

# Capítulo 4

## Disipación y Decoherencia

Uno de los problemas más sutiles de la física de este siglo es la relación entre el mundo macroscópico descrito por la física clásica y el mundo microscópico regido por la física cuántica. Dentro de las cuestiones relacionadas con la transición cuántico-clásica una de las más inquietantes es la inexistencia de superposiciones coherentes de estados clásicos. Como ejemplo de estas puede citarse la famosa paradoja del gato de Schrödinger, que dentro de una habitación depende del decaimiento de cierto átomo para morir envenenado. Mientras no se realice una observación del gato (que colapsaría su “función de onda”), este permanece en una superposición de los estados vivo y muerto. Si uno extrapola las leyes de la mecánica cuántica hasta el nivel macroscópico, se puede pensar al gato como un *aparato* que mide el decaimiento del átomo. Siendo regidos por las leyes de la cuántica, los estados del gato ya no pueden considerarse locales y deberían mostrar efectos de interferencia cuántica. Los estados cuánticos del sistema pueden escribirse como el producto directo de los estados del átomo y del gato, produciéndose lo que se llama estados correlacionados. La no existencia de efectos de este tipo en el mundo macroscópico ha llevado a los físicos a formular distintos modelos que intentan explicar este fenómeno.

Von Neumann introdujo en [Neu32] su postulado del colapso de la función de onda. Con este introdujo dos evoluciones distintas en la mecánica cuántica: Una, la evolución

unitaria y determinista de la ecuación de Schrödinger, en la cual existen las superposiciones de estados coherentes sin importar la escala de observación; otra el proceso probabilístico e irreversible asociado con la medición, que transforma los estados correlacionados en una mezcla estadística. Esta separación no sólo implica una limitación intrínseca de como tratan los objetos cuánticos a los clásicos, sino que también plantea el problema de dibujar una línea entre el mundo microscópico y el macroscópico.

Aunque varias soluciones han sido planteadas a este problema, recientemente se ha recalcado el rol de la disipación en la desaparición de la coherencia. La decoherencia es producto del acoplamiento irreversible del sistema observado con el reservorio del mundo exterior ([Dek77], [Zur81], [Zur82], [CL83], [Zur91], [HPZ92]). En este proceso, la superposición cuántica es transformada en una mezcla estadística, para la cual toda la información del sistema puede ser descrita en términos clásicos, con lo que nuestra percepción usual del mundo es recuperada. Inclusive para superposiciones de estados macroscópicos la coherencia cuántica decae mucho más rápido que los observables del sistema, con un tiempo de decaimiento dado por el tiempo de disipación dividido por un número adimensional que mide la "separación" entre las partes del sistema. Para el caso de una partícula separada en dos paquetes de onda por una distancia  $d$ , este número que mide la separación es  $\left(\frac{d}{\lambda_B}\right)^2$ , donde  $\lambda_B$  es la longitud de onda de de Broglie para la partícula. Vemos claramente que para partículas muy masivas a temperaturas no muy bajas este número es inmenso y para todo propósito experimental la decoherencia es instantánea.

La idea conceptual para el entendimiento de los procesos de decoherencia es que el ambiente, al acoplarse con el sistema observado, genera correlaciones entre los autoestados del sistema y los autoestados del ambiente. La función de onda total será el producto directo entre la función de onda del sistema y la de el ambiente

$$|\Psi\rangle = |A\rangle \otimes |\psi\rangle = \left(\sum_i a_i |A_i\rangle\right) \otimes \left(\sum_j s_j |S_j\rangle\right). \quad (4.1)$$

La función de onda total del sistema más el ambiente no se puede utilizar para la medición de observables del sistema, es común hablar del estado o matriz densidad reducida del sistema, que implica proyectar el estado total sobre el subespacio de interés sumando sobre los estados no observables (ambiente). Como la evolución temporal de 4.1 tiene los estados correlacionados, tomar la traza sobre el ambiente significa romper la coherencia de los estados iniciales del sistema.

Esta idea que generaliza la presentada en cálculos previos del transporte disipativo es la que se propone utilizar en este capítulo. Se realizó la búsqueda de Hamiltonianos modelo (de tamaño finito) para un ambiente que produzcan decoherencia en un sistema acoplado. Se utilizó para esto el sistema cuántico de dos niveles (sitios) ya discutido. Como siempre, el método fué la diagonalización directa del Hamiltoniano propuesto y la evolución con sus respectivos autovectores y autovalores. La proyección sobre el subespacio del sistema de dos niveles se realizó de la manera en que se detalla más abajo.

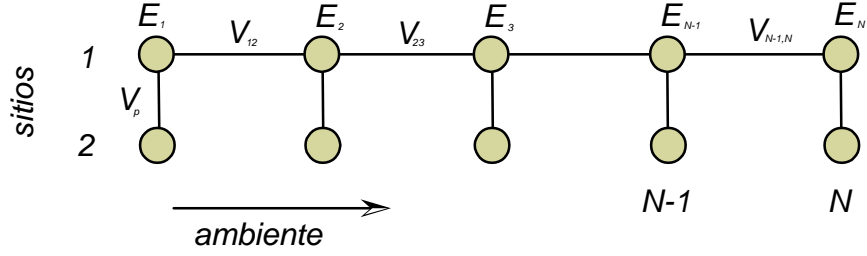
## 4.1 Modelos para el ambiente

El Hamiltoniano general utilizado para el ambiente se puede escribir como

$$H = \sum_{i=1}^N E_{1i} |1, i\rangle \langle 1, i| + E_{2i} |2, i\rangle \langle 2, i| + V_{12} |1, i\rangle \langle 2, i| + V_{1i,1(i+1)} |1, i\rangle \langle 1, i+1| + V_{2i,2(i+1)} |2, i\rangle \langle 2, i+1| + c.c., \quad (4.2)$$

donde el índice 1 y 2 se refieren a los estados del sistema y el índice  $i$  a los estados del ambiente.

Se estudiaron tres modelos de Hamiltoniano para el ambiente. En el primero y el segundo modelo, se supuso que sólo uno de los dos sitios del sistema está acoplado con el ambiente. Esto significa tomar  $V_{2i,2(i+1)} = 0 \forall i$ . A este modelo se lo llamó **modelo de disipación-decoherencia**, y se encuentra representado esquemáticamente en la figura 4-1. Para el primer modelo se tomó  $E_{1i} = E_{2i} = E_0$  y  $V_{1i,1(i+1)} = V \forall i$ .



Figura~4-1: Esquema del modelo para el ambiente llamado de disipación-decoherencia. La partícula se encontrará en el sitio 1 o 2 según la dirección vertical, mientras que el estado del ambiente se indica con la posición de la partícula en el sentido horizontal. Esta es la razón para el nombre del modelo, es posible separar conceptualmente la dirección de la dinámica en la que se da la disipación al ambiente y la decoherencia entre los estados.

El segundo modelo, una variante del modelo de disipación-decoherencia, implicó modificar las energías de los estados del ambiente para representar la presencia de fonones en el sistema (modos de vibración del primer sitio). Así, se tomó  $E_{1i} = E_{2i} = E_0 + \hbar\omega \left(i + \frac{1}{2}\right)$  y  $V_{1i,1(i+1)} = V\sqrt{i+1}$ . Este esquema representa un sistema de una partícula en dos sitios, y sólo en uno de ellos se puede producir la absorción y emisión de fonones.

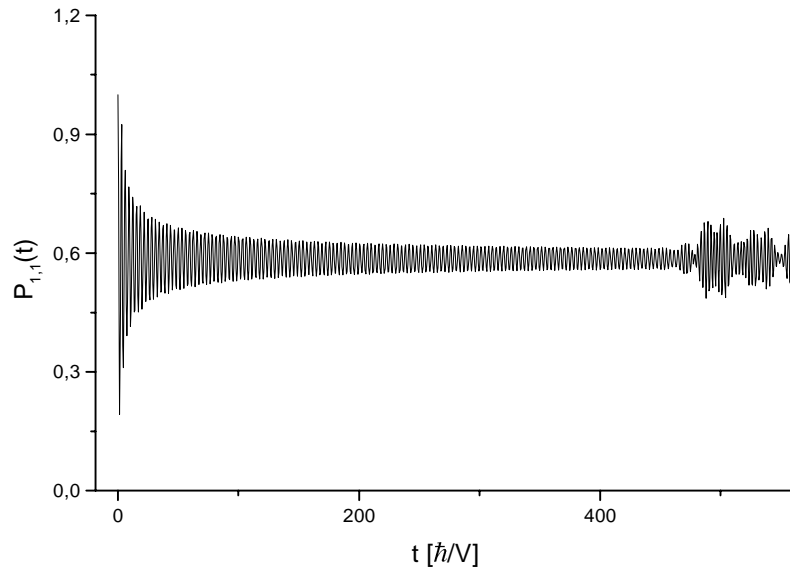
La función estudiada en estos sistemas es la probabilidad de volver a encontrar la partícula en el mismo sitio donde comenzó, sin importar el estado del ambiente. Con esto estamos proyectando la función de onda en el espacio de interés (en este caso el de densidad de carga). La función de autocorrelación del sitio es

$$P_{1,1} = \sum_{i=1}^N P_{1i,1i_0} = \sum_{i=1}^N \left| \langle 1, i | e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} | 1, i_0 \rangle \right|^2 \quad (4.3)$$

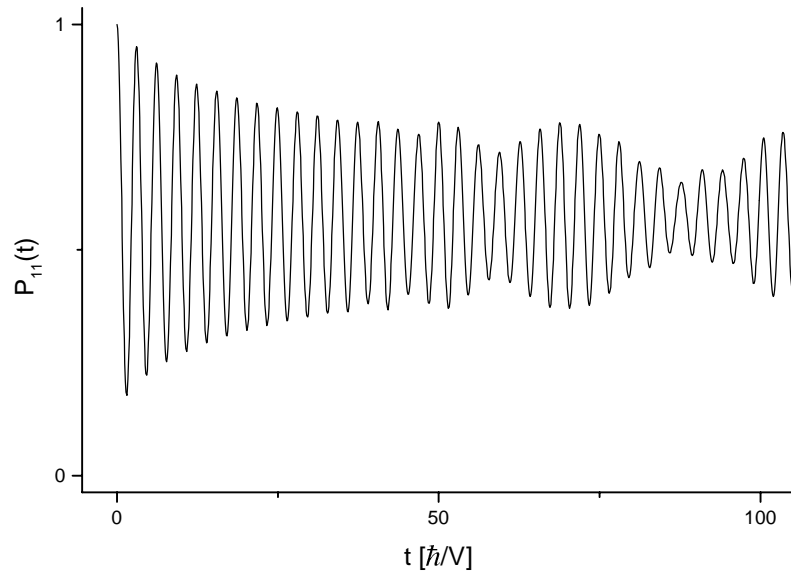
donde  $i_0$  es el estado inicial del ambiente.

Los resultados para los primeros dos modelos se pueden ver en las figuras 4-2 y 4-3. Para ambos modelos se observa decoherencia a una mezcla estadística de los estados de sitio (con probabilidad  $\frac{1}{2}$ ), aunque esta decoherencia no responde a ninguna ley simple. Se observó la existencia de ecos en la función de autocorrelación de sitio.

En el tercer modelo se cambió el esquema de interacción entre los sitios. Se conectó el



Figura~4-2: Función de autocorrelación de sitio para el modelo de disipación-decoherencia sin fonones. Notar que antes del eco mesoscópico el valor asintótico es mayor a 0.5, indicando la presencia de alguna asimetría en el sistema



Figura~4-3: Función de autocorrelación de sitio para el modelo de disipación-decoherencia con fonones. Notar nuevamente que antes del eco el valor asintótico es mayor a 0.5, indicando la presencia de alguna asimetría en el sistema

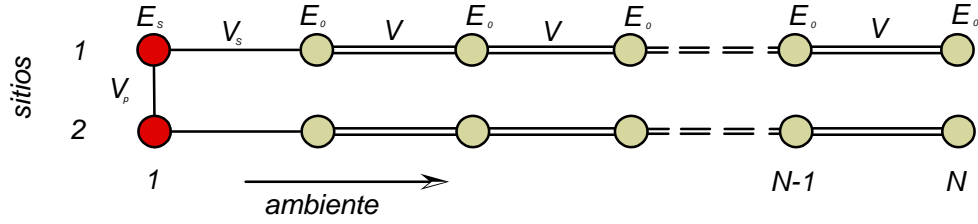
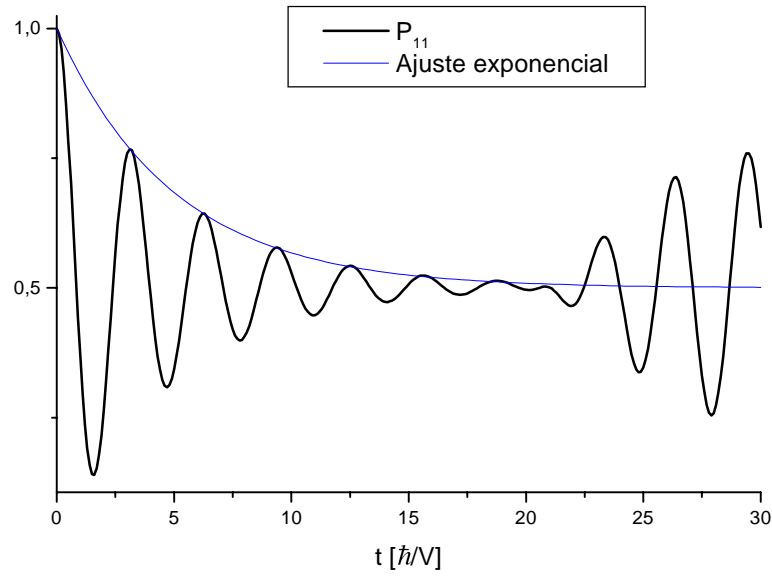


Figura 4-4: Esquema del hamiltoniano utilizado para el ambiente en el modelo de fonón virtual. Los estados de sitio y del ambiente se indican de la misma manera que en la figura anterior.

ambiente de manera tal que cuando un estado de sitio es perturbado, ya no es posible la transición al otro. Esquemáticamente, podemos decir que tomamos dos cadenas como las del capítulo 2 y las unimos en el primer sitio. Podemos ver la representación del sistema en la figura 4-4. Se tomó  $E_{1i} = E_{2i} = E_0 \forall i$ ;  $V_{1i,1(i+1)} = V_{2i,2(i+1)} = V$ ,  $V_{1i,2i} = 0 \forall i \neq 1$ ;  $V_{11,12} = V_{21,22} = V_s$  y  $V_{11,21} = V_p$ .

Este modelo se llamó de **fonón virtual**, el resultado para la función de autocorrelación para el sitio en este modelo es la que se muestra en la figura 4-5. Se puede ver que el efecto de este modelo sobre el sistema es producir decoherencia exponencial.

El modelo de fonón virtual puede ser una representación para el problema del intercambio de carga entre dos centros de reacción fotosintéticos ([MR87], [BBO91], [LPD90]). Si la carga interacciona con el ambiente estas modifican la conformación de camino impidiendo la posterior transferencia entre centros. Se representó el rompimiento de la simetría del sistema mediante las cadenas acopladas a los sitios. En este modelo también se observó un eco mesoscópico al tiempo de Heisenberg del sistema. Este resurgimiento de la excitación permite la conservación de la corriente al realizar un promedio temporal de la misma. Esta es la clave de la reciente propuesta [PM] para modelar la decoherencia en el transporte estacionario en sistemas mesoscópicos.



Figura~4-5: Evolución de la función de autocorrelación de sitio para el modelo 3 con  $N = 200$ ,  $V = 10$ ,  $V_s = V_p = 1$ . El ajuste exponencial es con el tiempo de Fermi calculado para el sistema y el valor asintótico (para largo de la cadena infinito) es  $\frac{1}{2}$ , que es el valor predicho para una mezcla estadística de los estados. Al tiempo de Heisenberg del sistema se observa el eco mesoscópico.



## 4.2 Conductividad

El método estándar para calcular la conductividad a través de una muestra desordenada de tamaño mesoscópico incluyendo choques inelásticos ([B86], [DP90]) consiste esquemáticamente en lo siguiente: se conectan las puntas de una muestra (una cadena unidimensional desordenada) a cadenas infinitas ordenadas, que son los contactos que se hablaba en el capítulo anterior. El parámetro de interacción entre las cadenas y la muestra es el mismo que en el interior de esta. Las autoenergías de las cadenas se hacen cero para que en el caso de desorden nulo los contactos y la muestra se ajusten exactamente. Se asume que en el infinito, los contactos están conectados a sendos reservorios. Estos tienen el potencial químico diferente para provocar un estado de corriente a lo largo de la muestra. La conductividad se puede calcular entonces como se hizo en el capítulo anterior. Para incluir eventos de choques inelásticos en la descripción es necesario agregar nuevos contactos con reservorios en los sitios correspondientes a la muestra. Esta idea comenzó como una representación para los efectos de un voltímetro en una muestra mesoscópica, pero se extendió rápidamente a los choques inelásticos. La interpretación es que un voltímetro, al tener como condición que la corriente a través de él sea cero, debe tomar electrones de la muestra e introducirlos nuevamente pero, al ser un reservorio, de manera incoherente. El sistema se esquematiza en la figura 4-6.

Para el cálculo de las transmitancias, necesarias para el cálculo de la conductividad, ahora hay que incluir el cálculo de los potenciales químicos de cada uno de los reservorios asignados a los contactos conectados a la muestra, de manera que la corriente en ellos sea cero. Esta condición plantea un sistema de ecuaciones cuya resolución implica la inversión de una matriz del tamaño del largo de la muestra. Esto puede convertirse en algo complicado para tamaños no tan grandes.

El problema principal de este método es el tratar de ajustar los parámetros para que se conserve la corriente a lo largo del sistema, debido a la pérdida de evolución unitaria provocada por los reservorios. La idea de [PM], y que se conecta a los resultados vistos en este capítulo, es reemplazar los reservorios y los contactos infinitos en los sitios por cade-

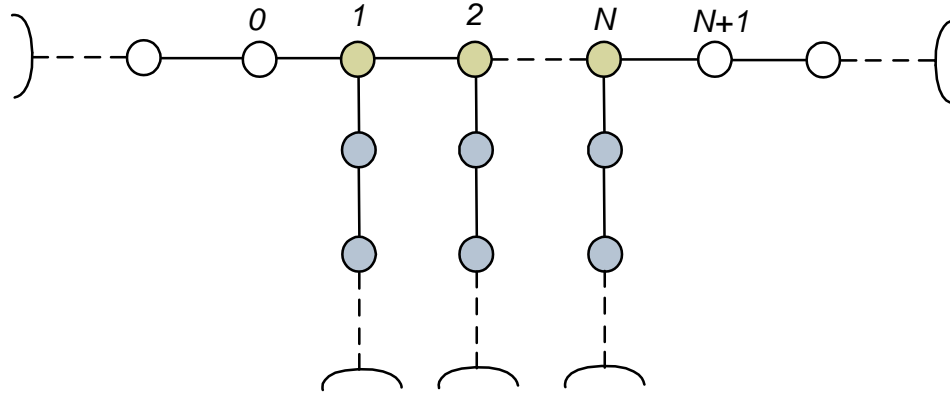


Figura 4-6: Esquema del sistema para el cálculo de la conductividad a través de un sistema desordenado (sitios en color), con dos alambres perfectos conectados a las puntas del sistema (sitios en blanco). Estos alambres están conectados a reservorios con el potencial químico necesario para generar una corriente a lo largo de la muestra. Cada sitio de esta está conectado a otro alambre para representar choques inelásticos (sitios en gris). Todos estos alambres conectan a reservorios con un potencial químico que asegura que la corriente a través de ellos es cero.

nas unidimensionales lo suficientemente largas como para aproximar el comportamiento. Ya vimos que las cadenas conectadas a dos sitios pueden provocar decoherencia, que es exactamente lo que se espera de un reservorio. En este nuevo método no hay potenciales químicos que ajustar, puesto que la evolución en estas cadenas es completamente unitaria.

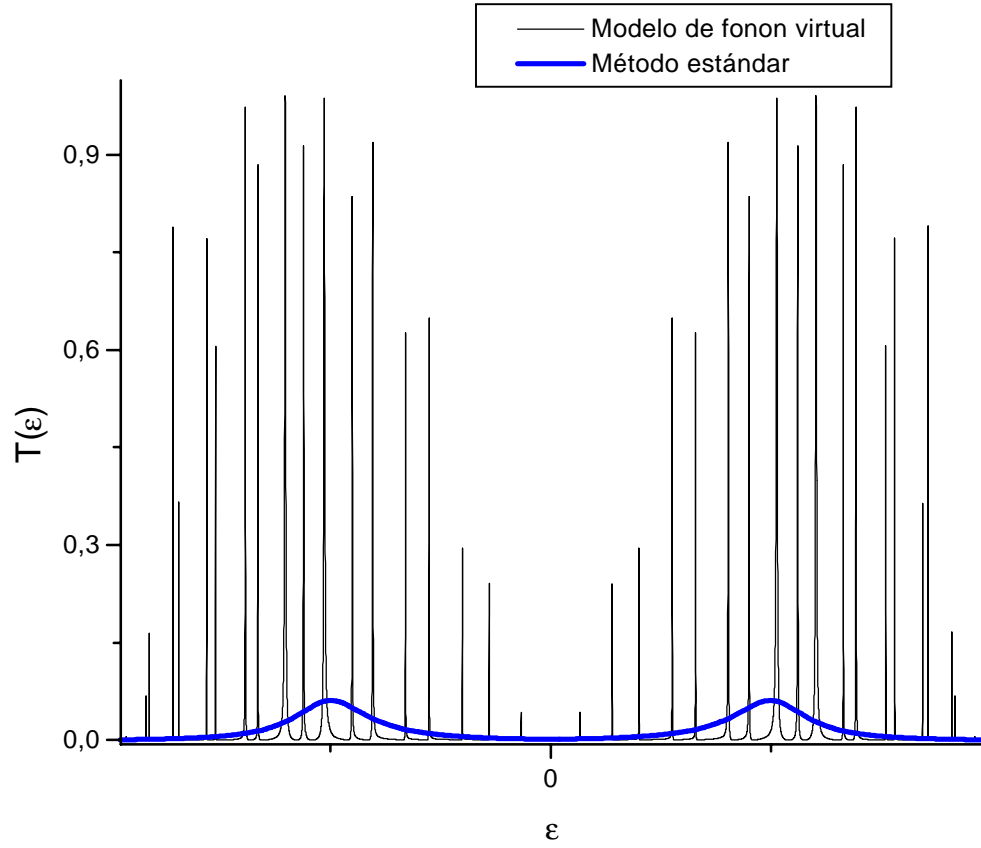
Como no se estudia el comportamiento temporal de la conductividad sino su estado estacionario, no es necesaria una diagonalización del sistema completo, sino sólo el cálculo de la función de Green a través del sistema. Ya vimos en el capítulo anterior como es esto posible. La única modificación es que a los sitios de la muestra debe agregarse ahora una autoenergía efectiva debido a la presencia de la cadena, que se puede calcular mediante el proceso de decimación también explicado con anterioridad. Hay algunas precauciones a tener en cuenta en el cálculo numérico, sin embargo. Por ejemplo, deben tomarse aleatoriamente los largos de las cadenas acopladas para evitar efectos de resonancia entre los sitios que componen la muestra.

En las figuras 4-7 y 4-8 puede verse la comparación de la conductividad calculada en las dos maneras descriptas para el mismo sistema con que se vió la decoherencia, o sea una cadena de dos sitios.

En estos gráficos es notable la diferencia de tomar un acople con el ambiente menor o mayor que el acople con los contactos que producen el transporte. En el primero, la transmitancia calculada mediante el método de fonón virtual agrega una contribución irrelevante al transporte coherente, que se manifiesta en deltas aislados. En el segundo, se pueden observar grandes picos en la transmitancia. Las transiciones virtuales a estados fonónicos permitidos por la incerteza de energía resultan en resonancias que tienen como efecto una conductividad mayor. Esta se puede interpretar como una conductividad térmicamente activada. El presentado aquí es un método de bajo costo numérico para el cálculo de esta conductividad. Para obtener resultados comparables con los experimentos, se debe observar en un rango de energías  $e\mathbb{V}$ , con  $\mathbb{V}$  el voltaje aplicado. La transmitancia total será la integral en ese rango de energías, y si queremos independizarnos de los picos se debe cumplir que

$$e\mathbb{V} > \Delta, \tag{4.4}$$

con  $\Delta$  el espaciamiento en energía de las cadenas acopladas. Esta condición se cumple trivialmente cuando  $\Delta = \hbar\omega_0$ , con  $\omega_0$  frecuencias de fonones acústicos. En el caso opuesto,  $e\mathbb{V} < \hbar\omega_0$  que ocurre para fonones ópticos, las resonancias son justamente el efecto que se puede aprovechar para inducir la emisión estimulada de ultrasonidos (efecto SASER) ([AMPB94], [MAT<sup>+</sup>96])



Figura~4-7: Transmitancia para el sistema de fonon virtual con dos sitios, donde  $V_s = 0.44V$ ,  $V_t = 0.12V$ , y el largo de las cadenas se tomó igual a 20. La integral de la transmitancia para todo el rango de energía es la misma para los dos métodos. Los grandes picos en el modelo de fonón virtual se deben a las resonancias de las cadenas.

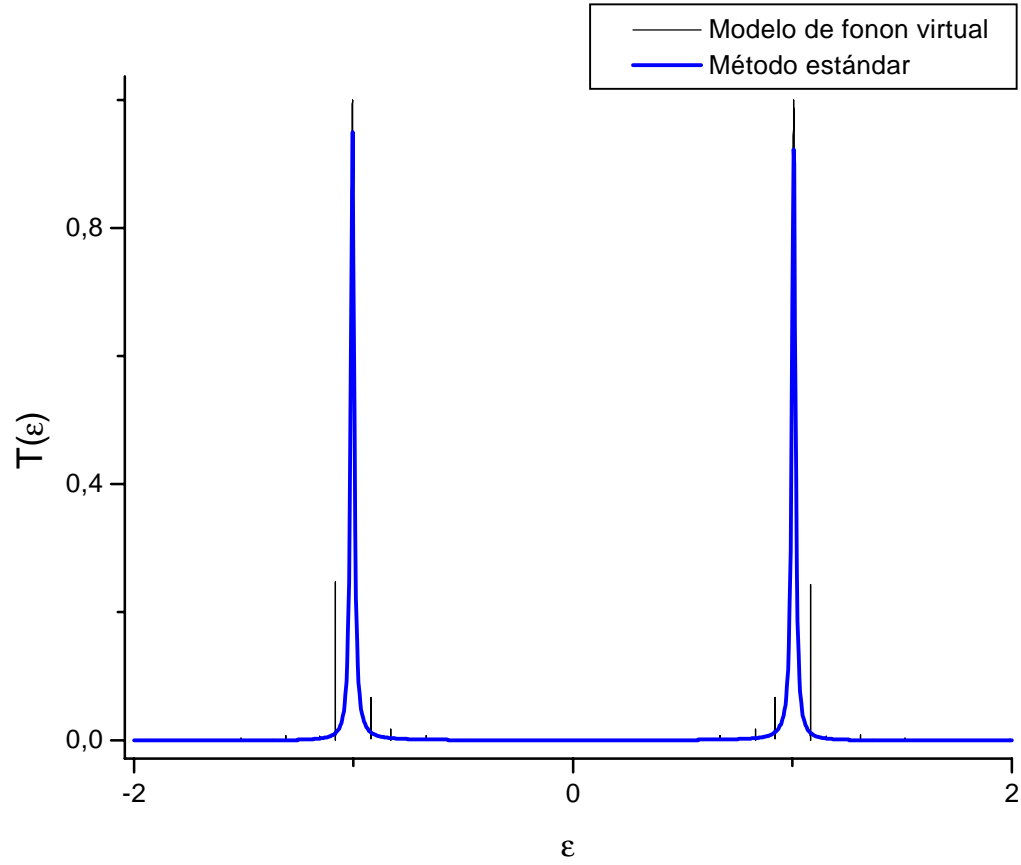


Figura 4-8: Transmitancia para el sistema de fonon virtual con dos sitios, donde  $V_s = 0.02V$ ,  $V_t = 0.1V$ , y el largo de las cadenas se tomó igual a 20. La integral de la transmitancia para todo el rango de energía es la misma para los dos métodos. En este gráfico se asume un contacto con el ambiente débil, por lo que las resonancias de las cadenas tienen apenas una pequeña influencia.