_j (u_j^l b_j^\dagger + v_j^l b_j) + \sum_j C_j (u_j^l + v_j^l) (b_0^\dagger + b_0) + \sum_j C_j (b_j^\dagger + b_j) (u_0^l + v_0^l) \\
& + \lambda (u_0^l + v_0^l) (b_0^\dagger + b_0) = \Omega_l \sum_j (u_j^l b_j^\dagger - v_j^l b_j) \tag{B.14}
\end{aligned}$$

Resultan cuatro ecuaciones correspondientes para los coeficientes de los operadores  $b_0^\dagger, b_0, b_j^\dagger$  y  $b_j$ , las cuales son:

$$\omega_0 u_0^l + \sum_j C_j (u_j^l + v_j^l) + \lambda(u_0^l + v_0^l) = \Omega_l u_0^l \quad (B.15)$$

$$\omega_0 v_0^l + \sum_j C_j (u_j^l + v_j^l) + \lambda(u_0^l + v_0^l) = -\Omega_l v_0^l \quad (B.16)$$

$$\omega_j u_j^l + C_j (u_0^l + v_0^l) = \Omega_l u_j^l \quad (B.17)$$

$$\omega_j u_j^l + C_j (u_0^l + v_0^l) = -\Omega_l v_j^l \quad (B.18)$$

Llamando:

$$Z^l = u_0^l + v_0^l$$

$$C^l = \sum_j C_j (u_j^l + v_j^l)$$

Las ecuaciones anteriores quedan de la forma:

$$\omega_0 u_0^l + C^l + \lambda Z^l = \Omega_l u_0^l \Rightarrow u_0^l = \frac{C^l + \lambda Z^l}{\Omega_l - \omega_0} \quad (B.19)$$

$$\omega_0 v_0^l + C^l + \lambda Z^l = -\Omega_l v_0^l \Rightarrow v_0^l = -\frac{C^l + \lambda Z^l}{\Omega_l + \omega_0} \quad (B.20)$$

$$\omega_j u_j^l + C_j Z^l = \Omega_l u_j^l \Rightarrow u_j^l = \frac{C_j Z^l}{\Omega_l - \omega_j} \quad (B.21)$$

$$\omega_j u_j^l + C_j Z^l = -\Omega_l v_j^l \Rightarrow v_j^l = -\frac{C_j Z^l}{\Omega_l + \omega_j} \quad (B.22)$$

Sumando las ecuaciones (B.19) y (B.20) y las ecuaciones (B.21) y (B.22), se llega a la relación entre  $C^l$  y  $Z^l$ , además de los modos normales de oscilación.

$$Z^l = u_0^l + v_0^l = \frac{C^l + \lambda Z^l}{\Omega_l - \omega_0} - \frac{C^l + \lambda Z^l}{\Omega_l + \omega_0} \Rightarrow Z^l = \frac{2\omega_0(C^l + \lambda Z^l)}{\Omega_l^2 - \omega_0^2} \quad (B.23)$$

$$C^l = u_j^l + v_j^l = \frac{C_j Z^l}{\Omega_l - \omega_j} - \frac{C_j Z^l}{\Omega_l + \omega_j} = \frac{2\omega_j C_j}{\Omega_l^2 - \omega_j^2} Z^l$$

$$\Rightarrow \sum_j C_j (u_j^l + v_j^l) = \sum_j \frac{2\omega_j C_j^2}{\Omega_l^2 - \omega_j^2} Z^l \Rightarrow C^l = \sum_j \frac{2\omega_j C_j^2}{\Omega_l^2 - \omega_j^2} Z^l \quad (B.24)$$

De la ecuación (B.23):

$$Z^l \left( 1 - \frac{2\omega_0 \lambda}{\Omega_l^2 - \omega_0^2} \right) = \frac{2\omega_0 C^l}{\Omega_l^2 - \omega_0^2}$$

Organizando términos y utilizando la ecuación (B.24):

$$1 = \frac{2\omega_0}{\Omega_l^2 - \omega_0^2} \left( \sum_j \frac{2\omega_j C_j^2}{\Omega_l^2 - \omega_j^2} + \lambda \right) \quad (B.25)$$

$$\Rightarrow \Omega_l^2 - \omega_0^2 = 2\omega_0 \left[ \sum_j \frac{2C_j^2}{\omega_j} \left( \frac{\omega_j^2}{\Omega_l^2 - \omega_j^2} \right) + \lambda \right]$$

Llamando:

$$\lambda = \sum_j \frac{2C_j^2}{\omega_j}$$

$$\Omega_l^2 - \omega_0^2 = 2\omega_0 \sum_j \frac{2C_j^2}{\omega_j} \left( \frac{\omega_j^2}{\Omega_l^2 - \omega_j^2} + 1 \right)$$

$$\frac{\Omega_l^2}{\omega_0^2} - 1 = 4 \sum_j \frac{C_j^2}{\omega_0 \omega_j} \left( \frac{\Omega_l^2}{\Omega_l^2 - \omega_j^2} \right)$$

$$\frac{\Omega_l^2}{\omega_0^2} - 4 \sum_j \frac{C_j^2}{\omega_0 \omega_j} \left( \frac{\Omega_l^2}{\Omega_l^2 - \omega_j^2} \right) - 1 = 0 \quad (B.26)$$

Ahora invirtiendo la expresión (B.23), las ecuaciones de los coeficientes (B.19) y (B.20) se pueden escribir de la siguiente manera:

$$u_0^l = \frac{\Omega_l + \omega_0}{2\omega_0} Z^l \quad (B.27)$$

$$v_0^l = -\frac{\Omega_l - \omega_0}{2\omega_0} Z^l \quad (B.28)$$

Para acabar de resolver el conjunto de ecuaciones, se hace uso de la relación de conmutación bosónica:

$$[\beta_l, \beta_l^\dagger] = 1 \quad (B.29)$$

$$\begin{aligned} 1 &= \left[ \sum_{i=0} u_i^l b_i - v_i^l b_i^\dagger, \sum_{j=0} u_j^l b_j^\dagger - v_j^l b_j \right] = \sum_{i,j} [u_i^l b_i - v_i^l b_i^\dagger, u_j^l b_j^\dagger - v_j^l b_j] \\ &= \sum_{i,j} \{u_j^l u_i^l (b_i b_j^\dagger - b_j^\dagger b_i) - v_i^l v_j^l (b_j b_i^\dagger - b_i^\dagger b_j) + v_i^l u_j^l (b_j^\dagger b_i^\dagger - b_i^\dagger b_j^\dagger)\} \\ &= \sum_{i,j} \{u_j^l u_i^l \delta_{ij} - v_i^l v_j^l \delta_{ij} + v_i^l u_j^l (b_j^\dagger b_i^\dagger - b_i^\dagger b_j^\dagger)\} \\ &= \sum_{j=0} \{(u_j^l)^2 - (v_j^l)^2\} \end{aligned} \quad (B.30)$$

La expresión anterior se puede escribir como:

$$1 = (u_0^l)^2 - (v_0^l)^2 + \sum_{j=1} \{(u_j^l)^2 - (v_j^l)^2\}$$

Insertando las ecuaciones (B.27), (B.28), (B.21) y (B.21) en la expresión anterior:

$$\begin{aligned} 1 &= \left( \frac{\Omega_l + \omega_0}{2\omega_0} Z^l \right)^2 - \left( -\frac{\Omega_l - \omega_0}{2\omega_0} Z^l \right)^2 + \sum_{j=1} \left\{ \left( \frac{C_j Z^l}{\Omega_l - \omega_j} \right)^2 - \left( -\frac{C_j Z^l}{\Omega_l + \omega_j} \right)^2 \right\} \\ &= \frac{(Z^l)^2}{4\omega_0} \{(\Omega_l + \omega_0)^2 - (\Omega_l - \omega_0)^2\} + \sum_{j=1} (C_j Z^l)^2 \left\{ \frac{4\Omega_l \omega_j}{[(\Omega_l - \omega_j)(\Omega_l + \omega_j)]^2} \right\} \\ 1 &= (Z^l)^2 \left\{ \frac{\Omega_l}{\omega_0} + \sum_{j=1} \frac{4C_j^2 \Omega_l \omega_j}{(\Omega_l^2 - \omega_j^2)^2} \right\} \end{aligned} \quad (B.31)$$



Y la dependencia en el tiempo de las cuasi partículas  $\beta$ 's es:

$$\beta_l^\dagger(t) = \sum_{j=0} (u_j^l e^{i\Omega_l t} b_j^\dagger - v_j^l e^{i\Omega_l t} b_j) \quad (B.32)$$

$$\beta_l(t) = \sum_{j=0} (u_j^l e^{-i\Omega_l t} b_j - v_j^l e^{-i\Omega_l t} b_j^\dagger) \quad (B.33)$$

Y de los operadores  $b_i$ 's son:

$$b_j^\dagger(t) = \sum_{l=0} (u_j^l e^{-i\Omega_l t} \beta_l^\dagger + v_j^l e^{i\Omega_l t} \beta_l) \quad (B.34)$$

$$b_j(t) = \sum_{l=0} (u_j^l e^{i\Omega_l t} \beta_l + v_j^l e^{-i\Omega_l t} \beta_l^\dagger) \quad (B.35)$$

## B.2 OBTENCIÓN DE LA FUNCIÓN ESPECTRAL EFECTIVA

A continuación se hará la diagonalización del Hamiltoniano:

$$H = \sum_{l=0}^N \Omega_l \beta_l^\dagger \beta_l + \frac{i\zeta\hbar}{L\sqrt{2}} \sigma_x (a_x^\dagger - a_x) + H_{spin} \quad (B.36)$$

Tomando la transformación canónica hecha anteriormente:

$$H = \sum_{l=0}^N \left[ \Omega_l \beta_l^\dagger \beta_l + \frac{i\zeta\hbar}{L\sqrt{2}} \sigma_x (u_0^l - v_0^l) \beta_l^\dagger - \frac{i\zeta\hbar}{L\sqrt{2}} \sigma_x (u_0^l - v_0^l) \beta_l \right] + H_{spin} \quad (B.37)$$

Llamando:

$$r_l = \frac{\zeta}{L\sqrt{2}} (u_0^l - v_0^l) \quad (B.38)$$

$$H = \sum_{l=0}^N \left[ \Omega_l \beta_l^\dagger \beta_l + \hbar r_l \sigma_x (i\beta_l^\dagger - i\beta_l) \right] + H_{spin} \quad (B.39)$$

Realizándose la siguiente transformación:

$$\tilde{\beta}_l^\dagger = i\beta_l^\dagger \quad (B.40)$$

Entonces la ecuación (B.39) se traduce en un Hamiltoniano de espín Boson descrita por la ecuación (4.21).

$$H = \sum_{l=0}^N \Omega_l \tilde{\beta}_l^\dagger \tilde{\beta}_l + \sigma_x \hbar \sum_{l=0}^N r_l (\tilde{\beta}_l^\dagger + \tilde{\beta}_l) + H_{spin} \quad (B.41)$$

El Hamiltoniano anterior tiene una función espectral de la forma descrita por la ecuación (4.42)

## APENDICE C: OSCILADOR ARMÓNICO COMO SISTEMA CENTRAL

Para simplificar la ecuación maestra (4.14) y lograr entendimiento del significado físico de los kernels de ruido y disipación, se examina el caso donde el sistema es representado por un oscilador armónico, cuyo Hamiltoniano es de la manera:

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

La forma explícita del operador de posición en la representación de interacción  $X(\tau)$  es determinada por la solución a las ecuaciones de Heisenberg del movimiento para los operadores  $X$  y  $P$  del sistema:

$$X(\tau) = e^{iH_s\tau} X e^{-iH_s\tau}$$

$$\frac{dX(\tau)}{d\tau} = i[H_s, X] = \frac{P}{M} \quad (C.2)$$

$$\frac{dP(\tau)}{d\tau} = i[H_s, P] = -M\Omega^2 X \quad (C.3)$$

Derivando la ecuación (C.2) respecto a  $\tau$ , se tiene:

$$\frac{d^2X(\tau)}{d\tau^2} = \frac{1}{M} \frac{dP}{d\tau} \Rightarrow \frac{d^2X(\tau)}{d\tau^2} = -\Omega^2 X$$

La solución para esta ecuación es:

$$X(\tau) = C_1 \cos(\Omega\tau) + C_2 \sin(\Omega\tau)$$

Con las condiciones:

$$X(\tau = 0) = X = C_1, \quad y \quad \dot{X}(\tau = 0) = \frac{P}{M} = C_2 \Omega \Rightarrow C_2 = \frac{P}{M\Omega}$$

Finalmente se tiene el operador de posición en la representación de interacción:

$$X(\tau) = X \cos(\Omega\tau) + \frac{P}{M\Omega} \sin(\Omega\tau) \quad (C.4)$$

Insertando esta expresión para  $X(\tau)$  en la ecuación (4.14) produce la ecuación maestra de Born-Markov que describe la dinámica reducida de un oscilador armónico lineal y débilmente acoplado a un medio de osciladores armónicos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_s(t) = & -i[H_s, \rho_s(t)] \\ & - \int_0^\infty \left\{ \nu(\tau) \left[ X, \left[ X \cos(\Omega\tau) - \frac{P}{M\Omega} \sin(\Omega\tau), \rho_s(t) \right] \right] \right. \\ & \left. - i\eta(\tau) \left[ X, \left\{ X \cos(\Omega\tau) - \frac{P}{M\Omega} \sin(\Omega\tau), \rho_s(t) \right\} \right] \right\} d\tau \end{aligned} \quad (C.5)$$

Desarrollando el conmutador interno  $\left[ X \cos(\Omega\tau) - \frac{P}{M\Omega} \sin(\Omega\tau), \rho_s(t) \right]$  y el anti conmutador interno  $\left\{ X \cos(\Omega\tau) - \frac{P}{M\Omega} \sin(\Omega\tau), \rho_s(t) \right\}$  y reagrupando términos (después de un proceso tedioso) se logra:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_s(t) = & -i \left[ H_s + \frac{1}{2} M \tilde{\Omega}^2 X^2, \rho_s(t) \right] - i\gamma [X, \{P, \rho_s(t)\}] - D [X, [X, \rho_s(t)]] \\ & - f [X, [P, \rho_s(t)]] \end{aligned} \quad (C.6)$$

Donde se ha introducido los coeficientes  $\tilde{\Omega}^2, \gamma, D$  y  $f$ , definidos así:

$$\tilde{\Omega}^2 = -\frac{2}{M} \int_0^\infty \eta(\tau) \cos(\Omega\tau) d\tau \quad (C.7)$$

$$\gamma = \frac{1}{M\Omega} \int_0^\infty \eta(\tau) \sin(\Omega\tau) d\tau \quad (C.8)$$

$$D = \int_0^\infty \nu(\tau) \cos(\Omega\tau) d\tau \quad (C.9)$$

$$f = -\frac{1}{M\Omega} \int_0^\infty v(\tau) \sin(\Omega\tau) d\tau \quad (C.10)$$

Cada uno de estos coeficientes tiene una interpretación física, derivada de su papel en la ecuación maestra (C.6).

La interpretación de los diferentes términos de la ecuación maestra (C.6), es:

Primer conmutador:  $-i \left[ H_s + \frac{1}{2} M \tilde{\Omega}^2 X^2, \rho_s(t) \right]$ , describe la dinámica unitaria reversible de un oscilador armónico de frecuencia física  $(\Omega^2 + \tilde{\Omega}^2)^{\frac{1}{2}}$ . Se tiene que  $\tilde{\Omega}^2$  introduce un cambio independiente de la temperatura de la frecuencia natural  $\Omega$  del oscilador central.

El siguiente término:  $-i\gamma[X, \{P, \rho_s(t)\}]$ , describe el momentum amortiguado y por tanto la disipación debida a la interacción con el medio. Para ver esto se considera la evolución temporal del valor esperado  $\langle P \rangle_t$ , para el momentum del oscilador central usando  $\langle P \rangle = \text{tr}_s(\rho_s P)$  se obtiene:

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle_t = \frac{d}{dt} \text{tr}_s \{ \rho_s(t) P \} = \text{tr}_s \left\{ \frac{d}{dt} \rho_s(t) P \right\} = -M(\Omega^2 + \tilde{\Omega}^2) \langle X \rangle_t - 2\gamma \langle P \rangle_t$$

El término  $-M(\Omega^2 + \tilde{\Omega}^2) \langle X \rangle_t$  es debido a la evolución unitaria usual en el potencial del oscilador armónico. Por ahora se ignoran estos términos unitarios no disipativos. Inmediatamente se ve que debido a la interacción con el medio, el valor esperado para el momentum del sistema central decrece exponencialmente a una tasa de  $2\gamma$ .

$$\langle P \rangle_t \propto e^{-2\gamma t} \langle P \rangle_0$$

Realmente se observa que el término  $-i\gamma[X, \{P, \rho_s(t)\}]$  en la ecuación maestra (C.6) describe el momentum amortiguado a una tasa proporcional a  $\gamma$ . Nótese que esta tasa de cambio depende solamente sobre la densidad espectral y no sobre la temperatura del medio.

El tercer término:  $-D[X, [X, \rho_s(t)]]$ , este describe el monitoreo del medio a la coordenada de posición  $X$  del sistema y de esta manera la Decoherencia en la base de posición. Este papel puede verse fácilmente escribiendo el término en la representación de la posición:

$$-D[X, [X, \rho_s(t)]] \rightarrow D(X - X')^2 \rho_s(X, X', t)$$

Este término tiene forma similar a la expresión que describe la localización espacial en el modelo para el esparcimiento del medio, el cual es:

$$\rho_s(X, X', t) = \rho_s(X, X', 0)e^{-\Lambda(X-X')^2 t} \text{ Donde : } \tau(X - X') = \frac{1}{\Lambda(X - X')^2}$$

Entonces el coeficiente  $D$  multiplicado por  $(X - X')^2$ , juega el papel de la rata de Decoherencia esto es:

$$\tau_{|X-X'|} = \frac{1}{D(X - X')^2}$$

Es la escala de tiempo en al cual las interferencias espaciales por encima de una distancia  $|X - X'|$  se suprimen por un factor de  $e$ .

El coeficiente  $D$  también describe difusión en el momentum, lo cual se ve en la evolución temporal del valor esperado del momentum cuadrado del sistema  $\langle P^2 \rangle_t$  :

$$\frac{d}{dt} \langle P^2 \rangle_t = -M(\Omega^2 + \tilde{\Omega}^2) \langle XP + PX \rangle_t - 4\gamma \langle P^2 \rangle_t + 2D$$

Centrándose sobre la dependencia temporal de  $\langle P^2 \rangle_t$  debido al término  $D$  solamente se obtiene la evolución  $\langle P^2 \rangle_t \propto Dt$  , el cual demuestra que en realidad  $D$  describe las difusiones en el espacio de momentum. A menudo  $D$  es referenciado en la literatura sobre el movimiento Browniano como el coeficiente de difusión normal.

El papel de  $D$  como coeficiente de difusión puede también ser visto desde la ecuación maestra (C. 6) en la forma de Wigner. El término para  $D$  en esta representación es:

$$\frac{\partial}{\partial t} W(X, P, t) = D \frac{\partial^2}{\partial P^2} W(X, P, t)$$

Que tiene la forma de una ecuación de difusión en la variable  $P$  para el caso de un coeficiente de difusión constante  $D$ .

El último término  $-f[X, [P, \rho_s(t)]]$ , también describe difusión y Decoherencia, justo como el término de difusión normal. Esto puede verse mejor en la representación de Wigner de la ecuación maestra (C. 6), el término para  $f$  en esta representación es:

$$\frac{\partial}{\partial t} W(X, P, t) = -f \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial}{\partial P} W(X, P, t)$$

Esta forma es similar a la ecuación de difusión normal, en términos de la presencia de una doble derivada, sin embargo en contraste con la ecuación de difusión normal esta doble derivada es compuesta de derivadas simples con respecto a dos variables diferentes ( $X, P$ ), por esta diferencia la cantidad  $f$  es a menudo referenciado como el coeficiente de difusión anómalo en la literatura. En muchas situaciones física de interés la influencia de este término sobre la dinámica reducida del sistema es insignificamente pequeña en comparación con el termino de difusión normal, en tales casos podemos usar una versión simplificada de la ecuación maestra (C. 6), sin el termino de difusión anómalo.

## DECOHERENCIA ÓHMICA Y DISIPACIÓN.

Para evaluar los coeficientes  $\tilde{\Omega}^2, \gamma, D$  y  $f$  que aparecen en la ecuación maestra (C. 6) en el movimiento cuántico Browniano de un oscilador armónico central, se debe elegir una forma funcional específica para la densidad espectral  $J(\omega)$  que aparece en las expresiones para  $\nu(\tau)$  y  $\eta(\tau)$ .

Típicamente se remplace la suma discreta en la expresión original para  $J(\omega)$  con una función continua del medio de frecuencia  $\omega$  (a menudo motivada fenomenológicamente)

Específicamente en el caso de una densidad espectral óhmica  $J(\omega) \propto \omega$ , la cual se puede escribir explícitamente como:

$$J(\omega) = \frac{2M\gamma_0}{\pi} \omega \tag{C.11}$$

Aquí la constante  $\gamma_0$  describe el acoplamiento fuerte efectivo entre el sistema y el medio. En la expresión discreta original para la densidad espectral, esta interacción fuerte es representada por la suma sobre los términos que contienen los acoplamientos individuales

$C_i$  de los osciladores. Se verá que  $\gamma_0$  juega el papel de una frecuencia independiente de amortiguación constante.

Una dependencia en potencias de  $J(\omega)$  implicaría que la distribución de frecuencias del medio crecería sin límite, lo cual es físicamente irrazonable. Típicamente la dependencia lineal de  $J(\omega)$  sobre las frecuencia  $\omega$  solo abarca para pequeños valores de  $\omega$  y se atenúa hacia las altas frecuencias. Por lo tanto se elige una frecuencia de corte alta  $\Lambda$  y se modifica la ecuación (C.11) para incluir un término que amortigüe  $J(\omega)$  para frecuencias  $\omega > \Lambda$ . Una elección común es un término de corte llamada Lorentz-Drude de la forma:

$$J(\omega) = \frac{2M\gamma_0}{\pi} \omega \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \omega^2} \quad (C.12)$$

Esta elección explícita para  $J(\omega)$  permite calcular los coeficientes  $\tilde{\Omega}^2$ ,  $\gamma$ ,  $D$  y  $f$ , los cuales dan:

$$\gamma = \gamma_0 \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \Omega^2} \quad (C.13)$$

$$D = M\gamma_0\Omega \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \Omega^2} \coth\left(\frac{\Omega}{2K_B T}\right) \quad (C.14)$$

Hay una dependencia de  $D$  con respecto a la temperatura este incrementa con la temperatura. La Decoherencia se vuelve más fuerte cuando la temperatura del medio se eleva. Para altas temperaturas  $K_B T \gg \Omega \Rightarrow \coth\left(\frac{\Omega}{2K_B T}\right) \approx \frac{2K_B T}{\Omega}$ , y entonces  $D$  incrementa aproximadamente lineal con la temperatura.

La expresión para la frecuencia de normalización es:

$$\tilde{\Omega}^2 = -2\gamma_0 \frac{\Lambda^3}{\Lambda^2 + \Omega^2} \quad (C.15)$$

Finalmente el coeficiente de difusión anómalo es más difícil de evaluar debido a la presencia del término  $\coth\left(\frac{\omega}{2K_B T}\right)$ , se tiene:



$$f = -\frac{1}{M\Omega} \int_0^\infty \int_0^\infty J(\omega) \coth\left(\frac{\omega}{2K_B T}\right) \cos(\omega\tau) \sin(\Omega\tau) d\omega d\tau \quad (C.16)$$

Si el medio es de alta temperatura tal que  $K_B T \gg \Omega$ , en este limite, la expresión resultante para  $f$  es mucho más pequeña que el coeficiente de difusión normal por un factor sobre el orden de la frecuencia de corte  $\Lambda$ , lo cual se trata a continuación.

## ECUACIÓN DE CALDIRA-LEGGETT

Tomando el límite del medio a alta temperatura. Esto es considerando la situación en la cual la energía térmica del medio  $K_B T$  es mucho mayor que la frecuencia natural del sistema  $\Omega$  y la frecuencia de corte del medio  $\Lambda$ . Entonces se puede aproximar el término  $\coth\left(\frac{\omega}{2K_B T}\right)$  que aparece en la ecuación (C.16) por  $\frac{2K_B T}{\omega}$  que es el término de primer orden en la expansión de Taylor de  $\coth\left(\frac{\omega}{2K_B T}\right)$  alrededor de  $\frac{\omega}{2K_B T} = 0$ . En este caso el coeficiente  $D$  se vuelve:

$$D \xrightarrow{K_B T \gg \Omega} 2M\gamma_0 K_B T \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \omega^2} \quad (C.17)$$

También se asume que  $\Lambda$  es mucho mayor que las frecuencias características  $\Omega$  del sistema, entonces  $D$  toma la forma:

$$D \xrightarrow{\Lambda \gg \Omega} 2M\gamma_0 K_B T \quad (C.18)$$

Además el coeficiente  $\gamma$  toma la forma:

$$\gamma = \gamma_0 \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \Omega^2} \xrightarrow{\Lambda \gg \Omega} \gamma_0 \quad (C.19)$$

Y la frecuencia de normalización será:

$$\tilde{\Omega}^2 = -2\gamma_0 \frac{\Lambda^3}{\Lambda^2 + \Omega^2} \xrightarrow{\Lambda \gg \Omega} -2\gamma_0 \Lambda \quad (C.20)$$

Finalmente dadas las suposiciones consideradas aquí, el coeficiente de difusión anómalo  $f$  puede ser evaluado explícitamente para dar:

$$f \xrightarrow{K_B T \gg \Omega, \Lambda \gg \Omega} \frac{2\gamma_0 K_B T}{\Lambda} \quad (C.21)$$

Comparando la magnitud del término  $f[X, [P, \rho_s(t)]]$  con  $D[X, [X, \rho_s(t)]]$  estas magnitudes son del orden:

$$DX^2 \sim 2M\gamma_0 K_B T X^2$$

$$fXP \sim fXM\Omega X \sim \frac{2\gamma_0 K_B T}{\Lambda} M\Omega X^2 = D \frac{\Omega}{\Lambda} X^2$$

Ya que por suposición  $\Lambda \gg \Omega$ , se puede despreciar el término de difusión anómalo en la ecuación maestra (C. 6) y se tendrá:

$$\frac{d}{dt} \rho_s(t) = -i \left[ H_s + \frac{1}{2} M \tilde{\Omega}^2 X^2, \rho_s(t) \right] - i\gamma [X, \{P, \rho_s(t)\}] - D[X, [X, \rho_s(t)]] \quad (C.22)$$

Insertando los términos para  $\tilde{\Omega}^2$ ,  $\gamma$  y  $D$  en la anterior ecuación se tiene:

$$\frac{d}{dt} \rho_s(t) = -i[H'_s, \rho_s(t)] - i\gamma_0 [X, \{P, \rho_s(t)\}] - 2M\gamma_0 K_B T [X, [X, \rho_s(t)]] \quad (C.23)$$

Donde:

$$H'_s = H_s + \frac{1}{2} M \tilde{\Omega}^2 X^2$$

$$H'_s = \frac{1}{2M} P^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 X^2 + \frac{1}{2} M \tilde{\Omega}^2 X^2 = \frac{1}{2M} P^2 + \frac{1}{2} M [\Omega^2 - 2\gamma_0 \Lambda] X^2$$

El primer conmutador en la ecuación maestra (C. 23) es el término usual de Liouville-Von Neumann con un Hamiltoniano de frecuencia desplazada. El segundo término describe el momento amortiguado (por ejemplo disipación) con una tasa proporcional a  $\gamma_0$ . El tercer término representa la Decoherencia en la base de la posición con el consiguiente impulso de difusión.

La ecuación (C.23) es comúnmente conocida como la ecuación maestra de Caldeira - Leggett, la cual es ampliamente usada en el modelamiento de procesos de Decoherencia y disipación

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Jacak, L., Hawrylak, P. e Wójs, A. Quantum Dots. Springer Ed. (1998).
- [2] Zurek, W. Phys. Rev. D. 26, 1862(1982).
- [3] Zurek, W. Phys. Today. 36(1991).
- [4] Zeh, H. D. Found. Phys. I. 69 (1970).
- [5] Loss, D. e DiVincenzo, D. P. Phys. Rev. A. 57, 120(1998)
- [6] DiVincenzo, D. P. Phys. Rev. A, 51 1015(1995).
- [7] Pavesa L., Dal Negro L., Mazzoleni C., Franzo G. y Priolo F. Optical gain in silicon nanocrystals. *Nature*, 408:440–444 (2000).
- [8] The Strouse Group. University of California Santa Barbara: Chemistry Department. “Thebasics of quantum dots”. <http://www.chem.fsu.edu/~strouse/learning.html>
- [9] Murray, C. B., Norris, D. J. e Bawendi, M. G. J. Am. Chem. Soc. 115, 8706(1993).
- [10] Bowen, J. E., Colvin, V. L. e Alivisatos, A. P. J. Phys. Chem. 98, 4109(1994).
- [11] Scherer, A. e Craighead, H. G. Phys. Rev. Lett. 49, 1284(1986).
- [12] Leonard, D., Krishnamurthy, M, Reaves, C. M., DenBaars, S. P. e Petroff, P. M. Appl. Phys. Lett. 63, 3203(1993)
- [13] Caldeira, A. O. e Leggett, A. J. Phys. Rev. B. 31 1059(1985).Cdcv
- [14] Caldeira, A. O. e Leggett A. J. Physica 121A 587(1983).v
- [15] Caldeira, A. O. Helv. Phys. Acta 61, 611(1988).
- [16] Weiss, U. Quantum Dissipative Systems. World Scient.
- [17] Leggett A. J. et Al. Rev. Mod. Phys. 59, 1(1987).
- [18] Yu, Peter Y. y Cardona, M. Fundamentals of Semiconductors Physics and Materials Properties. Springer, 4rd Ed.(2010)
- [19] Ivchenko, E. L. y Pikus, G.E. Superlattices an Other Heterostrutures. Springer Ed. (1997).
- [20] J. F. Nye. Physical Properties of Crystals (Oxford Univ. Press, Oxford 1969)
- [21] Schosshauer M. Decoherence and the quantum-to-classical transition. Springer Ed (2007).
- [22] Stroschio M.A., Dutta M. Phonons in nanostructures. Cambridge University Press
- [23] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. y Laloe, F. Quantum Mechanis, Vol I y II. Wiley Ed. (1997).