UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Ecuaciones tipo Lindblad y su obtención mediante modelos microscópicos

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Autora: Sara Díaz Real

Tutor: Jesús Casado Pascual

Doble grado en Física y Matemáticas

junio de 2020

RESUMEN

El objetivo principal de este trabajo es el estudio de las ecuaciones tipo Lindblad. Estas ecuaciones resultan de gran utilidad a la hora de describir la evolución temporal de los sistemas cuánticos abiertos. En este trabajo se modelará el sistema cuántico abierto como un super-sistema cuántico cerrado formado por el subsistema en cuestión y un baño cuántico.

Para llevar a cabo el estudio de las ecuaciones tipo Lindblad, comenzaremos realizando la derivación de las mismas imponiendo que se conserven las propiedades del operador densidad reducido en todo instante de tiempo. Posteriormente, se desarrollará la obtención de estas mismas ecuaciones mediante un modelo microscópico para el caso en el que el hamiltoniano del subsistema es independiente del tiempo.

ABSTRACT

The main aim of this work is to study the Lindblad equations. These equations are extremely useful to describe the temporal evolution of open quantum systems. In this work we will consider the open quantum system as a subsystem of a larger system formed by the system in question and a quantum bath.

In order to study the Lindblad equations, we will start doing their derivation imposing that the reduced density operator of the subsystem verifies the properties of a density operator in every instant of time. Later, we will obtain these equations by a microscopic model in which the Hamiltonian of the subsystem is time independent.

Índice general

Prólogo

En sistemas cuánticos cerrados la ecuación de evolución temporal del correspondiente operador densidad se modeliza a través de la *ecuación de Liouville-von Neumann*. Sin embargo, en la realidad no existen sistemas cuánticos cerrados que no tengan ningún tipo de interacción con el medio.

En este trabajo llevaremos a cabo la deducción de un tipo de ecuaciones denominadas *ecuaciones de Lindblad* que son muy útiles para describir la evolución temporal de sistemas cuánticos abiertos. Con el objetivo de llevar a cabo dicha deducción, estudiaremos la evolución temporal de un sistema cuántico abierto bajo la influencia del baño de osciladores armónicos cuánticos. Este problema será modelado como un sistema cuántico cerrado formado por dos subsistemas: el sistema de estudio y el baño, donde este último poseerá infinitos grados de libertad y ambos sistemas interactuarán entre sí. Las ecuaciones tipo Lindblad serán las que regirán la dinámica temporal del operador densidad del sistema en cuestión (operador densidad reducido), bajo unas determinadas hipótesis.

El trabajo constará de tres capítulos; el primero de ellos se centrará en la presentación de diversos conceptos y herramientas necesarios a lo largo del trabajo. Asimismo, se describirá de manera explícita la situación de estudio y algunas de las hipótesis que se tendrán en consideración durante este trabajo.

El segundo capítulo del trabajo también tendrá un carácter fundamentalmente teórico; en éste se deducirán las ecuaciones de evolución temporal que conservan las propiedades de un operador densidad. Estas ecuaciones serán las conocidas como *ecuaciones tipo Lindblad*. Este apartado se hará generalizando el estudio realizado en el artículo [4], suponiendo una dependencia temporal arbitraria.

En el tercer capítulo de este trabajo se obtendrá de manera explícita la ecuación tipo Lindblad a partir de modelos microscópicos para el caso en el que los hamiltonianos del sistema y del baño son independientes del tiempo. En este caso se hará uso de la *teoría de proyectores* y también del *límite de acoplo débil*, técnicas usadas en el capítulo 5 de [5].

Para finalizar, agradecer a mi tutor, Jesús Casado Pascual, por su entrega y dedicación en este trabajo. Asimismo, agradecer a todas las personas que han estado en este camino: mis padres, mi hermano, amigos... Gracias por el apoyo y la confianza depositada en mí, todo ésto también es gracias a vosotros.

Capítulo 1

Introducción

Este primer capítulo del trabajo se centrará en la presentación de diversos conceptos y herramientas, cuya compresión será necesaria para el correcto desarrollo del trabajo. Asimismo, se describirá de manera explícita la situación de estudio y algunas de las hipótesis que se tendrán en consideración durante este trabajo.

Dos aspectos muy importantes a destacar sobre el desarrollo del trabajo son:

- Por un lado, como consecuencia de modelizar el sistema cuántico abierto como un super-sistema formado por dos subsistemas separados (sistema+baño), se tiene, por uno de los axiomas de la Mecánica Cuántica, que el espacio de Hilbert correspondiente al espacio total es separable, es decir, se podrá escribir como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B, \tag{1.1}$$

  con $\mathcal{H}_S$ el espacio de Hilbert correspondiente al sistema de interés y $\mathcal{H}_B$ el del baño.

- Por otro lado, durante el desarrollo del trabajo nos hemos limitado, a menos que se indique de manera explícita lo contrario (como se hará en un determinado caso del tercer capítulo), al estudio de espacios de Hilbert de dimensión finita. Esto supondrá que las matrices que representan los distintos operadores con las que trabajaremos sean de dimensión finita.

1.1. Dinámica cuántica

Comenzaremos introduciendo algunas nociones generales sobre la evolución temporal del sistema, obtenidas de [1]. En primer lugar, como queremos estudiar la evolución temporal de dicho sistema, comenzaremos planteándonos cómo cambia su estado correspondiente con el paso del tiempo. Para ello, supondremos conocido el estado en un instante de tiempo determinado t_0, $|\psi(t_0)\rangle$, y haciendo uso de un axioma de la Mecánica Cuántica, sabemos que existe un operador lineal que nos relaciona el estado en dos instantes de tiempo,

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)\, |\psi(t_0)\rangle \qquad \forall t, t_0 \in \mathbb{R}, \tag{1.2}$$

donde $\hat{U}(t, t_0)$ es conocido como el operador de evolución temporal. A partir de la ecuación (1.2) se puede observar que para el caso en el que $t = t_0$, se tiene que $|\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t_0, t_0)\, |\psi(t_0)\rangle$ y ésto se verifica para cualquier estado $|\psi(t_0)\rangle$. De forma que tenemos un operador que al aplicarlo sobre cualquier estado nos devuelve ese mismo estado, por tanto, $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}\ \forall t_0$, siendo $\hat{I}$ el operador identidad.

En esta parte del trabajo, se partirá del axioma ya explicitado y se deducirá la *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*. Para llevar a cabo tal deducción, comenzaremos estudiando algunas propiedades importantes y que resultarán de gran utilidad sobre el operador de evolución temporal.

Proposición 1.1.1. *El operador de evolución, $\hat{U}(t, t_0)$, es unitario.*

Demostración. Probar que el operador de evolución es unitario consiste en demostrar que $\hat{U}\,(t, t_0)\, \hat{U}^\dagger\,(t, t_0) = \hat{I}$ y $\hat{U}^\dagger\,(t, t_0)\, \hat{U}\,(t, t_0) = \hat{I}\ \forall t, t_0 \in \mathbb{R}$.

Previo a llevar a cabo tal demostración per se, vamos a estudiar un resultado auxiliar. Sabemos que si $\forall\, |\psi_0\rangle\,, |\phi_0\rangle$ se cumple que

$$\left\langle \psi_0 \middle| \hat{A} \middle| \phi_0 \right\rangle = \left\langle \psi_0 \middle| \hat{B} \middle| \phi_0 \right\rangle, \tag{1.3}$$

entonces se tiene que $\hat{A} = \hat{B}$, donde los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son hermíticos. Vamos a comprobar que la condición (1.3) es equivalente a que $\forall\, |\psi_0\rangle$ se tenga que

$$\left\langle \psi_0 \middle| \hat{A} \middle| \psi_0 \right\rangle = \left\langle \psi_0 \middle| \hat{B} \middle| \psi_0 \right\rangle. \tag{1.4}$$

(1.3) $\Longrightarrow$ (1.4) Se tiene de manera inmediata tomando $|\psi_0\rangle = |\phi_0\rangle$.

(1.4) $\implies$ (1.3)

Para ver esto, sean $|\psi_0\rangle$ y $|\phi_0\rangle$ dos estados arbitrarios y consideremos la combinación lineal siguiente:

$$|a_\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_0\rangle + \alpha\,|\phi_0\rangle\right), \tag{1.5}$$

donde tenemos que el estado así definido está normalizado a la unidad pues estamos considerando $\alpha \in \mathbb{C}$ de módulo unidad.

Partiremos del primer término de la expresión (1.4), considerando como combinación lineal que ha sido detallada en (1.5), entonces se tiene que

$$\begin{aligned}\left\langle a_\alpha\middle|\hat{A}\middle|a_\alpha\right\rangle &= \frac{1}{2}\left\langle\psi_0\middle|\hat{A}\middle|\psi_0\right\rangle + \frac{\alpha\alpha^*}{2}\left\langle\phi_0\middle|\hat{A}\middle|\phi_0\right\rangle + \frac{\alpha}{2}\left\langle\psi_0\middle|\hat{A}\middle|\phi_0\right\rangle + \frac{\alpha^*}{2}\left\langle\phi_0\middle|\hat{A}\middle|\psi_0\right\rangle \\ &\overset{(*)}{=} \frac{1}{2}\left\langle\psi_0\middle|\hat{B}\middle|\psi_0\right\rangle + \frac{\alpha\alpha^*}{2}\left\langle\phi_0\middle|\hat{B}\middle|\phi_0\right\rangle + \frac{\alpha}{2}\left\langle\psi_0\middle|\hat{A}\middle|\phi_0\right\rangle + \frac{\alpha^*}{2}\left\langle\phi_0\middle|\hat{A}\middle|\psi_0\right\rangle,\end{aligned} \tag{1.6}$$

donde en $(*)$ se ha hecho uso de la hipótesis (1.4). Además, desarrollando el segundo término de la igualdad (1.4) con el mismo estado, $|a_\alpha\rangle$, se llega a que

$$\left\langle a_\alpha\middle|\hat{B}\middle|a_\alpha\right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle\psi_0\middle|\hat{B}\middle|\psi_0\right\rangle + \frac{\alpha\alpha^*}{2}\left\langle\phi_0\middle|\hat{B}\middle|\phi_0\right\rangle + \frac{\alpha}{2}\left\langle\psi_0\middle|\hat{B}\middle|\phi_0\right\rangle + \frac{\alpha^*}{2}\left\langle\phi_0\middle|\hat{B}\middle|\psi_0\right\rangle. \tag{1.7}$$

De esta forma, haciendo uso de la hipótesis inicial, igualando las ecuaciones (1.6) y (1.7) se obtiene

$$\alpha\left\langle\psi_0\middle|\hat{A}\middle|\phi_0\right\rangle + \alpha^*\left\langle\phi_0\middle|\hat{A}\middle|\psi_0\right\rangle = \alpha\left\langle\psi_0\middle|\hat{B}\middle|\phi_0\right\rangle + \alpha^*\left\langle\phi_0\middle|\hat{B}\middle|\psi_0\right\rangle. \tag{1.8}$$

A continuación, como los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son hermíticos, sabemos que se verifica que

$$\alpha\left\langle\psi_0\middle|\hat{A}\middle|\phi_0\right\rangle + \overline{\alpha\left\langle\phi_0\middle|\hat{A}\middle|\psi_0\right\rangle} = \alpha\left\langle\psi_0\middle|\hat{B}\middle|\phi_0\right\rangle + \overline{\alpha\left\langle\phi_0\middle|\hat{B}\middle|\psi_0\right\rangle}. \tag{1.9}$$

Como tenemos que la suma de un número más su conjugado es dos veces a parte real, se tiene que

$$\mathrm{Re}\left[\alpha\left\langle\psi_0\middle|\hat{A}\middle|\phi_0\right\rangle\right] = \mathrm{Re}\left[\alpha\left\langle\psi_0\middle|\hat{B}\middle|\phi_0\right\rangle\right]. \tag{1.10}$$

Ahora bien, como esto se verifica para cualquier valor de α, en concreto estamos considerando α de módulo unidad, tomando $\alpha = 1$ y $\alpha = -i$ se llega a que

$$\alpha = 1 \implies \mathrm{Re}\left[\left\langle\psi_0\middle|\hat{A}\middle|\phi_0\right\rangle\right] = \mathrm{Re}\left[\left\langle\psi_0\middle|\hat{B}\middle|\phi_0\right\rangle\right] \quad \text{y} \tag{1.11}$$

$$\alpha = -i \implies \mathrm{Im}\left[\left\langle\psi_0\middle|\hat{A}\middle|\phi_0\right\rangle\right] = \mathrm{Im}\left[\left\langle\psi_0\middle|\hat{B}\middle|\phi_0\right\rangle\right]. \tag{1.12}$$

Y por tanto, ya se tendría el resultado deseado.

Una vez ya se ha probado este resultado auxiliar, procederemos a probar la unitariedad del operador de evolución. Sabemos que todo estado conserva la norma y considerando un estado normalizado se tiene que

$$\langle \psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = 1 \quad \forall t, t_0 \in \mathbb{R}. \tag{1.13}$$

Haciendo uso de la ecuación (1.2) y su conjugada, donde esta última viene dada por

$$\langle \psi(t)| = \langle \psi(t_0)|\, \hat{U}^\dagger(t, t_0), \tag{1.14}$$

se tiene entonces, como consecuencia de (1.13), que

$$\left\langle \psi(t_0) \middle| \hat{I} \middle| \psi(t_0) \right\rangle = \left\langle \psi(t_0) \middle| \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) \middle| \psi(t_0) \right\rangle. \tag{1.15}$$

Por el resultado auxiliar que hemos probado al principio de la demostración podemos afirmar que: $\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) = \hat{I}\ \forall t, t_0 \in \mathbb{R}$. Destacar que esto es cierto, puesto que trivialmente el operador identidad es hermítico y también $\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)$ lo es pues $\left[\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)\right]^\dagger = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\left[\hat{U}^\dagger(t,t_0)\right]^\dagger = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)$.

Para demostrar que el operador de evolución es unitario, nos faltaría probar también que este operador verifica que: $\hat{U}(t,t_0)\hat{U}^\dagger(t,t_0) = \hat{I}$. Para ello, tengamos en cuenta que como estamos trabajando en dimensión finita, se cumple que

$$\det\left(\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)\right) = \det\left(\hat{U}^\dagger(t,t_0)\right)\det\left(\hat{U}(t,t_0)\right) = \det\left(\hat{I}\right) = 1. \tag{1.16}$$

Como se tiene que $\det\left(\hat{U}(t,t_0)\right) \neq 0$, se puede afirmar que existe $\hat{U}^{-1}(t,t_0)$ tal que

$$\hat{U}^{-1}(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t,t_0)\hat{U}^{-1}(t,t_0) = \hat{I}. \tag{1.17}$$

Por tanto, se puede concluir que

$$\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)\hat{U}^{-1}(t,t_0) = \hat{U}^{-1}(t,t_0) \implies \hat{U}^\dagger(t,t_0) = \hat{U}^{-1}(t,t_0). \tag{1.18}$$

Utilizando esto y volviendo a (1.17) llegamos a que $\hat{U}(t,t_0)$ es unitario. □

Consecuencias.- El hecho de que el operador de evolución sea unitario supone que es un operador normal y esto hace que se verifique el *Teorema espectral* y esto último supone que:

- Sus autofunciones forman una base ortonormal.
- La matriz que representa al operador es diagonalizable.

Además, se puede ver que los autovalores correspondientes al operador de evolución son de módulo unidad. Consideremos la base de autofunciones de dicho operador, $\{|\phi_j\rangle\}$, por ser ortonormal se tiene que

$$\langle\phi_j|\phi_i\rangle = \delta_{ij} \ \forall i, j. \tag{1.19}$$

Como por ser un operador unitario se verifica que $\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{I}$, podemos escribir la igualdad anterior como

$$\left\langle\phi_j\middle|\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0)\middle|\phi_i\right\rangle = \delta_{ij} \ \forall i, j. \tag{1.20}$$

Entonces, como $\{|\phi_j\rangle\}$ son las autofunciones del operador de evolución se verifica que

$$\lambda_j^*\lambda_i \langle\phi_j|\phi_i\rangle = \delta_{ij} \implies |\lambda_j|^2 = 1, \tag{1.21}$$

donde hemos denotado como λ_i al autovalor asociado a la autofunción $|\phi_i\rangle$.

A continuación, veamos otra propiedad de gran interés del operador de evolución temporal:

Proposición 1.1.2. *El operador de evolución temporal verifica la siguiente regla de composición:*

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) \qquad \forall t_0, t_1, t_2 \in \mathbb{R} \ . \tag{1.22}$$

Demostración. La demostración es inmediata a partir de (1.2). Por un lado, consideremos dicha ecuación para dos instantes de tiempo arbitrarios t_2 y t_0,

$$|\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_0) |\psi(t_0)\rangle \, . \tag{1.23}$$

Por otro lado, consideremos un instante de tiempo intermedio t_1, obteniendo así que

$$|\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1) |\psi(t_1)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) |\psi(t_0)\rangle \, . \tag{1.24}$$

Finalmente, igualando las expresiones (1.23) y (1.24) ya se tiene (1.22). □

Prosigamos estudiando el problema que satisface el operador de evolución. En primer lugar, como ya se demostró anteriormente, tenemos que el operador de evolución es unitario; esto supone que $\forall t, t' \in \mathbb{R}$ se verifica que

$$\hat{U}^{\dagger}\left(t', t\right) \hat{U}\left(t', t\right) = \hat{I}. \tag{1.25}$$

Sin más que derivar parcialmente esta ecuación respecto del tiempo t' se obtiene que

$$\frac{\partial \hat{U}^{\dagger}\left(t', t\right)}{\partial t'} \hat{U}\left(t', t\right) + \hat{U}^{\dagger}\left(t', t\right) \frac{\partial \hat{U}\left(t', t\right)}{\partial t'} = \hat{0} \quad \forall t, t' \in \mathbb{R}, \tag{1.26}$$

donde $\hat{0}$ se corresponde con el operador nulo. Como la expresión (1.26) se verifica para todos los valores de t y t', en concreto lo hará para $t' \to t$ y por tanto,

$$\lim_{t' \to t} \left[\frac{\partial \hat{U}^{\dagger}\left(t', t\right)}{\partial t'} \hat{U}\left(t', t\right) \right] + \lim_{t' \to t} \left[\hat{U}^{\dagger}\left(t', t\right) \frac{\partial \hat{U}\left(t', t\right)}{\partial t'} \right] = \hat{0}. \tag{1.27}$$

Suponiendo que existen los límites, el límite del producto de dos términos será el producto de los límites correspondientes y además se tiene que $\lim\limits_{t' \to t} \hat{U}\left(t', t\right) = \hat{I}$, entonces se llega a que

$$\lim_{t' \to t} \frac{\partial \hat{U}^{\dagger}\left(t', t\right)}{\partial t'} = - \lim_{t' \to t} \frac{\partial \hat{U}\left(t', t\right)}{\partial t'}. \tag{1.28}$$

Observemos que por la propia definición de operador autoadjunto se cumple que

$$\lim_{t' \to t} \frac{\partial \hat{U}^{\dagger}\left(t', t\right)}{\partial t'} = \left[\lim_{t' \to t} \frac{\partial \hat{U}\left(t', t\right)}{\partial t'} \right]^{\dagger}. \tag{1.29}$$

De manera que combinando las expresiones (1.28) y (1.29) se tiene de forma inmediata que

$$\left[\lim_{t' \to t} \frac{\partial \hat{U}\left(t', t\right)}{\partial t'} \right]^{\dagger} = - \lim_{t' \to t} \frac{\partial \hat{U}\left(t', t\right)}{\partial t'}. \tag{1.30}$$

Finalmente, se ha obtenido que el operador $\lim\limits_{t' \to t} \frac{\partial \hat{U}(t', t)}{\partial t'}$ es antihermítico; por tanto, sin más que multiplicar dicho operador por la unidad imaginaria obtendríamos que el operador $i \lim\limits_{t' \to t} \frac{\partial \hat{U}(t', t)}{\partial t'}$ es hermítico.

Ahora bien, por otro lado, considerando la propiedad descrita en la proposición 1.1.2, podemos escribir

$$\hat{U}\left(t', t_0\right) = \hat{U}\left(t', t\right) \hat{U}\left(t, t_0\right) \quad \forall t, t', t_0 \in \mathbb{R}. \tag{1.31}$$

Derivando esta expresión respecto del tiempo t' y posteriormente multiplicando por la unidad imaginaria y la constante $\hbar$, se tiene que

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}\left(t', t_0\right)}{\partial t'} = i\hbar \frac{\partial \hat{U}\left(t', t\right)}{\partial t'} \hat{U}\left(t, t_0\right) \quad \forall t, t', t_0 \in \mathbb{R}. \tag{1.32}$$

Como esta expresión se vuelve a verificar para cualesquiera sean t, t' y t_0, en concreto consideraremos de nuevo $t' \to t$, obteniendo:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hbar \lim_{t' \to t} \left[i \frac{\partial \hat{U}(t', t)}{\partial t'} \right] \hat{U}(t, t_0). \tag{1.33}$$

Por tanto, definiendo ahora el operador hamiltoniano como

$$\hat{H}(t) = i\hbar \lim_{t' \to t} \frac{\partial \hat{U}(t', t)}{\partial t'}, \tag{1.34}$$

donde $\hat{H}(t)$ es un operador hermítico como consecuencia de lo visto anteriormente; se concluye que el problema que satisface el operador de evolución es:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t,t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0) \\ \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}. \end{cases} \tag{1.35}$$

Asimismo, sin más que multiplicar a ambos lados de la ecuación por $|\psi(t_0)\rangle$ y aplicando la expresión (1.2), llegamos a la *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*:

$$i\hbar \frac{d\,|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t)\,|\psi(t)\rangle. \tag{1.36}$$

NOTA.- Por simplicidad en los casos en los que se considere $t_0 = 0$, escribiremos el operador de evolución como: $\hat{U}(t, 0) \equiv \hat{U}(t)\ \forall t \in \mathbb{R}$.

1.1.1. Operador densidad

Hasta el momento se ha desarrollado la teoría que describe la evolución temporal de un estado; para analizar sistemas cuánticos abiertos es conveniente introducir el concepto de operador densidad. Introduciremos dicho concepto con ayuda de [7].

Comencemos considerando nuestro super-sistema aislado formado por los dos subsistemas y supongamos que el estado que caracteriza al super-sistema es un estado puro.

Si denotamos $\{|\phi_j\rangle\}$ como la base correspondiente al espacio $\mathcal{H}_S$ y $\{|\psi_k\rangle\}$ la de $\mathcal{H}_B$, se tiene que una base del espacio de Hilbert total se puede escribir como el producto directo de las dos anteriores: $\{|\phi_j\rangle \otimes |\psi_k\rangle\}$. De esta forma, el estado del super-sistema, que denotaremos como $|\xi(t)\rangle$ y que supondremos normalizado, puede ser descrito como la siguiente combinación lineal:

$$|\xi(t)\rangle = \sum_j \sum_k C_{jk}(t)\,|\phi_j\rangle \otimes |\psi_k\rangle, \tag{1.37}$$

donde los coeficientes $C_{jk}(t)$ son a priori desconocidos.

Ahora bien, consideremos un operador arbitrario, $\hat{A} \in L_{\mathcal{H}}$, el cual sólo involucre al subsistema S, es decir, $\hat{A} = \hat{A}_S \otimes \hat{I}_B$. Estudiando el valor esperado de este operador se tiene que

$$\left\langle \xi(t) \middle| \hat{A} \middle| \xi(t) \right\rangle = \sum_j \sum_k \sum_{j'} \sum_{k'} C^*_{j'k'}(t) C_{jk}(t) \left\langle \phi_{j'} \right| \otimes \left\langle \psi_{k'} \middle| \hat{A}_S \otimes \hat{I}_B \middle| \phi_j \right\rangle \otimes \left| \psi_k \right\rangle . \tag{1.38}$$

Estudiando por separado el producto directo de la expresión anterior, podemos simplificarlo un poco

$$\begin{aligned} \left\langle \phi_{j'} \right| \otimes \left\langle \psi_{k'} \middle| \hat{A}_S \otimes \hat{I}_B \middle| \phi_j \right\rangle \otimes \left| \psi_k \right\rangle &\overset{(*)}{=} \left\langle \phi_{j'} \middle| \hat{A}_S \middle| \phi_j \right\rangle \otimes \left\langle \psi_{k'} \middle| \hat{I}_B \middle| \psi_k \right\rangle \\ &= \left\langle \phi_{j'} \middle| \hat{A}_S \middle| \phi_j \right\rangle \delta_{k,k'} , \end{aligned} \tag{1.39}$$

donde en $(*)$ se ha hecho uso de el operador $\hat{A}$ actúa separadamente sobre cada espacio y por tanto sobre cada base.

De manera que introduciendo la expresión (1.39) en (1.38) nos quedaría que el valor esperado del operador $\hat{A}$ vendría dado por

$$\begin{aligned} \left\langle \xi(t) \middle| \hat{A} \middle| \xi(t) \right\rangle &= \sum_j \sum_k \sum_{j'} \sum_{k'} C^*_{j'k'}(t) C_{jk}(t) \delta_{k,k'} \left\langle \phi_{j'} \middle| \hat{A}_S \middle| \phi_j \right\rangle \\ &= \sum_j \sum_k \sum_{j'} C^*_{j'k}(t) C_{jk}(t) \left\langle \phi_{j'} \middle| \hat{A}_S \middle| \phi_j \right\rangle . \end{aligned} \tag{1.40}$$

A continuación, podemos definir un operador que actúa sólo y exclusivamente sobre el subsistema S como

$$\hat{\rho}_S(t) = \sum_j \sum_k \sum_{j'} C^*_{j'k}(t) C_{jk}(t) \left| \phi_j \right\rangle \left\langle \phi_{j'} \right| , \tag{1.41}$$

donde este operador se conoce como *operador densidad reducido del sistema.*

Es sencillo observar que si tenemos un operador actuando sólo sobre el sistema S, como es el caso del operador $\hat{A}$ anterior, su valor esperado también se podría escribir como

$$\left\langle \xi(t) \middle| \hat{A} \middle| \xi(t) \right\rangle = \mathrm{Tr} \left[\hat{\rho}_S(t) \hat{A}_S \right] . \tag{1.42}$$

Veamos ahora una serie de propiedades que verificará el operador densidad reducido:

- <u>Operador hermítico</u>: Se puede observar directamente por la propia definición del operador, (1.41).

- Traza unidad: Sabemos que la función de ondas del espacio total, $|\xi(t)\rangle$, está normalizada, esto supone que

$$\langle\xi(t)|\xi(t)\rangle = 1 \stackrel{(*)}{\Longrightarrow} \sum_{j,k} |C_{jk}(t)|^2 = 1, \tag{1.43}$$

  donde en $(*)$ se ha hecho uso de que las bases de los espacios $\mathcal{H}_S$ y $\mathcal{H}_B$ son ortonormales.

  Por tanto, de manera inmediata se tiene que el operador densidad reducido posee traza unidad.

- Semidefinido positivo: Tenemos que verificar que $\langle a|\hat{\rho}_S(t)|a\rangle \geq 0 \; \forall \, |a\rangle \in \mathcal{H}_S$. Consideremos un estado arbitrario $|a\rangle \in \mathcal{H}_S$, estudiemos dicho valor esperado:

$$\begin{aligned} \langle a|\hat{\rho}_S(t)|a\rangle &= \sum_j \sum_k \sum_{j'} C^*_{j'k}(t) C_{jk}(t) \langle a|\phi_j\rangle \langle\phi_{j'}|a\rangle \\ &= \sum_k \left[\sum_j C_{jk}(t) \langle a|\phi_j\rangle\right] \left[\sum_{j'} C^*_{j'k}(t) \langle\phi_{j'}|a\rangle\right] \\ &= \sum_k \left|\sum_j C_{jk}(t) \langle a|\phi_j\rangle\right|^2 \geq 0. \end{aligned} \tag{1.44}$$

A partir de aquí, podemos introducir de manera formal los conceptos de *operador densidad* y *operador densidad reducido*. De manera general, cualquier operador verificando las propiedades antes citadas (hermiticidad, traza unidad y semidefinido positivo) es un operador densidad.

Definición 1.1.3. *Definiremos el operador densidad correspondiente a un estado $|\psi(t)\rangle$ como*

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \,. \tag{1.45}$$

Definición 1.1.4. *El operador densidad, $\hat{\rho}(t)$, se dice que representa un estado puro si verifica la propiedad de idempotencia, esto es,*

$$\hat{\rho}(t)\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(t). \tag{1.46}$$

En el caso en el que no se verifique dicha propiedad se dirá que $\hat{\rho}(t)$ representa un estado mixto.

Anteriormente se ha introducido el operador densidad reducido con ayuda de la aplicación traza, veamos de manera formal cómo se define este operador:

Definición 1.1.5. *Consideremos el operador densidad del sistema total, $\hat{\rho}(t) \in L_{\mathcal{H}}$. Entonces se define el operador densidad reducido del sistema S como*

$$\hat{\rho}_S(t) = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{\rho}_T(t)\right] \qquad \forall t \in \mathbb{R}. \tag{1.47}$$

La aplicación $\mathrm{Tr_B}\left[\cdot\right]$ es conocida como traza parcial y es una aplicación lineal que se define sobre un operador $\hat{A} = \hat{A}_S \otimes \hat{A}_B \in L_{\mathcal{H}}$ como

$$\mathrm{Tr_B} : L_{\mathcal{H}} \longrightarrow L_{\mathcal{H}_S} \tag{1.48}$$

$$\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}_S \otimes \hat{A}_B\right] \longmapsto \hat{A}_S \mathrm{Tr}\left[\hat{A}_B\right]. \tag{1.49}$$

Observemos que esta aplicación está bien definida porque siempre (y en cualquier instante de tiempo) podemos encontrar una base de $\mathcal{H}$ factorizada; y como estamos explicitando la forma de actuar sobre un elemento factorizado bastaría con aplicar linealidad sobre la definición.

Por otro lado, por lo visto anteriormente sobre evolución temporal, es fácil ver que relacionando las expresiones (1.2) y (1.45) se tiene que en cualquier instante de tiempo, t, el operador densidad total se podrá escribir como

$$\hat{\rho}_T(t) = \hat{U}_T(t,t_0)\hat{\rho}_T(t_0)\hat{U}_T^{\dagger}(t,t_0) \quad \forall t_0 \in \mathbb{R}, \tag{1.50}$$

donde $\hat{U}_T(t,t_0)$ se corresponde con el operador de evolución temporal del sistema completo.

A continuación, consideraremos condiciones iniciales (instante t_0) factorizadas para el operador densidad del sistema total, es decir, $\hat{\rho}_T(t_0) = \hat{\rho}_S(t_0) \otimes \hat{\rho}_B$. Entonces se tendría, por la definición de operador densidad reducido y la expresión (1.50), que

$$\hat{\rho}_S(t) = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{U}_T(t,t_0)\hat{\rho}_S(t_0) \otimes \hat{\rho}_B \hat{U}_T^{\dagger}(t,t_0)\right], \tag{1.51}$$

donde, en realidad, ésto no es más que una aplicación lineal entre operadores tal que

$$\mathscr{A}(t,t_0) : L_{\mathcal{H}_S} \longrightarrow L_{\mathcal{H}_S} \tag{1.52}$$

$$\hat{\rho}_S(t_0) \longmapsto \hat{\rho}_S(t) = \mathscr{A}(t,t_0)\hat{\rho}_S(t_0). \tag{1.53}$$

La linealidad de esta aplicación entre operadores se debe a que es composición de aplicaciones lineales (tanto la traza parcial como el operador de evolución lo son).

NOTA.- Para simplificar la notación, de aquí en adelante, se denotará al operador densidad reducido del sistema S en un determinado tiempo t como: $\hat{\rho}(t)$.

1.2. Ecuación de Liouville-von Neumann

La ecuación de Liouville-von Neumann es la ecuación que nos determina la evolución temporal de un operador densidad correspondiente a un sistema cuántico cerrado. Suponiendo que el sistema total es un sistema cuántico cerrado, como se supondrá en este trabajo, sabremos que su evolución temporal vendrá descrita por la ecuación de Liouville-von Neumann. Ahora bien, como una de las partes del sistema total no será un sistema cuántico cerrado, su evolución no vendrá descrita por esta ecuación.

A continuación, nos centraremos en la deducción de la ecuación de Liouville-von Neumann. Para ello, comenzaremos suponiendo que para un instante de tiempo, t_0, conocemos cómo actúa el operador densidad del sistema total, $\hat{\rho}_T(t_0)$. De manera que derivando la expresión (1.50) respecto del tiempo, se tiene que

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}_T(t)}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,t_0)}{\partial t}\hat{\rho}_T(t_0)\hat{U}^\dagger(t,t_0) + i\hbar\hat{U}(t,t_0)\hat{\rho}_T(t_0)\frac{\partial\hat{U}^\dagger(t,t_0)}{\partial t}. \tag{1.54}$$

Por otro lado, por lo visto en la sección 1.1, sabemos que el operador de evolución satisface el problema (1.35), mientras que para calcular el término $\frac{\partial\hat{U}^\dagger(t,t_0)}{\partial t}$ bastaría con tomar adjunto en la ecuación que rige dicho problema, obteniendo así que

$$-i\hbar\frac{\partial\hat{U}^\dagger(t,t_0)}{\partial t} = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{H}(t). \tag{1.55}$$

Por tanto, volviendo sobre la expresión (1.54) y teniendo en cuenta las expresiones que verifican los operadores $\hat{U}(t,t_0)$ y $\hat{U}^\dagger(t,t_0)$, se tiene que

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}_T(t)}{\partial t} &= \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)\hat{\rho}_T(t_0)\hat{U}^\dagger(t,t_0) - \hat{U}(t,t_0)\hat{\rho}_T(t_0)\hat{U}^\dagger\hat{H}(t) && (1.56)\\ &= \hat{H}(t)\hat{\rho}_T(t) - \hat{\rho}_T(t)\hat{H}(t) && (1.57)\\ &= [\hat{H}(t),\hat{\rho}_T(t)]. && (1.58)\end{aligned}$$

Finalmente, combinando esta última expresión con la condición inicial del operador densidad, llegaríamos a lo que se conoce como ecuación de Liouville-von Neumann

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial\rho_T(t)}{\partial t} = [\hat{H}(t),\hat{\rho}_T(t)] \\ \hat{\rho}_T(t_0) = \hat{\rho}_0. \end{cases} \tag{1.59}$$

1.3. Ecuaciones tipo Lindblad

El objetivo principal de este trabajo es demostrar que, bajo ciertas hipótesis, la evolución de un sistema cuántico abierto viene determinada por una *ecuación tipo Lindblad*. Es por eso que en esta sección se estudiará de forma general en qué consiste esta ecuación.

La expresión general de dicha ecuación será

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \frac{-i}{\hbar}\left[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)\right] - \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}\left[\hat{L}^{\alpha\dagger}(t)\hat{L}^{\alpha}(t)\hat{\rho}(t) + \hat{\rho}(t)\hat{L}^{\alpha\dagger}(t)\hat{L}^{\alpha}(t) - 2\hat{L}^{\alpha}(t)\hat{\rho}(t)\hat{L}^{\alpha\dagger}(t)\right], \tag{1.60}$$

donde $\hat{\rho}(t)$ es el operador densidad del sistema reducido, $\hat{H}(t)$ se trata del hamiltoniano del sistema y $\hat{L}^{\alpha}(t)$ se conocerán como los *operadores tipo Lindblad*.

El término de tipo hamiltoniano que se puede observar en la ecuación, no tiene porqué ser el mismo hamiltoniano que tenía el sistema reducido previo al acoplo con el baño en consideración. De manera general, este término consistirá en un nuevo hamiltoniano que ha sido renormalizado por las diferentes propiedades que presenta el baño.

Asimismo, se puede observar que teniendo sólo en cuenta dicho término, se obtiene la ecuación de Liouville-von Neumann vista en la sección 1.2 con el nuevo hamiltoniano de trabajo. Sabemos que en esa situación, la evolución del operador densidad reducido sería unitaria por lo probado para el operador de evolución en las secciones anteriores.

El segundo término de la ecuación (1.60) nos describirá la parte no unitaria de la evolución del sistema (ya no se corresponde con la ecuación de Liouville-von Neumann) y caracterizará la disipación del sistema. Los operadores tipo Lindblad que aparecen en dicha expresión se pueden entender como los operadores que representan la interacción que se produce entre el baño y el sistema en cuestión.

En los dos siguientes capítulos del trabajo se llevará a cabo un estudio más profundo y detallado de este tipo de ecuaciones.

Capítulo 2

Derivación de la ecuación tipo Lindblad

En este segundo capítulo del trabajo, se van a deducir el tipo de ecuaciones de evolución temporal que conservan las propiedades del operador densidad reducido (vistas en la sección 1.1.1). La condición necesaria y suficiente para que se satisfagan esas propiedades es que la evolución temporal del sistema venga dada por una *ecuación tipo Lindblad*, aunque para que realmente sea condición necesaria y suficiente deberemos exigir una condición más fuerte que ser semidefinido positivo.

La deducción que aquí se expone ha sido realizada basándonos en el artículo [4]. En este artículo se ha llevado a cabo la deducción de estas ecuaciones para el caso de un hamiltoniano independiente del tiempo. En cambio en este capítulo se va a generalizar para el caso en el que el hamiltoniano del sistema posea una dependencia temporal arbitraria.

Para llevar a cabo tal deducción se considerará el operador densidad reducido del sistema de interés, descrito en la sección 1.1.1, bajo la hipótesis markoviana. Esta hipótesis consiste en, dado el operador densidad en un determinado de instante de tiempo t, el operador densidad en otro instante de tiempo posterior, t', no dependerá de la historia previa al instante de tiempo t. Es decir, conociendo $\hat{\rho}(t)$ y considerando $t' > t$, se verificará que $\hat{\rho}(t)$ no dependerá de lo que ha ocurrido con anterioridad a t.

A partir de la hipótesis markoviana y mediante la aplicación lineal descrita en la ecuación (1.52), se tiene que el operador $\hat{\rho}(t')$ se puede escribir como combinación lineal del operador $\hat{\rho}(t')$, esto es,

$$\hat{\rho}(t') = \mathscr{A}(t',t)\hat{\rho}(t) \ \forall t, t' \in \mathbb{R}, \tag{2.1}$$

donde se ha introducido el superoperador $\mathscr{A}(t',t)$ como el que nos conecta al operador densidad reducido en dos instantes de tiempos diferentes. Escribiendo esto por componentes se tiene que

$$\rho_{ij}(t') = \sum_{r,s=1}^{N} A_{ir,js}(t',t)\rho_{rs}(t) \qquad \forall i,j = 1,..,N, \tag{2.2}$$

donde los coeficientes $A_{ir,js}(t',t)$ son los asociados a la matriz que representa al superoperador $\mathscr{A}(t',t)$.

La deducción de la ecuación tipo Lindblad se va a llevar a cabo de manera genérica para un sistema de dimensión N; no obstante, con el objetivo de ser un poco más ilustrativos, en determinados momentos se mostrará el caso particular $N = 2$. En este caso, se tiene que el superoperador, $\mathscr{A}(t',t)$, descrito en la expresión (2.1) vendría dado por:

$$\mathscr{A}(t',t) = \begin{pmatrix} A_{11,11}(t',t) & A_{11,12}(t',t) & A_{11,21}(t',t) & A_{11,22}(t',t) \\ A_{12,11}(t',t) & A_{12,12}(t',t) & A_{12,21}(t',t) & A_{12,22}(t',t) \\ A_{21,11}(t',t) & A_{21,12}(t',t) & A_{21,21}(t',t) & A_{21,22}(t',t) \\ A_{22,11}(t',t) & A_{22,12}(t',t) & A_{22,21}(t',t) & A_{22,22}(t',t) \end{pmatrix}, \tag{2.3}$$

donde cabe destacar que este superoperador dependerá de los dos tiempos con los que se trabaja, tanto t como t'.

2.1. Propiedades del operador densidad reducido

A continuación, como ya se ha adelantado, para llevar a cabo la deducción de las ecuaciones tipo Lindblad vamos a imponer que en todo instante de tiempo t' las propiedades que caracterizan a un operador densidad se verifiquen, suponiendo que lo hacen en el instante de partida, t. Recordemos que las tres propiedades características eran: hermiticidad, traza unidad y semidefinido positivo.

Imponiendo que se verifiquen estas propiedades en todo instante de tiempo se encontrarán dos condiciones necesarias y suficientes que ha de verificar un operador densidad reducido para que su evolución temporal venga descrita por una ecuación de tipo Lindblad. Sin embargo, la propiedad de positividad que ha de verificar el operador densidad reducido sólo nos proporcionará una condición suficiente pero no necesaria. Es por eso, que exigiremos una condición más restrictiva que se conoce como *completa positividad.*

En primer lugar, previo a imponer las propiedades que ha de verificar el operador $\hat{\rho}(t')$, vamos a describir el espacio vectorial de trabajo y el producto escalar asociado.

Se tiene que el espacio donde se está trabajando es el formado por las matrices de dimensión N con coeficientes en $\mathbb{C}$ y que además verificarán que son hermíticas, definidas positivas y con traza unidad. A priori este espacio sería un conjunto convexo, pero no un espacio vectorial; es por eso que trabajaremos en un espacio mayor que será $\mathcal{M}_N(\mathbb{C})$.

Ahora bien, consideremos dos elementos pertenecientes a este espacio: $\hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C})$, donde las matrices que representan dichos operadores tendrán como coeficientes (a_{ij}) y (b_{ij}), respectivamente, con $i, j = 1, ..., N$. Entonces definiremos el producto escalar sobre este espacio como

$$\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle = \sum_i \sum_j a^*_{ij} b_{ij}. \tag{2.4}$$

Ahora sí, impongamos que se verifiquen las tres propiedades del operador densidad reducido.

2.1.1. Hermiticidad

Partiendo de la hipótesis de que el operador densidad reducido es hermítico en el instante de tiempo t, tenemos que demostrar que dicho operador en un instante de tiempo t' arbitrario también lo es. Esto consiste en probar que $\hat{\rho}(t') = \hat{\rho}^\dagger(t') \ \ \forall t' \in \mathbb{R}$, o equivalentemente por componentes

$$\rho^\dagger_{ij}(t') = \rho^*_{ji}(t') = \rho_{ij}(t') \qquad \forall i, j = 1, .., N \quad \forall t' \in \mathbb{R}. \tag{2.5}$$

A partir de la expresión (2.2) se puede escribir dicha condición como

$$\sum_{r,s=1}^{N} \left[A_{ir,js}(t', t) - A^*_{js,ir}(t', t) \right] \rho_{rs}(t) = 0 \qquad \forall i, j = 1, ..., N \quad \forall t' \in \mathbb{R}. \tag{2.6}$$

A continuación, veamos qué condiciones hay que imponer para que se verifique la expresión (2.6). Destaquemos que dicha ecuación se ha de verificar para todo operador densidad hermítico.

Comencemos considerando un operador densidad tal que para un valor fijo de $k \in \{1, ..., N\}$ verifique que $\rho_{kk}(t) = 1$ y sea nulo en el resto de términos. Entonces por la expresión (2.6) se tiene que $A_{ik,jk}(t', t) = A^*_{jk,ik}(t', t)$. Procediendo de manera análoga para todo valor de $k \in \{1, ..., N\}$, se llega a que

$$A_{ik,jk}(t', t) = A^*_{jk,ik}(t', t) \qquad \forall i, j, k = 1, ..., N \quad \forall t' \in \mathbb{R}. \tag{2.7}$$

Por un lado, consideremos un operador densidad tal que para unos valores fijos de $k, l \in \{1, ..., N\}$ se define como: $\rho_{kk}(t) = \rho_{ll}(t) = \rho_{kl}(t) = \rho_{lk}(t) = 1/2$ y el resto de términos nulos. Teniendo en cuenta la condición anterior, (2.7), e imponiendo (2.6) se tiene que

$$A_{ik,jl}(t', t) - A^*_{jl,ik}(t', t) + A_{il,jk}(t', t) - A^*_{jk,il}(t', t) = 0 \qquad \forall i, j = 1, ..., N \quad \forall t' \in \mathbb{R}. \tag{2.8}$$

Por otro lado, procediendo de manera análoga, considerando ahora para estos mismos valores fijos de k y l el operador densidad definido como: $\rho_{kk}(t) = \rho_{ll}(t) = i\rho_{kl}(t) = -i\rho_{lk}(t) = 1/2$ y el resto de términos nulos, se obtiene que

$$A_{ik,jl}(t', t) - A^*_{jl,ik}(t', t) - \left[A_{il,jk}(t', t) - A^*_{jk,il}(t', t)\right] = 0 \qquad \forall i, j = 1, ..., N \ \forall t' \in \mathbb{R}. \tag{2.9}$$

De esta forma, mediante la combinación de las ecuaciones (2.8) y (2.9) se llega a que $A_{ik,jl}(t', t) = A^*_{jl,ik}(t', t)$ y $A_{il,jk}(t', t) = A^*_{jk,il}(t', t)$. Considerando todas las posibles combinaciones de los subíndices k y l se acaba concluyendo que

$$A_{ir,js}(t', t) = A^*_{js,ir}(t', t) \qquad \forall i, j, r, s = 1, .., N \quad \forall t' \in \mathbb{R}. \tag{2.10}$$

Finalmente, se ha llegado a la conclusión de que el operador densidad $\hat{\rho}(t')$ es hermítico en cualquier instante de tiempo t' si y solamente si $A_{ir,js}(t', t) = A^*_{js,ir}(t', t)$ $\forall i, j, r, s = 1, .., N$. De manera que ya tenemos la primera condición necesaria y suficiente:

$$\boxed{\hat{\rho}(t') \text{ hermítico} \iff A_{ir,js}(t', t) = A^*_{js,ir}(t', t) \ \forall i, j, r, s = 1, .., N} \tag{2.11}$$

2.1.2. Traza unidad

Una vez ya encontrada la condición necesaria y suficiente para asegurar la hermiticidad del operador $\hat{\rho}(t')$, queremos encontrar la correspondiente para que dicho operador densidad tenga traza unidad, sabiendo que el operador $\hat{\rho}(t)$ la tiene.

A priori, la matriz correspondiente al superoperador $\mathscr{A}(t',t)$ es de dimensión $N^2 \times N^2$ con $A_{ij,rs}(t',t) \in \mathbb{C}\ \forall i,j,r,s = 1,..,N$; esto supone que tenemos $2N^4$ incógnitas (parte real y parte imaginaria). Haciendo uso de la condición de hermiticidad (2.11) reducimos las incógnitas a la mitad, es decir, N^4.

Sabemos que por encima de la diagonal hay $\frac{N^4-N^2}{2}$ elementos. Conociendo dichos elementos, por hermiticidad obtendríamos los correspondientes a la parte inferior de la matriz. Teniendo en cuenta la parte real e imaginaria, supondría que las incógnitas correspondientes a los elementos no diagonales serían $N^4 - N^2$. A estas incógnitas habría que sumarle las correspondientes a los elementos diagonales que sabemos que son N^2 pues son números reales. Esto concluiría que el número total de incógnitas sea N^4.

Por el teorema espectral, una matriz hermítica puede ser escrita en función de sus autovalores y autovectores. Por tanto, denotemos los autovectores de la matriz $\mathscr{A}(t',t)$ por $\hat{E}^\alpha(t',t)$ con componentes $E^\alpha_{ij}(t',t)$ asociados a los autovalores $\lambda^\alpha(t',t)$ con $\alpha = 1,...,N^2$. Destacar que en principio, los autovalores y autovectores dependen tanto de t' como de t pues lo hace la matriz de la que provienen y también que los autovalores pueden ser degenerados. Los autovectores $\hat{E}^\alpha(t',t)$ serán entendidos como matrices cuadradas de dimensión N, es decir,

$$\hat{E}^\alpha(t',t) = \begin{pmatrix} E^\alpha_{11}(t',t) & \cdots & E^\alpha_{1N}(t',t) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ E^\alpha_{N1}(t',t) & \cdots & E^\alpha_{NN}(t',t) \end{pmatrix}. \tag{2.12}$$

Una vez dicho todo esto, encontremos la condición necesaria y suficiente para que el operador $\hat{\rho}(t')$ tenga traza unidad. Como consecuencia de que la matriz $\mathscr{A}(t',t)$ sea autoadjunta, sabemos que los autovectores pueden elegirse ortonormales, esto es, con el producto escalar definido en (2.4) se verifica que

$$\langle \hat{E}^\alpha(t',t), \hat{E}^\beta(t',t)\rangle = \delta^{\alpha\beta} \qquad \forall \alpha,\beta = 1,...,N^2. \tag{2.13}$$

De manera que escribiendo esta misma igualdad por componentes se tiene que

$$\sum_{i,j=1}^{N} E^\alpha_{ij}(t',t) E^{\beta *}_{ij}(t',t) = \delta^{\alpha\beta} \overset{(*)}{\Longrightarrow} \mathrm{Tr}\left[\hat{E}^\alpha(t',t)\hat{E}^{\beta\dagger}(t',t)\right] = \delta^{\alpha\beta}, \tag{2.14}$$

donde en $(*)$ se ha usado la propia definición de la aplicación traza y cómo han sido construidas las matrices $\hat{E}^\alpha(t',t)$. Asimismo, haciendo uso del teorema espectral se puede escribir la matriz $\mathscr{A}(t',t)$ en función de los autovalores y autovectores como sigue:

$$A_{ir,js}(t',t) = \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^\alpha(t',t) E_{ir}^\alpha(t',t) E_{js}^{\alpha *}(t',t). \tag{2.15}$$

Combinando las ecuaciones (2.15) y (2.2) podemos escribir el operador densidad como

$$\rho_{ij}(t') = \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^\alpha(t',t) \sum_{r,s=1}^{N} E_{ir}^\alpha(t',t)\rho_{rs}(t) E_{js}^{\alpha *}(t',t) \quad \text{y} \tag{2.16}$$

$$\hat{\rho}(t') = \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^\alpha(t',t) \hat{E}^\alpha(t',t)\hat{\rho}(t)\hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t). \tag{2.17}$$

Una vez ya se ha escrito el operador $\hat{\rho}(t')$ en función de los autovalores y autovectores de $\mathscr{A}(t',t)$, estudiemos bajo qué condición este operador posee traza unidad:

$$\operatorname{Tr}[\hat{\rho}(t')] = \sum_{i=1}^{N} \rho_{ii}(t') = 1 \implies 1 = \sum_{\alpha}^{N^2} \lambda^\alpha(t',t) \sum_{i,r,s=1}^{N} E_{ir}^\alpha(t',t)\rho_{rs}(t) E_{is}^{\alpha *}(t',t). \tag{2.18}$$

Además, escribiendo la unidad como $1 = \sum_{r,s=1}^{N} \rho_{rs}(t)\delta_{sr}$, pues el operador $r\hat{h}o(t)$ tiene traza unidad, se tiene la siguiente igualdad:

$$\sum_{r,s=1}^{N} \left[\sum_{\alpha}^{N^2} \lambda^\alpha(t',t) \sum_{i=1}^{N} E_{si}^{\alpha\dagger}(t',t)\ E_{ir}^\alpha(t',t) - \delta_{rs} \right] \rho_{rs}(t) = 0. \tag{2.19}$$

Si consideramos ahora esta última expresión en forma matricial se llega a que

$$\operatorname{Tr}\left[\sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^\alpha(t',t) \hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t)\hat{E}^\alpha(t',t) - \hat{I}_N \right] \hat{\rho}(t) = 0, \tag{2.20}$$

donde $\hat{I}_N$ se corresponde con la matriz identidad de dimensión N.

Como esto se ha de verificar para cualquier operador densidad reducido, $\hat{\rho}(t) \in L_{\mathcal{H}_S}$, hermítico; llegamos a que la condición necesaria y suficiente para que la traza del operador densidad reducido en cualquier instante de tiempo sea la unidad es:

$$\boxed{\operatorname{Tr}[\hat{\rho}(t')] = 1 \iff \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^\alpha(t',t)\hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t)\hat{E}^\alpha(t',t) = \hat{I}_N} \tag{2.21}$$

2.1.3. Completa positividad

La última propiedad que ha de verificar el operador densidad reducido en cualquier instante de tiempo sea semidefinido positivo, es decir, debemos verificar que

$$\langle \mathbf{v}|\hat{\rho}(t')|\mathbf{v}\rangle \geq 0 \qquad \forall\, |\mathbf{v}\rangle \in \mathbb{C}^N, \quad \forall t' \in \mathbb{R}. \tag{2.22}$$

Estudiemos esta expresión:

$$\langle \mathbf{v}|\hat{\rho}(t')|\mathbf{v}\rangle \overset{(*)}{=} \left\langle \mathbf{v}\middle|\sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^{\alpha}(t',t)\hat{E}^{\alpha}(t',t)\hat{\rho}(t)\hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t)\middle|\mathbf{v}\right\rangle \tag{2.23}$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^{\alpha}(t',t)\left\langle \mathbf{v}\middle|\hat{E}^{\alpha}(t',t)\hat{\rho}(t)\hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t)\middle|\mathbf{v}\right\rangle \tag{2.24}$$

$$\overset{(**)}{=} \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^{\alpha}(t',t)\left\langle \mathbf{v}_{\alpha}|\hat{\rho}(t)|\mathbf{v}_{\alpha}\right\rangle, \tag{2.25}$$

donde en $(*)$ hemos se ha usado la definición (2.17) y en $(**)$ se ha definido $|\mathbf{v}_{\alpha}\rangle \equiv \hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t)\,|\mathbf{v}\rangle$. De esta forma, tenemos que la propiedad de positividad del operador $\hat{\rho}(t)$ supone que

$$\langle \mathbf{v}|\hat{\rho}(t)|\mathbf{v}\rangle \geq 0 \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{C}^N \implies \langle \mathbf{v}_{\alpha}|\hat{\rho}(t)|\mathbf{v}_{\alpha}\rangle \geq\ 0. \tag{2.26}$$

Por tanto, si todos los autovalores, $\lambda^{\alpha}(t',t)$, son no negativos tendríamos la positividad del operador $\hat{\rho}(t')$ deseada. Es decir, hemos encontrado la condición suficiente para que el operador sea semidefinido positivo:

$$\lambda^{\alpha}(t',t) \geq 0 \;\; \forall \alpha = 1,..,N \implies \hat{\rho}(t') \text{ semidefinido positivo.} \tag{2.27}$$

Sin embargo, como ya se adelantó a nosotros nos interesa buscar una condición más fuerte que nos asegure la necesidad. Esta condición será la que se conoce como *completa positividad*.

Previo a definir la propiedad de completa positividad, consideremos la composición de nuestro sistema, $\mathcal{H}_S$, con otro de igual dimensión que no evolucione en el tiempo y que no interactúe con el anterior. Este nuevo sistema definido lo denotaremos por $\mathcal{H}_N$.

Como bien sabemos, el espacio total se construye como el producto tensorial de $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_N$ y consideraremos la base $\{|\phi_i\rangle \otimes |\chi_j\rangle\}$ de dicho espacio. Por tanto, es legítimo considerar un operador arbitrario $\hat{R}(t') \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_N}$ en un instante de tiempo arbitrario t'. Además, asumiremos que este operador evoluciona de acuerdo con (2.17) reemplazando $\hat{E}^{\alpha}(t',t)$ por $\hat{P}^{\alpha}(t',t) \equiv \hat{E}^{\alpha}(t',t) \otimes \hat{I}_N$.

Definición 2.1.1. *Se dirá que un operador $\hat{\rho}(t')$ es completamente positivo si el operador $\hat{R}(t')$, anteriormente definido, es semidefinido positivo, es decir,*

$$\left\langle \boldsymbol{w}\middle|\hat{R}(t')\middle|\boldsymbol{w}\right\rangle \geq 0 \qquad \forall\,|\boldsymbol{w}\rangle \in \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_N. \tag{2.28}$$

Una vez ya se ha definido la completa positividad, veamos que ésta sí la propiedad que habrá de verificar el operador densidad reducido para tener suficiencia y necesidad.

Proposición 2.1.2. *El operador $\hat{\rho}(t')$ es completamente positivo si y solamente si todos los autovalores son no negativos, es decir, $\lambda^\alpha(t',t) \geq 0$ $\forall \alpha = 1,..,N^2$.*

Demostración. -

$\Longleftarrow$ De manera trivial se tiene, puesto que antes ya se ha visto que que si los autovalores son no negativos entonces $\hat{\rho}(t')$ es positivo. Por tanto al realizar la extensión mencionada se sigue manteniendo.

$\Longrightarrow$ Tenemos que

$$\left\langle \mathbf{w} \middle| \hat{R}(t') \middle| \mathbf{w} \right\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^\alpha(t',t) \left\langle \mathbf{w} \middle| \hat{P}^\alpha(t',t)\hat{R}(t)\hat{P}^{\alpha\dagger}(t',t) \middle| \mathbf{w} \right\rangle, \tag{2.29}$$

donde se ha considerado un vector, $|\mathbf{w}\rangle$, totalmente arbitrario, que escribimos en función de las bases correspondientes a cada espacio de Hilbert del producto tensorial como

$$|\mathbf{w}\rangle \equiv \sum_{m,n=1}^{N} D_{mn} |\phi_m\rangle \otimes |\chi_n\rangle \qquad D_{mn} \in \mathbb{C} \quad \forall m,n = 1,..,N, \tag{2.30}$$

donde por simplificar la notación, de aquí en adelante se denotará $|\phi_m\rangle \otimes |\chi_n\rangle \equiv |\phi_m\chi_n\rangle$

Además, escribamos ahora el operador $\hat{R}(t)$ en función de los elementos de la base factorizada como

$$\hat{R}(t) = \sum_{k,l,k',l'=1}^{N} C_{kl}(t)C^*_{k'l'}(t) |\phi_k\chi_l\rangle \langle\phi_{k'}\chi_{l'}|, \tag{2.31}$$

donde se han introducido los coeficientes $C_{kl}(t)$ y $C^*_{k'l'}(t)$ arbitrarios. Por otro lado, por la propia definición de operador densidad reducido, éste se puede escribir como $\hat{\rho}(t) = \mathrm{Tr_N}\left[\hat{R}(t)\right]$, haciendo la traza parcial respecto del espacio $\mathcal{H}_N$. De esta forma tenemos que

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{k,l,k'=1}^{N} C_{kl}(t)C^*_{k'l}(t) |\phi_k\rangle \langle\phi_{k'}|. \tag{2.32}$$

Imponiendo ahora que este operador tenga traza unidad se llega a que

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}(t)\right] = \sum_{i=1}^{N} \langle\phi_i|\hat{\rho}(t)|\phi_i\rangle = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k,l,m=1}^{N} C_{kl}(t)C^*_{ml}(t) \langle\phi_i|\phi_k\rangle \langle\phi_m|\phi_i\rangle \tag{2.33}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{k,l,m=1}^{N} C_{kl}(t)C^*_{ml}(t)\ \delta_{i,k}\delta_{i,m} = \sum_{i,l=1}^{N} C_{il}C^*_{il} = \sum_{i,l=1}^{N} |C_{il}(t)|^2 = 1. \tag{2.34}$$

Esta condición puede escribirse en forma matricial, definiendo la matriz $\hat{C}(t)$ como la que posee los coeficientes $C_{ij}(t)$, y la expresión (2.34) nos quedaría

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{C}^\dagger(t)\hat{C}(t)\right] = 1. \tag{2.35}$$

De esta forma, retomando la ecuación (2.29) y escribiendo la expresión descrita en (2.30), se tiene que

$$\left\langle \mathbf{w}\middle|\hat{R}(t')\middle|\mathbf{w}\right\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N^2}\lambda^\alpha(t',t)\sum_{\substack{n,m=1\\n',m'=1}}^{N} D_{mn}D^*_{m'n'}\underbrace{\left\langle \phi_{m'}\chi_{n'}\middle|\hat{P}^\alpha(t',t)\hat{R}(t)\hat{P}^{\alpha\dagger}(t',t)\middle|\phi_m\chi_n\right\rangle}_{(*)}. \tag{2.36}$$

A continuación, desarrollaremos el termino $(*)$ con ayuda de la expresión del operador $\hat{R}(t)$, (2.31), se obtiene que

$$(*) = \left\langle \phi_{m'}\chi_{n'}\middle|\hat{P}^\alpha(t',t)\left(\sum_{\substack{k,l=1\\k',l'=1}}^{N} C_{kl}(t)C^*_{k'l'}(t)\left|\phi_k\chi_l\right\rangle\left\langle\phi_{k'}\chi_{l'}\right|\right)\hat{P}^{\alpha\dagger}(t',t)\middle|\phi_m\chi_n\right\rangle \tag{2.37}$$

$$= \sum_{\substack{k,l=1\\k',l'=1}}^{N} C_{kl}(t)C^*_{k'l'}(t)\underbrace{\left\langle \phi_{m'}\chi_{n'}\middle|\hat{P}^\alpha(t',t)\middle|\phi_k\chi_l\right\rangle}_{P^\alpha_{m'k}\delta_{n',l}}\underbrace{\left\langle \phi_{k'}\chi_{l'}\middle|\hat{P}^{\alpha\dagger}(t',t)\middle|\phi_m\chi_n\right\rangle}_{P^{\alpha*}_{mk'}\delta_{n,l'}}. \tag{2.38}$$

Por tanto, tras lo deducido, volvemos a (2.36) que ahora se puede escribir como

$$\left\langle \mathbf{w}\middle|\hat{R}(t')\middle|\mathbf{w}\right\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N^2}\lambda^\alpha(t',t)\sum_{\substack{n,m,n',m'=1\\k,l,k',l'=1}}^{N} D_{mn}D^*_{m'n'}C_{kl}(t)C^*_{k'l'}(t)P^{\alpha*}_{mk'}P^\alpha_{m'k}\delta_{n.l'}\delta_{n',l}. \tag{2.39}$$

Finalmente, esta expresión se puede escribir en forma matricial, de la siguiente manera:

$$\left\langle \mathbf{w}\middle|\hat{R}(t')\middle|\mathbf{w}\right\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N^2}\lambda^\alpha(t',t)\underbrace{\mathrm{Tr}\left[\hat{C}(t)\hat{D}^\dagger\hat{P}^\alpha(t',t)\right]}_{(1)}\ \underbrace{\mathrm{Tr}\left[\hat{P}^{\alpha\dagger}(t',t)\hat{D}\hat{C}(t)\right]}_{(2)}, \tag{2.40}$$

donde se ha definido la nueva matriz $\hat{D}$ con coeficientes $D_{mn}\in\mathbb{C}\ \forall m,n=1,..,N$. Recordemos que esta expresión se ha de verificar $\forall\hat{C}(t),\hat{D}$ tales que verifiquen $\mathrm{Tr}\left[\hat{C}^\dagger(t)\hat{C}(t)\right]=1$. En concreto, esto se verifica para $\hat{C}^\dagger(t)=\hat{P}^\beta(t',t)$ y $\hat{D}=\hat{I}$ y esto supone que los términos (1) y (2) de la expresión (2.40) sean $\delta^{\alpha\beta}$.

De esta forma, bajo la hipótesis de que el operador reducido es completamente positivo se tiene que

$$\sum_{\alpha=1}^{N^2}\lambda^\alpha(t',t)\left(\delta^{\alpha\beta}\right)^2\geq 0 \qquad\Longrightarrow\qquad \lambda^\beta(t',t)\geq 0\ \ \forall\beta\in(1,..,N^2). \tag{2.41}$$

□

De manera que así se ha encontrado la tercera y última de las condiciones necesarias y suficientes que ha de verificar el operador densidad reducido en cualquier instante de tiempo.

2.2. Deducción de la ecuación

Una vez ya se ha impuesto que el operador densidad $\hat{\rho}(t')$ verifica las condiciones necesarias en todo instante de tiempo t', vamos a ver que la evolución temporal del operador de densidad reducido obedece una ecuación tipo Lindblad.

Para llevar a cabo tal deducción de la ecuación, comenzaremos calculando los autovalores y autovectores del superoperador $\mathscr{A}(t',t)$ para el caso $t' = t$. Posteriormente, se obtendrá la ecuación de evolución temporal con ayuda de dichos cálculos y del estudio de los autovalores y autovectores en el caso límite $t' \longrightarrow t$.

2.2.1. Estudio de autovalores y autovectores para tiempos iguales

Estudiemos los autovalores y autovectores de la matriz $\mathscr{A}(t',t)$ para el caso $t' = t$. Destacar que observando la expresión (2.2) se tiene que en este caso que estamos considerando, la matriz $\mathscr{A}(t,t)$ no dependerá del tiempo, esto tendrá como consecuencia que los autovalores y autovectores correspondientes tampoco tendrán una dependencia del tiempo. Observemos que para el caso de $N = 2$, esta matriz sería:

$$\mathscr{A}(t,t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.42}$$

A partir de la expresión (2.19) se puede obtener que

$$\sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^\alpha E^\alpha_{ir} E^{\alpha\dagger}_{sj} = \delta_{ri}\delta_{js}. \tag{2.43}$$

Multiplicando por E^β_{js} y sumamos sobre j, s a ambos lados de la igualdad, se deduce que

$$\sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^\alpha E^\alpha_{ir} \sum_{j,s=1}^{N} E^{\alpha\dagger}_{sj} E^\beta_{js} = \sum_{j,s=1}^{N} E^\beta_{js}\delta_{ri}\delta_{js} \overset{(*)}{=} \mathrm{Tr}\left[\hat{E}^\beta\right]\delta_{ri}, \tag{2.44}$$

donde en $(*)$ se ha usado la definición de traza.

A continuación, usando la relación de ortogonalidad que viene dada por la expresión (2.14) sobre la ecuación (2.44) se llega a que

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{E}^{\beta}\right]\delta_{ri} = \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^{\alpha} E_{ir}^{\alpha}\delta^{\alpha\beta} \overset{(*)}{=} \lambda^{\beta} E_{ir}^{\beta}, \tag{2.45}$$

donde en $(*)$ hemos eliminado el sumatorio en α con la $\delta^{\alpha\beta}$, evaluando en $\alpha = \beta$.

Sabemos que al menos ha de existir un autovalor $\lambda^{\beta} \neq 0$, puesto que si todos fuesen cero estaríamos ante la matriz nula. Esto supondría que el autovector asociado a dicho autovalor sería no nulo y por tanto su traza también. Entonces, podemos escribir

$$E_{ir}^{\beta} = \frac{\mathrm{Tr}\left[\hat{E}^{\beta}\right]}{\lambda^{\beta}}\delta_{ri}. \tag{2.46}$$

Obteniendo así que el autovector $\hat{E}^{\beta}$ es proporcional a la identidad, $\hat{I}_N$. De esta forma, se tiene que sólo puede existir un autovalor no nulo, puesto que en caso contrario llegaríamos a que los autovectores asociados a autovalores no nulos serían todos proporcionales a la identidad, es decir, estarían todos asociados al mismo autovector.

Sin pérdida de generalidad, consideremos que el autovalor no nulo es el correspondiente a $\beta = N^2$. Entonces se tendría que el autovector, ya normalizado, asociado a este autovalor no nulo sería: $\hat{E}^{N^2} = \frac{\hat{I}_N}{\sqrt{N}}$. Veamos qué valor tomará el autovalor en cuestión; a partir de la ecuación (2.45) se tiene que

$$\lambda^{N^2}\frac{1}{\sqrt{N}}\delta_{ri} = \frac{N}{\sqrt{N}}\delta_{ri} \implies \lambda^{N^2} = N. \tag{2.47}$$

Entonces, para concluir esta sección, tenemos que los autovalores y autovectores en el caso en el que $t = t'$ vienen dados por

$$\begin{array}{ll} \lambda^{N^2} = N & \lambda^{\alpha} = 0 \;\; (\alpha \neq N^2) \\ \hat{E}^{N^2}(t,t) = \frac{1}{\sqrt{N}}\hat{I}_N & \hat{E}^{\alpha}(t,t) = \hat{K}^{\alpha} \;\; (\alpha \neq N^2), \end{array}$$

donde $\hat{F}^{\alpha}$ serán los autovectores correspondientes $\forall\alpha = 1, .., N^2 - 1$ desconocidos e independientes del tiempo.

2.2.2. Derivación de la ecuación

A continuación, procederemos a la derivación formal de la ecuación del operador densidad reducido. Como se vio al principio de este capítulo, dicho operador se puede conectar entre dos instantes de tiempo como

$$\hat{\rho}(t') = \mathscr{A}(t', t_0)\hat{\rho}(t_0) \qquad \forall t', t_0 \in \mathbb{R}. \tag{2.48}$$

Con el objetivo de hallar cómo evoluciona el operador densidad reducido en el tiempo derivamos la expresión (2.48) respecto de t' de forma que se obtiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}(t')}{\partial t'} &= \frac{\partial \mathscr{A}(t', t_0)}{\partial t'}\hat{\rho}(t_0) \overset{(*)}{=} \frac{\partial \left[\mathscr{A}(t', t)\mathscr{A}(t, t_0)\right]}{\partial t'}\hat{\rho}(t_0) \\ &= \frac{\partial \mathscr{A}(t', t)}{\partial t'} \cdot \mathscr{A}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0) = \frac{\partial \mathscr{A}(t', t)}{\partial t'}\hat{\rho}(t) \quad \forall t \ \forall t', \end{aligned} \tag{2.49}$$

donde en $(*)$ hemos aplicado la hipótesis de semigrupo descrita en (1.22) con los operadores evolución. Suponiendo que $\hat{\rho}(t_0)$ es un operador densidad, la igualdad planteada tiene sentido y sabemos entonces que la matriz $\mathscr{A}(t', t)$ ha de ser una matriz hermítica. De esta forma, se puede hacer la descomposición espectral (en forma matricial) como (2.15) y escribir el operador densidad reducido en el instante de tiempo t' como en (2.17).

Entonces si estudiamos ahora la derivada de la expresión (2.17) respecto de t' teniendo en cuenta dicha descomposición espectral de la matriz $\mathscr{A}(t', t)$ y la linealidad de la derivada, se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}(t')}{\partial t'} = \sum_{\alpha=1}^{N^2} \frac{\partial \lambda^{\alpha}(t', t)}{\partial t'} \hat{E}^{\alpha}(t', t)\hat{\rho}(t)\hat{E}^{\alpha\dagger}(t', t) + \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^{\alpha}(t', t)\frac{\partial \hat{E}^{\alpha}(t', t)}{\partial t'}\hat{\rho}(t)\ \hat{E}^{\alpha\dagger}(t', t) \\ + \sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^{\alpha}(t', t)\hat{E}^{\alpha}(t', t)\hat{\rho}(t)\frac{\partial \hat{E}^{\alpha\dagger}(t', t)}{\partial t'} \quad \forall t, t' \in \mathbb{R}. \end{aligned} \tag{2.50}$$

Como este resultado lo tenemos $\forall t$, $\forall t' \in \mathbb{R}$, vamos a considerar el caso particular en el que $t' \to t$. Como consecuencia se obtendrá que la ecuación (2.49) es local en el tiempo, es decir, que dependerá sólo y exclusivamente de del instante de tiempo t,

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \lim_{t' \to t} \left(\frac{\partial \mathscr{A}(t', t)}{\partial t'}\hat{\rho}(t) \right) = \left(\lim_{t' \to t} \frac{\partial \mathscr{A}(t', t)}{\partial t'} \right) \hat{\rho}(t). \tag{2.51}$$

A continuación, definamos los autovalores y autovectores y sus correspondientes derivadas para el caso $t' \to t$ como sigue:

$$
\begin{aligned}
&\lim_{t' \to t} \frac{\partial \lambda^{N^2}(t',t)}{\partial t'} = c^{N^2}(t), \\
&\lim_{t' \to t} \lambda^{N^2}(t',t) = N, \\
&\lim_{t' \to t} \frac{\partial \lambda^{\alpha}(t',t)}{\partial t'} = c^{\alpha}(t) \qquad \forall \alpha = 1,..,N^2-1, \\
&\lim_{t' \to t} \lambda^{\alpha}(t',t) = 0 \qquad \forall \alpha = 1,..,N^2-1, \\
&\lim_{t' \to t} \frac{\partial \hat{E}^{N^2}(t',t)}{\partial t'} = \hat{B}(t), \\
&\lim_{t' \to t} \hat{E}^{N^2}(t',t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{I}_N, \\
&\lim_{t' \to t} \hat{E}^{\alpha}(t',t) = \hat{K}^{\alpha} \qquad \forall \alpha = 1,..,N^2-1,
\end{aligned}
\tag{2.52}
$$

donde para el caso de los autovalores y autovectores se corresponden con lo calculado en las sección 2.2.1 y para las correspondientes derivadas se han introducido los coeficientes $c^{\alpha}(t)$ $\forall \alpha = 1,..,N^2$ y el operadore $\hat{B}(t)$. Más adelante se detallarán las propiedades que verificarán los operadores $\hat{B}(t)$ y $\hat{K}^{\alpha}$. Destacar que no se ha calculado el límite de la derivada de los autovectores para $\alpha \neq N^2$ puesto que como en este caso los autovalores son nulos no nos será necesario conocer el valor de los primeros.

De esta forma, una vez ya tenemos definidos los autovalores y autovectores y las diversas derivadas, podemos escribir la expresión (2.51) como

$$
\begin{aligned}
\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} &= \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} c^{\alpha}(t) \hat{K}^{\alpha} \hat{\rho}(t) \hat{K}^{\alpha\dagger} + c^{N^2}(t) \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{I}_N \hat{\rho}(t) \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{I}_N^{\dagger} + \\
&\quad + N \hat{B}(t) \hat{\rho}(t) \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{I}_N^{\dagger} + N \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{I}_N \hat{\rho}(t) \hat{B}^{\dagger}(t) \\
&= \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} c^{\alpha}(t) \hat{K}^{\alpha} \hat{\rho}(t) \hat{K}^{\alpha\dagger} + \frac{c^{N^2}(t)}{N} \hat{\rho}(t) + \frac{N}{\sqrt{N}} \hat{B}(t) \hat{\rho}(t) + \frac{N}{\sqrt{N}} \hat{\rho}(t) \hat{B}^{\dagger}(t).
\end{aligned}
\tag{2.53}
$$

Asimismo, para encontrar una expresión más compacta, derivaremos la condición necesaria y suficiente deducida para que el operador $\hat{\rho}(t')$ tuviese traza unidad respecto de t', es decir, derivaremos la expresión (2.21):

$$
\frac{\partial}{\partial t'} \left[\sum_{\alpha=1}^{N^2} \lambda^{\alpha}(t',t) \hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t) \hat{E}^{\alpha}(t',t) \right] = \hat{0} \qquad \forall t, t' \in \mathbb{R},
\tag{2.54}
$$

donde $\hat{0}$ es el operador nulo.

De manera que desarrollando esta expresión, se tiene que

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha=1}^{N^2}\frac{\partial\lambda^\alpha(t',t)}{\partial t'}\hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t)\hat{E}^\alpha(t',t)+\sum_{\alpha=1}^{N^2}\lambda^\alpha(t',t)\frac{\partial\hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t)}{\partial t'}\hat{E}^\alpha(t',t)\\+\sum_{\alpha=1}^{N^2}\lambda^\alpha(t',t)\hat{E}^{\alpha\dagger}(t',t)\frac{\partial\hat{E}^\alpha(t',t)}{\partial t'}=\hat{0}\qquad\forall t,t'\in\mathbb{R}.\end{aligned}\tag{2.55}$$

Como esta ecuación se verifica para cualesquiera $t, t' \in \mathbb{R}$, en concreto lo hace para el caso que estamos considerando, $t' \to t$. Entonces, usando las definiciones de (2.52) la expresión (2.55) nos queda:

$$\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}c^\alpha(t)\hat{K}^{\alpha\dagger}\hat{K}^\alpha+c^{N^2}(t)\frac{1}{N}\hat{I}_N^\dagger\hat{I}_N+\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}^\dagger(t)\hat{I}_N+\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{I}_N^\dagger\hat{B}(t)=\hat{0}\tag{2.56}$$

Por otro lado, escribiendo el término $\frac{1}{N}c^{N^2}(t)\hat{\rho}(t)=\frac{1}{2}\left[c^{N^2}(t)\hat{I}_N\hat{\rho}(t)+\hat{\rho}(t)c^{N^2}(t)\hat{I}_N\right]$ y combinándolo con la expresión (2.56) se llega a que

$$\begin{aligned}\frac{1}{N}c^{N^2}(t)\hat{\rho}(t)=&-\frac{1}{2}\left[\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}^\dagger(t)+\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}(t)+\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}c^\alpha(t)\hat{K}^{\alpha\dagger}\hat{K}^\alpha\right]\hat{\rho}(t)\\&-\frac{1}{2}\hat{\rho}(t)\left[\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}^\dagger(t)+\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}(t)+\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}c^\alpha(t)\hat{K}^{\alpha\dagger}\hat{K}^\alpha\right].\end{aligned}\tag{2.57}$$

A continuación, volviendo a la ecuación de evolución (2.53) y teniendo en cuenta lo descrito en (2.57), se puede escribir como

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt}=&\frac{-1}{2}\left[\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}^\dagger(t)+\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}(t)\right]\hat{\rho}(t)-\frac{1}{2}\hat{\rho}(t)\left[\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}^\dagger(t)+\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}(t)\right]\\&+\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{B}(t)\hat{\rho}(t)+\frac{N}{\sqrt{N}}\hat{\rho}(t)\hat{B}^\dagger(t)+\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}c^\alpha(t)\hat{K}^\alpha\hat{\rho}(t)\hat{K}^{\alpha\dagger}\\&-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}c^\alpha(t)\hat{K}^{\alpha\dagger}\hat{K}^\alpha\hat{\rho}(t)-\frac{1}{2}\hat{\rho}(t)\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}c^\alpha(t)\hat{K}^{\alpha\dagger}\hat{K}^\alpha\\=&\left[\frac{N}{2\sqrt{N}}\left(\hat{B}(t)-\hat{B}^\dagger(t)\right),\hat{\rho}(t)\right]-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}c^\alpha(t)\hat{K}^{\alpha\dagger}\hat{K}^\alpha\hat{\rho}(t)\\&-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}c^\alpha(t)\left[\hat{\rho}(t)\hat{K}^{\alpha\dagger}\hat{K}^\alpha-2\hat{K}^\alpha\hat{\rho}(t)\hat{K}^{\alpha\dagger}\right]\end{aligned}\tag{2.58}$$

Si definimos ahora el operador hamiltoniano como $\frac{-i}{\hbar}\hat{H}(t)\equiv\frac{N}{2\sqrt{N}}\left(\hat{B}(t)-\hat{B}^\dagger(t)\right)$ y los operadores de Lindblad tales que $\hat{L}^\alpha(t)\equiv\sqrt{c^\alpha(t)}\hat{K}^\alpha$ concluimos que la ecuación de evolución del operador densidad reducido es una ecuación tipo Lindblad:

$$\boxed{\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt}=\frac{-i}{\hbar}\left[\hat{H}(t),\hat{\rho}(t)\right]-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N^2-1}\left[\hat{L}^{\alpha\dagger}(t)\hat{L}^\alpha(t)\hat{\rho}(t)+\hat{\rho}(t)\hat{L}^{\alpha\dagger}(t)\hat{L}^\alpha(t)-2\hat{L}^\alpha(t)\hat{\rho}(t)\hat{L}^{\alpha\dagger}(t)\right]}$$

Finalmente, se ha obtenido que para que el operador densidad reducido verifique sus propiedades de operador densidad (más la completa positividad) es condición necesaria y suficiente que la ecuación de evolución de este operador sea una ecuación tipo Lindblad.

Se puede observar que en la derivación que se ha llevado a cabo en este capítulo, no hemos obtenido una expresión explícita del hamiltoniano ni tampoco de los operadores tipo Lindblad.

2.2.3. Condiciones de ortonormalidad

Para finalizar este capítulo, como ya se adelantó, se van a estudiar las condiciones que han de verificar las matrices $\hat{B}(t)$ y $\hat{K}^{\alpha}$. Recordemos que los autovectores de la matriz $\mathscr{A}(t',t)$ habían de verificar la condición de ortonormalidad, es decir,

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{N} E_{ir}^{\alpha}(t',t)E_{ir}^{\beta *}(t',t) = \mathrm{Tr}\left[\hat{E}^{\alpha}(t',t)\hat{E}^{\beta\dagger}(t',t)\right] = \delta^{\alpha\beta} \qquad \forall t,t' \in \mathbb{R}. \tag{2.59}$$

Aplicando esta condición sobre los autovectores definidos para el caso en el que $t' \to t$ en (2.52), se llega a que:

- Caso $\alpha \neq \beta = N^2$:

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{K}^{\alpha}\frac{1}{\sqrt{N}}\hat{I}_N\right] = \frac{1}{\sqrt{N}}\mathrm{Tr}\left[\hat{K}^{\alpha}\right] = 0 \overset{(*)}{\Longrightarrow} \mathrm{Tr}\left[\hat{K}^{\alpha}\right] = 0, \tag{2.60}$$

  donde en $(*)$ se ha usado que $\frac{1}{\sqrt{N}} \neq 0$.

- Caso $\alpha \neq N^2, \beta \neq N^2$: De manera directa se tiene que

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{K}^{\alpha}\hat{K}^{\beta\dagger}\right] = \delta^{\alpha\beta}. \tag{2.61}$$

- Caso $\alpha = \beta = N^2$. Estudiar este caso no resultará tan directo como los dos anteriores, puesto que para obtener una condición sobre $\hat{B}(t)$ hemos de derivar la ecuación (2.59) respecto de t'. Por la linealidad de las aplicaciones traza y derivada se tiene que

$$\mathrm{Tr}\left[\frac{\partial \hat{E}^{N^2}(t',t)}{\partial t'}\hat{E}^{N^2\dagger}(t',t) + \hat{E}^{N^2}(t',t)\frac{\partial \hat{E}^{N^2\dagger}(t',t)}{\partial t'}\right] = 0 \qquad \forall t,t' \in \mathbb{R}. \tag{2.62}$$

  Como se verifica para todo $t,t' \in \mathbb{R}$, consideraremos el caso $t' \to t$, de forma que la expresión (2.62) nos queda

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{B}(t)\frac{1}{\sqrt{N}}\hat{I}_N^{\dagger} + \frac{1}{\sqrt{N}}\hat{I}_N\hat{B}^{\dagger}(t)\right] = \frac{1}{\sqrt{N}}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}(t) + \hat{B}^{\dagger}(t)\right] = 0. \tag{2.63}$$

Por tanto se concluye que la propiedad que verifica el operador $\hat{B}(t)$ es

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{B}(t) + \hat{B}^{\dagger}(t)\right] = 0. \tag{2.64}$$

Capítulo 3

Obtención de ecuaciones tipo Lindblad mediante un modelo microscópico

Este capítulo tiene como objetivo la obtención de ecuaciones tipo Lindblad a partir de modelos microscópicos. Este desarrollo se llevará a cabo para el caso de sistemas con hamiltonianos independientes del tiempo, utilizando las técnicas expuestas en [5].

El super-sistema cuántico de estudio consistirá en la composición de un sistema cuántico abierto de dimensión finita, que llamaremos S, y un baño con infinitos grados de libertad, que llamaremos B. Como ya se adelantó en la sección 1.2, en el caso del super-sistema en consideración la evolución temporal de éste vendrá descrita por la ecuación de Liouville-von Neumann. Sin embargo, la evolución del sistema S no vendrá dada por esta ecuación debido a la influencia del baño sobre él.

El hamiltoniano que describe al super-sistema viene dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_B + \lambda \hat{V}, \tag{3.1}$$

donde $\hat{H}_S$ corresponde al sistema abierto, $\hat{H}_B$ al baño, $\hat{V}$ modela la interacción entre ambos y λ nos determina la intensidad con la que se da dicha interacción.

Por otro lado, como el operador densidad del sistema completo, $\hat{\rho}(t) \in L_{\mathcal{H}}$, obedece la ecuación de Liouville-von Neumann, para el hamiltoniano descrito en (3.1) se tiene que

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}(t)\right] = \left[\hat{H}_S \otimes \hat{I}_B, \hat{\rho}(t)\right] + \left[\hat{I}_S \otimes \hat{H}_B, \hat{\rho}(t)\right] + \lambda\left[\hat{V}, \hat{\rho}(t)\right]. \tag{3.2}$$

Como nos interesa conocer la influencia que tiene el potencial de interacción sobre la evolución del sistema, para poder llevar a cabo un desarrollo perturbativo trabajaremos en la imagen de interacción (ver anexo A). De esta forma eliminaremos toda la evolución que no es debida a la propia interacción entre los sistemas.

Puesto que los hamiltonianos $\hat{H}_S$ y $\hat{H}_B$ son independientes del tiempo, los operadores de evolución asociados a los mismos vendrán dados por las expresiones:

$$\hat{U}_S(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S(t-t_0)} \quad \text{y} \quad \hat{U}_B(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B(t-t_0)}, \tag{3.3}$$

donde $\hat{U}_S(t,t_0)$ se corresponde con el operador de evolución del sistema S y $\hat{U}_B(t,t_0)$ con el del baño. La transformación unitaria para pasar a la imagen de interacción será por tanto,

$$\hat{U}_0(t,t_0) = \hat{U}_S(t,t_0) \otimes \hat{U}_B(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S+\hat{H}_B\right)(t-t_0)} \tag{3.4}$$

Obtenemos entonces que el operador densidad del sistema total en la imagen de interacción, que de aquí en adelante denotaremos como $\hat{\rho}^I(t)$, vendrá dado por

$$\hat{\rho}^I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{\rho}(t)\hat{U}_0(t,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S+\hat{H}_B\right)(t-t_0)}\hat{\rho}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S+\hat{H}_B\right)(t-t_0)}. \tag{3.5}$$

Por tanto, tendremos que la ecuación de evolución del operador densidad total en la imagen de interacción viene dada por

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}^I(t)}{dt} = \lambda\left[\hat{V}^I(t), \hat{\rho}^I(t)\right], \tag{3.6}$$

donde $\hat{V}^I(t)$ es el potencial de interacción entre los sistemas en la imagen de interacción.

Además, se tendrá que el operador densidad reducido en la imagen de interacción vendrá dado por

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_S^I(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S(t-t_0)}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S(t-t_0)} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S(t-t_0)}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{\rho}(t)\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S(t-t_0)} \\ &\overset{(*)}{=} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S(t-t_0)}\mathrm{Tr_B}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B(t-t_0)}\hat{\rho}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B(t-t_0)}\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S(t-t_0)} \\ &\overset{(**)}{=} \mathrm{Tr_B}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S+\hat{H}_B\right)(t-t_0)}\hat{\rho}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S+\hat{H}_B\right)(t-t_0)}\right] = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{\rho}^I(t)\right], \end{aligned} \tag{3.7}$$

donde en $(*)$ hemos aplicado la propiedad $\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{B}\hat{C}\hat{A}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{C}\hat{A}\hat{B}\right]$ (anexo C) y en $(**)$ que la traza parcial sólo actúa sobre elementos de $L_{\mathcal{H}_B}$.

Antes de continuar, introduciremos la primera hipótesis que será utilizada durante el capítulo:

Hipótesis 1

Supondremos que siempre existe un tiempo privilegiado, t_0, en el que el sistema se encuentra factorizado, esto es, $\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_S(t_0) \otimes \hat{\rho}_B$. Sin pérdida de generalidad, podemos considerar dicho instante de tiempo como el inicial, es decir, $t_0 = 0$. De esta forma la condición inicial del estado será

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_B, \tag{3.8}$$

donde el operador densidad correspondiente al baño vendrá dado por

$$\hat{\rho}_B = e^{-\beta \hat{H}_B} \left[\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta \hat{H}_B}\right)\right]^{-1} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}, \tag{3.9}$$

con T es la temperatura absoluta y k_B la constante de Boltzmann. Además, por la propia construcción de la imagen de interacción, sabemos que se verifica que $\hat{\rho}^I(0) = \hat{\rho}(0)$.

A continuación, para obtener la evolución temporal del operador densidad reducido, que se define como $\hat{\rho}_S(t) = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{\rho}(t)\right]$ (ver sección 1.1.1), nos basaremos en la *teoría de proyectores*. Comencemos definiendo el siguiente superoperador proyector que a cada operador $\hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}$ con traza bien definida le asigna

$$\mathscr{P}\hat{A} = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B. \tag{3.10}$$

De manera análoga, se puede definir también el superoperador recíproco como aquel que a cada operador $\hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}$ con traza bien definida le asigna

$$Q\hat{A} = \hat{A} - \mathscr{P}\hat{A}, \tag{3.11}$$

el cual también es un proyector. Por la definición de estos dos superoperadores se puede observar que $\mathscr{P} + Q = \mathscr{I}$, con $\mathscr{I}$ el superoperador identidad. En el anexo B.1 se encuentra la prueba de que $\mathscr{P}$ y Q son proyectores ortogonales.

Definamos los dos siguientes operadores:

$$\hat{r}_1(t) = \mathscr{P}\hat{\rho}^I(t), \tag{3.12}$$

$$\hat{r}_2(t) = Q\hat{\rho}^I(t) = \hat{\rho}^I(t) - \hat{r}_1(t). \tag{3.13}$$

3.1. Ecuación de evolución de los operadores $\hat{r}_1(t)$ y $\hat{r}_2(t)$

Nos interesa conocer la evolución del sistema cuántico abierto; podemos observar que por como se ha definido $\hat{r}_1(t)$, conociendo su evolución, se obtendría la información deseada del sistema. Por tanto, para determinar las ecuaciones de evolución que satisfacerán los operadores $\hat{r}_1(t)$ y $\hat{r}_2(t)$ hemos de tener en cuenta que

$$\frac{d\hat{r}_1(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\left[\mathscr{P}\hat{\rho}^I(t)\right] \stackrel{(*)}{=} \mathscr{P}\dot{\hat{\rho}}^I(t), \tag{3.14}$$

$$\frac{d\hat{r}_2(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\left[Q\hat{\rho}^I(t)\right] \stackrel{(*)}{=} \dot{\hat{\rho}}^I(t) - \dot{\hat{r}}_1(t), \tag{3.15}$$

donde en $(*)$ se ha usado tanto la definición del operador traza parcial como la linealidad del operador derivada. De manera que si usamos ahora la expresión (3.6) en estas ecuaciones llegamos a que

$$\frac{d\hat{r}_1(t)}{dt} = -i\frac{\lambda}{\hbar}\mathscr{P}\left[\hat{V}^I(t), \hat{\rho}^I(t)\right], \tag{3.16}$$

$$\frac{d\hat{r}_2(t)}{dt} = -i\frac{\lambda}{\hbar}\left[\hat{V}^I(t), \hat{\rho}^I(t)\right] + i\frac{\lambda}{\hbar}\mathscr{P}\left[\hat{V}^I(t), \hat{\rho}^I(t)\right]. \tag{3.17}$$

Por esclarecer la notación, introduciremos el superoperador $\mathscr{L}(t)$ que a cada operador $\hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S\otimes\mathcal{H}_B}$ le asigna

$$\mathscr{L}(t)\hat{A} = \frac{-1}{\hbar}\left[\hat{V}^I(t), \hat{A}\right]. \tag{3.18}$$

De forma que las ecuaciones de los operadores $\hat{r}_1(t)$, (3.16), y $\hat{r}_2(t)$, (3.17), se pueden escribir como

$$\frac{d\hat{r}_1(t)}{dt} = i\lambda\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\hat{\rho}^I(t), \tag{3.19}$$

$$\frac{d\hat{r}_2(t)}{dt} = i\lambda\mathscr{L}(t)\hat{\rho}^I(t) - \dot{\hat{r}}_1(t) = i\lambda\mathscr{L}(t)\hat{\rho}^I(t) - i\lambda\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\hat{\rho}^I(t). \tag{3.20}$$

A continuación, vamos a explicitar la segunda hipótesis que se tendrá en cuenta en este trabajo:

Hipótesis 2

Supondremos que para todo operador densidad, $\hat{\rho}(t) \in L_H$, se verifica que

$$\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{P}\hat{\rho}(t) = 0. \tag{3.21}$$

Estudiemos qué consecuencias tiene esta hipótesis. Para ello, escribamos de forma explícita las definiciones de los superoperadores $\mathscr{P}$ y $\mathscr{L}(t)$, de forma que

$$\begin{aligned}\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{P}\hat{\rho}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}^I(t),\hat{\rho}_S(t)\otimes\hat{\rho}_B\right]\otimes\hat{\rho}_B = -\frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}^I(t)\hat{\rho}_S(t)\otimes\hat{\rho}_B\right]\otimes\hat{\rho}_B \\ &+\frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{\rho}_S(t)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(t)\right]\otimes\hat{\rho}_B \overset{(*)}{=} -\frac{i}{\hbar}\left[\mathrm{Tr_B}\left(\hat{V}^I(t)\hat{\rho}_B\right),\hat{\rho}_S(t)\right]\otimes\hat{\rho}_B = 0\end{aligned}$$

donde en $(*)$ se ha usado que el operador traza parcial de B sólo actúa sobre elementos de $L_{\mathcal{H}_B}$. Como esto se verifica para todo operador $\hat{\rho}(t)\in L_{\mathcal{H}}$, se ha de cumplir también para cualquier operador $\hat{\rho}_S(t)\in L_{\mathcal{H}_S}$; esto supondrá que se ha de verificar que $\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}^I(t)\hat{\rho}_B\right]=0$. Además, si esto no se cumple siempre podemos redefinir el hamiltoniano de interacción para que esto se verifique (ver apéndice B.3 para la demostración de esto último).

Una vez ya se ha detallado la segunda hipótesis de este capítulo, continuemos con las ecucaiones de evolución. Introduzcamos el superoperador identidad ($\mathscr{I}=\mathscr{P}+Q$) entre los operadores $\mathscr{L}(t)$ y $\hat{\rho}^I(t)$ en la ecuación (3.19):

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{r}_1(t)}{dt} &= i\lambda\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\left[\mathscr{P}+Q\right]\hat{\rho}^I(t) = i\lambda\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{P}\hat{\rho}^I(t) \\ &+ i\lambda\mathscr{P}\mathscr{L}(t)Q\hat{\rho}^I(t)\overset{(*)}{=} i\lambda\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\hat{r}_2(t),\end{aligned}\tag{3.22}$$

donde en $(*)$ se ha usado la hipótesis 2 descrita anteriormente. De manera análoga, para el caso de la ecuación de evolución del operador $\hat{r}_2(t)$, se tiene que introduciendo el operador identidad entre los operadores $\mathscr{L}(t)$ y $\hat{\rho}^I(t)$ en la ecuación (3.20) y usando lo deducido para $\hat{r}_1(t)$ se llega a que

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{r}_2(t)}{dt} &= i\lambda\mathscr{L}(t)\left[\mathscr{P}+Q\right]\hat{\rho}^I(t) - \dot{\hat{r}}_1(t) \\ &\overset{(*)}{=} i\lambda\mathscr{L}(t)\left[\mathscr{P}+Q\right]\hat{\rho}^I(t) - i\lambda\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\hat{r}_2(t) \\ &= i\lambda\mathscr{L}(t)\hat{r}_1(t) + i\lambda\left(\mathscr{I}-\mathscr{P}\right)\mathscr{L}(t)\hat{r}_2(t) \\ &= i\lambda\left(\mathscr{P}+Q\right)\mathscr{L}(t)\hat{r}_1(t) + i\lambda\left(\mathscr{I}-\mathscr{P}\right)\mathscr{L}(t)\hat{r}_2(t) \\ &\overset{(**)}{=} i\lambda Q\mathscr{L}(t)\hat{r}_1(t) + i\lambda Q\mathscr{L}(t)\hat{r}_2(t),\end{aligned}\tag{3.23}$$

donde en $(*)$ se ha usado la ecuación de evolución del operador $\hat{r}_1(t)$ deducida y en $(**)$ se ha vuelto a utilizar la hipótesis 2.

Una vez ya tenemos de manera explícita las ecuaciones de evolución de ambos operadores, procederemos a resolverlas. Como tenemos que las ecuaciones de estos operadores están acopladas, pero la que realmente nos interesa es la del operador $\hat{r}_1(t)$, comenzaremos resolviendo primero la ecuación (3.23) considerando el término de $\hat{r}_1(t)$ como una inhomogeneidad. Dicha resolución se ha llevado a cabo mediante el procedimiento de variación de parámetros (ver anexo B.2 para la resolución detallada) y cuya solución viene dada por

$$\hat{r}_2(t) = \mathscr{G}(t,0)\hat{r}_2(0) + i\lambda \int_0^t ds\, \mathscr{G}(t,s)Q\mathscr{L}(s)\hat{r}_1(s), \tag{3.24}$$

donde $\mathscr{G}(t,s)$ se corresponde con el propagador obtenido al resolver la ecuación diferencial homogénea de la expresión (3.23) y es de la forma

$$\mathscr{G}(t,s) = \mathscr{T}\left[e^{i\lambda\int_s^t dt' Q\mathscr{L}(t')}\right], \tag{3.25}$$

donde $\mathscr{T}$ se conoce como el operador ordenación temporal y se define sobre dos operadores arbitrarios $\hat{A}, \hat{B} \in L_{\mathcal{H}}$ como

$$\mathscr{T}\left[\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\right] = \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2) \text{ si } t_1 \geq t_2, \\ \hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1) \text{ si } t_1 < t_2. \end{cases} \tag{3.26}$$

Una vez ya se ha resuelto la ecuación diferencial correspondiente al operador $\hat{r}_2(t)$, nos centraremos en la del operador $\hat{r}_1(t)$, es decir, en la ecuación (3.22). Luego, sin más que introducir la solución obtenida del operador $\hat{r}_2(t)$, (3.24), en la ecuación de evolución de $\hat{r}_1(t)$, (3.22), se tiene que

$$\frac{d\hat{r}_1(t)}{dt} = i\lambda\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\hat{r}_2(0) - \lambda^2\int_0^t ds \mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,s)Q\mathscr{L}(s)\hat{r}_1(s) \tag{3.27}$$

A continuación, estudiemos el primer término de esta ecuación; veamos que éste es nulo:

$$\begin{aligned}
\mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\hat{r}_2(0) &= \mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)Q\hat{\rho}^I(0) \\
&\overset{(1)}{=} \mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\hat{\rho}^I(0) - \mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\mathscr{P}\hat{\rho}^I(0) \\
&\overset{(2)}{=} \mathrm{Tr_B}\left[\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\hat{\rho}^I(0)\right]\otimes\hat{\rho}_B - \mathrm{Tr_B}\left[\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\mathscr{P}\hat{\rho}^I(0)\right]\otimes\hat{\rho}_B \\
&\overset{(3)}{=} \mathrm{Tr_B}\left[\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\hat{\rho}_S(0)\otimes\hat{\rho}_B\right]\otimes\hat{\rho}_B - \mathrm{Tr_B}\left[\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\mathrm{Tr_B}\left[\hat{\rho}^I(0)\right]\otimes\hat{\rho}_B\right]\otimes\hat{\rho}_B \\
&\overset{(4)}{=} \mathrm{Tr_B}\left[\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\hat{\rho}_S(0)\otimes\hat{\rho}_B\right]\otimes\hat{\rho}_B - \mathrm{Tr_B}\left[\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\hat{\rho}_S(0)\otimes\hat{\rho}_B\right]\otimes\hat{\rho}_B = 0
\end{aligned}$$

donde en (1) hemos aplicado que $Q = \mathscr{I} - \mathscr{P}$, en (2) se ha escrito explícitamente la definición del proyector $\mathscr{P}$, en (3) hemos aplicado la hipótesis 1, y por último en (4) que $\mathrm{Tr_B}\left[\hat{\rho}^I(0)\right] = \hat{\rho}_S(0)$, por la propia definición de operador densidad reducido.

De esta forma, la ecuación de evolución del operador $\hat{r}_1(t)$ nos queda

$$\frac{d\hat{r}_1(t)}{dt} = -\lambda^2 \int_0^t ds \mathscr{P}\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,s)Q\mathscr{L}(s)\hat{r}_1(s). \tag{3.28}$$

Además, a través de esta ecuación de evolución, por la propia definición del operador $\hat{r}_1(t)$ vista en (3.12), se tiene que la ecuación de evolución del operador densidad reducido en la imagen de interacción viene dada por

$$\frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} = -\lambda^2 \int_0^t ds \mathrm{Tr}_\mathrm{B} \left[\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,s)Q\mathscr{L}(s)\mathscr{P}\hat{\rho}^I(s)\right]. \tag{3.29}$$

3.2. Límite de acoplo débil

En esta sección del capítulo, con el objetivo de deducir que la ecuación de evolución del operador $\hat{\rho}_S^I(t)$ es una ecuación de tipo Lindblad, introduciremos el concepto de *límite de acoplo débil*.

Este límite consiste en tomar $\lambda \to 0$ y $t \to \infty$, manteniendo constante $\lambda^2 t$. A priori, se podría decir que considerando $\lambda \to 0$ no existiría interacción, esto es cierto si el tiempo en cuestión es fijo. Sin embargo, al considerar una interacción muy pequeña pero que actúa sobre el sistema mucho tiempo sí va a tener un efecto sobre la evolución del sistema.

3.2.1. Preliminares al límite

En primer lugar, integrando directamente la expresión (3.29) entre 0 y t se obtiene que

$$\hat{\rho}_S^I(t) - \hat{\rho}_S(0) = -\lambda^2 \int_0^t ds \int_0^s du \mathrm{Tr}_\mathrm{B} \left[\mathscr{L}(s)Q\mathscr{L}(u)\mathscr{P}\hat{\rho}^I(u)\right]. \tag{3.30}$$

Ahora bien, ya se vio que el operador $\hat{\rho}^I(t)$ satisface la ecuación de Liouville-von Neumann, que venía dada por la expresión (3.6). Haciendo integración directa de está ecuación entre dos instantes de tiempo arbitrarios s y u se llega a

$$i\hbar \left[\hat{\rho}^I(s) - \hat{\rho}^I(u)\right] = \lambda \int_u^s dt \left[\hat{V}^I(t), \hat{\rho}^I(t)\right]. \tag{3.31}$$

A través de esta expresión, se observa que la diferencia entre $\hat{\rho}^I(s)$ y $\hat{\rho}^I(u)$ es de orden λ; mientras que la ecuación (3.30) es de orden λ^2. Esto supone que si en lugar de considerar $\hat{\rho}^I(u)$ en la expresión (3.30), consideramos $\hat{\rho}^I(s)$ nos introduciría un término de orden λ^3, el cual será despreciable al aplicar el límite de acoplo débil. Es por eso, que escribimos la ecuación (3.30) como

$$\hat{\rho}_S^I(t) - \hat{\rho}_S(0) = -\lambda^2 \int_0^t ds \int_0^s du \mathrm{Tr_B}\left[\mathscr{L}(s)Q\mathscr{L}(u)\mathscr{P}\hat{\rho}^I(s)\right] + \mathscr{O}(\lambda^3). \tag{3.32}$$

A continuación, escribiendo las expresiones explícitas de los superoperadores $\mathscr{L}(t)$, Q y $\mathscr{P}$ y además, realizaremos el cambio de variable $u \to s-u$, la ecuación anterior nos queda

$$\hat{\rho}_S^I(t) = \hat{\rho}_S(0) - \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t ds \int_0^s du \mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}^I(s), \left[\hat{V}^I(s-u), \hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right]\right] + \mathscr{O}(\lambda^3). \tag{3.33}$$

Descomposición del potencial de interacción $\hat{V}^I(t)$

Antes de proseguir con la ecuación de evolución del operador densidad reducido en sí, vamos a centrarnos en la descomposición que se llevará a cabo del potencial de interacción, $\hat{V}^I(t)$. Mencionar de nuevo que lo desarrollado en esta sección se ha llevado a cabo usando los razonamientos expuestos en [5].

En primer lugar, como se ha demostrado en el apéndice B.4.1, el operador $\hat{V}$, que nos determina la interacción entre el sistema de interés y el baño, acepta la siguiente descomposición:

$$\hat{V} = \sum_{k=1}^{2N} \hat{A}_k \otimes \hat{B}_k, \tag{3.34}$$

donde $\hat{A}_k \in L_{\mathcal{H}_S}$ y $\hat{B}_k \in L_{\mathcal{H}_B}$ $\forall k = 1, ..., 2N$ son operadores autoadjuntos.

A continuación, comenzaremos estudiando los operadores $\hat{A}_k$ de la descomposición anterior. Para ello, supondremos que el espectro del operador hamiltoniano $\hat{H}_S$ es discreto y denotaremos a sus autofunciones asociadas como $\{|\psi_\epsilon\rangle\}$ con autovalores, ϵ. De esta forma, es legítimo definir el siguiente operador:

$$\hat{A}_k(\omega) = \sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} |\psi_\epsilon\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \langle \psi_{\epsilon'}| \qquad \forall k = 1, ..., 2N. \tag{3.35}$$

Observemos que los operadores $\hat{A}_k(\omega)$, así definidos, verifican que

$$\sum_\omega \hat{A}_k(\omega) = \sum_{\epsilon,\epsilon'} |\psi_\epsilon\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \langle \psi_{\epsilon'}| = \hat{A}_k \qquad \forall k = 1, ..., 2N. \tag{3.36}$$

También es sencillo ver que por la propia definición de los operadores $\hat{A}_k(\omega)$, se tiene que $\hat{A}_k^\dagger(\omega) = \hat{A}_k(-\omega)\ \ \forall k = 1, ..., 2N$.

Asimismo, como consecuencia de que los operadores $\hat{A}_k$ sean hermíticos, se puede probar que $\sum_\omega \hat{A}_k^\dagger(\omega) = \hat{A}_k$, puesto que

$$\hat{A}_k = \hat{A}_k^\dagger = \left[\sum_\omega \hat{A}_k(\omega)\right]^\dagger = \sum_\omega \hat{A}_k^\dagger(\omega) \tag{3.37}$$

Una vez ya hemos definido estos operadores, procedemos a desarrollar el potencial $\hat{V}$ en la imagen de interacción usando la descomposición propuesta, (3.34):

$$\begin{aligned} \hat{V}^I(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S+\hat{H}_B\right)t}\ \hat{V}\ e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S+\hat{H}_B\right)t} = e^{\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S+\hat{H}_B\right)t}\left(\sum_k \hat{A}_k \otimes \hat{B}_k\right) e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S+\hat{H}_B\right)t} \\ &\overset{(*)}{=} \sum_k \left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{A}_k e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\right] \otimes \left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t}\hat{B}_k e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t}\right] = \sum_k \hat{A}_k^I(t) \otimes \hat{B}_k^I(t), \end{aligned} \tag{3.38}$$

donde en $(*)$ se ha hecho uso de que $\hat{H}_S$ sólo actúa sobre elementos de $\mathcal{H}_S$, y respectivamente $\hat{H}_B$ sobre elementos de $\mathcal{H}_B$.

Para poder escribir el potencial de interacción en la imagen de interacción, observamos que es necesario especificar cómo se describirán los operadores $\hat{A}_k$ en dicha imagen. También será necesario conocer la de los operadores $\hat{B}_k$, pero eso se detallará más adelante en el trabajo.

Por construcción de la imagen de interacción, como $\hat{A}_k \in L_{\mathcal{H}_S}\ \forall k$, se tiene que

$$\begin{aligned} \hat{A}_k^I(\omega) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{A}_k(\omega) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} = \sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\left|\psi_\epsilon\right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_{\epsilon'}\right\rangle \left\langle \psi_{\epsilon'}\right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} \\ &\overset{(*)}{=} \sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t}\left|\psi_\epsilon\right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_{\epsilon'}\right\rangle \left\langle \psi_{\epsilon'}\right| e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon' t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t} \sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} \left|\psi_\epsilon\right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_{\epsilon'}\right\rangle \left\langle \psi_{\epsilon'}\right| \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t}\hat{A}_k(\omega), \end{aligned} \tag{3.39}$$

donde en $(*)$ se ha hecho uso de la definición de la función exponencial y de que $\{|\psi_\epsilon\rangle\}$ son las autofunciones del hamiltoniano $\hat{H}_S$. Análogamente, los operadores $\hat{A}_k^\dagger(\omega)$ en la imagen de interacción vienen dados por

$$\left(\hat{A}_k^\dagger\right)^I(\omega) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{A}_k(-\omega)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} = e^{\frac{i}{\hbar}\omega t}\hat{A}_k^\dagger(\omega) \quad \forall k = 1, ..., 2N. \tag{3.40}$$

De esta forma, teniendo en cuenta la ecuación (3.38) y que el operador $\hat{A}_k$ es autoadjunto (y como consecuencia $\hat{A}_k^I(t)$), se tiene que el potencial $\hat{V}$ en la imagen de interacción puede descomponerse de las dos siguientes formas:

$$\hat{V}^I(t) = \sum_{\omega,k} e^{-i\omega t}\hat{A}_k(\omega) \otimes \hat{B}_k^I(t) \tag{3.41}$$

$$= \sum_{\omega,k} e^{i\omega t}\hat{A}_k^\dagger(\omega) \otimes \left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger (t). \tag{3.42}$$

Recapitulando, volviendo ahora a la ecuación de evolución de $\hat{\rho}^I(t)$ que se tenía, (3.33), y utilizando la descomposición del potencial dada por (3.41) para escribir $\hat{V}^I(s-u)$ y (3.42) para $\hat{V}^I(s)$ se obtiene que

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_S^I(t) = \hat{\rho}_S(0) &+ \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t ds \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}\Gamma_{kl}^s(\omega)\left[\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S^I(s), \hat{A}_k^\dagger(\omega')\right] \\ &+ \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t ds \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega-\omega')s}\Gamma_{lk}^{s*}(\omega)\left[\hat{A}_l(\omega'), \hat{\rho}_S^I(s)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\right] + \mathscr{O}(\lambda^3),\end{aligned} \tag{3.43}$$

donde se han definido las magnitudes $\Gamma_{kl}^s(\omega)$ como:

$$\Gamma_{kl}^s(\omega) = \int_0^s du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(u)\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right]. \tag{3.44}$$

Con el fin de facilitar la lectura del trabajo, la deducción explícita de la ecuación (3.43) se ha llevado a cabo en el apéndice B.4.3.

3.2.2. Implementación del límite

En esta sección del capítulo, llevaremos a cabo la implementación del límite de acoplo débil. En primer lugar, si observamos detenidamente la expresión (3.43), se tiene que al tomar límite cuando $\lambda \to 0$ con un tiempo t fijo se verifica que $\hat{\rho}_S^I(t) = \hat{\rho}_S(0)$. Esto se debe a que al estar trabajando en la imagen de interacción, hemos eliminado la dependencia temporal rápida del operador densidad reducido. Esto nos hace llegar a la conclusión de que la variable en la que varía el operador densidad reducido no es en t, sino una nueva variable temporal de la forma $\tau = \lambda^2 t$.

Destacar que estas variables temporales t y τ se corresponden con dos escalas de tiempo diferentes. Por un lado, se tiene que t es una variable de tiempo *rápida*, que va asociada al hamiltoniano del sistema total (sin tener en cuenta la interacción). Mientras que, τ se corresponde con la variable temporal *lenta* y está asociada al término de interacción entre el sistema y el baño. Esta última escala de tiempo se dice que es lenta puesto que, al llevar a cabo el límite de acoplo débil, las frecuencias asociadas son muy pequeñas; y esto supondrá que el tiempo característico es muy largo.

De este modo, vamos a expresar el operador densidad reducido en la nueva variable τ para estudiar así su evolución. Con el objetivo de esclarecer la notación, para cada valor λ fijo definiremos el siguiente operador:

$$\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau) \equiv \hat{\rho}_S^I\left(\frac{\tau}{\lambda^2}\right), \tag{3.45}$$

donde se puede observar que $\tilde{\hat{\rho}}_S^I(0) = \hat{\rho}_S^I(0)$. Por tanto, realizando el cambio de variable ya mencionado y también $\sigma = \lambda^2 s$, se puede escribir la ecuación de evolución del operador densidad reducido, (3.43), en función de estas nuevas variables temporales y del nuevo operador como

$$\begin{aligned}\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau) = \hat{\rho}_S(0) &+ \frac{1}{\hbar^2}\int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)\sigma/\lambda^2}\Gamma_{kl}^{\sigma/\lambda^2}(\omega)\left[\hat{A}_l(\omega)\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\sigma), \hat{A}_k^\dagger(\omega')\right] \\ &+ \frac{1}{\hbar^2}\int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega-\omega')\sigma/\lambda^2}\Gamma_{lk}^{\sigma/\lambda^2 *}(\omega)\left[\hat{A}_l(\omega'), \tilde{\hat{\rho}}_S^I(\sigma)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\right] + \mathscr{O}(\lambda),\end{aligned} \tag{3.46}$$

donde se ha cambiado de manera explícita las expresiones en las que aparecían s y t y los correspondientes diferenciales: $ds \longrightarrow \frac{1}{\lambda^2}d\sigma$.

A continuación, se aplicará el límite de acoplo débil de manera explícita, $\lambda \to 0$, manteniendo constantes τ y σ en la expresión (3.46). No obstante, antes de proseguir, será necesario enunciar el *Lema de Riemann Lebesgue*, cuya demostración se encuentra en el apéndice B.5:

Proposición 3.2.1. *Sea $f(t) \in L^1([a,b])$ (función integrable), entonces se tiene que:*

$$\lim_{x\to\infty}\int_a^b e^{ixt}f(t)dt = 0. \tag{3.47}$$

Como consecuencia de este resultado, se puede observar que todos los términos en los que se verifica que $\omega \neq \omega'$, se anulan al tomar el límite. Mientras que para los términos en los que se tiene la igualdad $\omega = \omega'$ será necesario imponer que las integrales de (3.44) sean convergentes, puesto que al tomar el límite expuesto se tiene que las integrales

$$\Gamma_{kl}^\infty(\omega) = \int_0^\infty du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(u)\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right] \tag{3.48}$$

no tienen porqué ser convergentes.

Para asegurar dicha convergencia, comenzaremos definiendo las *funciones de correlación* como

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(u)\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right]. \tag{3.49}$$

A continuación, se supondrá que el espectro de energías correspondientes al operador $\hat{H}_B$ es continuo. De manera que podemos definir los operadores $\hat{B}_k$ de las siguiente forma:

$$\hat{B}_k = \int_{-a}^{a} d\omega \hat{B}_k(\omega) \quad \forall k, \tag{3.50}$$

donde a se corresponde con el mayor valor posible de ω, pudiendo ser incluso infinito; barriendo así todos los posibles valores de ω y donde los operadores $\hat{B}_k(\omega)$ se definen como

$$\hat{B}_k(\omega) = \int d\epsilon \left|\phi_\epsilon\right\rangle \left\langle \phi_\epsilon \middle| \hat{B}_k \middle| \phi_{\epsilon+\omega} \right\rangle \left\langle \phi_{\epsilon+\omega}\right|, \tag{3.51}$$

donde $\{|\phi_\epsilon\rangle\}$ son las autofunciones correspondientes al operador $\hat{B}_k$ asociadas al autovalor ϵ. De esta forma, se tiene que el operador $\hat{B}_k$ en la imagen de interacción viene dado por

$$\begin{aligned}
\hat{B}_k^I(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t}\hat{B}_k e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t} = \int_{-a}^{a} d\omega\ e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t}\hat{B}_k(\omega) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t} \\
&= \int_{-a}^{a} d\omega\ e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t}\left|\phi_\epsilon\right\rangle \left\langle \phi_\epsilon \middle| \hat{B}_k \middle| \phi_{\epsilon+\omega} \right\rangle \left\langle \phi_{\epsilon+\omega}\right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t} \\
&\overset{(*)}{=} \int_{-a}^{a} d\omega\ e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t}\left|\phi_\epsilon\right\rangle \left\langle \phi_\epsilon \middle| \hat{B}_k \middle| \phi_{\epsilon+\omega} \right\rangle \left\langle \phi_{\epsilon+\omega}\right| e^{-\frac{i}{\hbar}(\epsilon+\omega) t} \\
&= \int_{-a}^{a} d\omega\ e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t}\left|\phi_\epsilon\right\rangle \left\langle \phi_\epsilon \middle| \hat{B}_k \middle| \phi_{\epsilon+\omega} \right\rangle \left\langle \phi_{\epsilon+\omega}\right| \\
&= \int_{-a}^{a} d\omega\ e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t}\hat{B}_k(\omega),
\end{aligned} \tag{3.52}$$

donde en $(*)$ se ha usado que $\{|\phi_\epsilon\rangle\}$ son autoestados de $\hat{H}_B$ y la definición de la función exponencial.

De esta forma, tendremos que las funciones de correlación vienen dadas por

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(u)\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right] = \int_{-a}^{a} d\omega e^{-\frac{i}{\hbar}\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k(\omega)\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right]. \tag{3.53}$$

Aplicando el *Lema de Riemann Lebesgue* a las funciones de correlación, ya se tendría la convergencia deseada.

Finalmente, tomando límite $\lambda \longrightarrow 0$, se tiene que la ecuación (3.46) se puede escribir de manera más compacta como

$$\begin{aligned}\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau) = \hat{\rho}_S(0) + \frac{1}{\hbar^2}\int_0^\tau d\sigma \sum_\omega \sum_{k,l} \Gamma_{kl}^\infty(\omega)\left[\hat{A}_l(\omega)\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\sigma), \hat{A}_k^\dagger(\omega)\right] \\ + \frac{1}{\hbar^2}\int_0^\tau d\sigma \sum_\omega \sum_{k,l} \Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega)\left[\hat{A}_l(\omega), \tilde{\hat{\rho}}_S^I(\sigma)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\right] + \mathscr{O}(\lambda),\end{aligned} \tag{3.54}$$

donde los coeficientes $\Gamma_{kl}^\infty(\omega)$ y $\Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega)$ se corresponden con

$$\Gamma_{kl}^\infty(\omega) = \int_0^\infty du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(u)\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right] \tag{3.55}$$

$$\Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega) = \int_0^\infty du\ e^{-i\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(-u)\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right]. \tag{3.56}$$

Podemos observar que (3.56) es el conjugado de (3.55), esto se puede ver gracias a que el operador densidad del baño conmuta con el operador evolución de este sistema (por la propia definición de $\hat{\rho}_B$) y a la propiedad de que traza es invariante ante traslaciones cíclicas (probado en el anexo C para el caso de 3 operadores).

3.2.3. Solución tipo Lindblad

Recordemos que el objetivo principal de este capítulo es demostrar que la evolución temporal del sistema en cuestión bajo la influencia del baño térmico obedece una ecuación tipo Lindblad. Para llegar a dicha ecuación de evolución, comenzaremos aplicando el siguiente resultado:

Proposición 3.2.2. *Sea $\hat{A} \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C})$ arbitraria, sabemos que siempre se puede escribir como la composición de una matriz hermítica y otra antihermítica, es decir,*

$$\hat{A} = \hat{A}_{herm} + \hat{A}_{antiher}, \tag{3.57}$$

donde las matrices hermítica y antihermítica vienen dadas por

$$\begin{aligned}\hat{A}_{herm} &= \frac{1}{2}\left[\hat{A} + \hat{A}^\dagger\right] \ \ y \\ \hat{A}_{antiher} &= \frac{1}{2}\left[\hat{A} - \hat{A}^\dagger\right].\end{aligned} \tag{3.58}$$

Por tanto, se tiene que realizando la descomposición explicitada sobre la matriz de los coeficientes $\Gamma_{kl}^\infty(\omega)$, que denotaremos como $\hat{\Gamma}^\infty(\omega)$, se obtiene que

$$\hat{\Gamma}^\infty(\omega) = \hat{\gamma}(\omega) + \hat{S}(\omega), \tag{3.59}$$

donde la matriz $\hat{\gamma}(\omega)$ se corresponderá con la parte hermítica, es decir, $\hat{\gamma}(\omega) = \hat{\gamma}^\dagger(\omega)$ y $\hat{S}(\omega)$ con la antihermítica, $\hat{S}(\omega) = -\hat{S}^\dagger(\omega)$. Por la proposición 3.2.2 se tiene que las componentes de estas matrices vendrán dadas por

$$S_{kl}(\omega) = \frac{1}{2}\left[\Gamma_{kl}^{\infty}(\omega) - \Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega)\right] \quad \text{y} \tag{3.60}$$

$$\gamma_{kl}(\omega) = \frac{1}{2}\left[\Gamma_{kl}^{\infty}(\omega) + \Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega)\right]. \tag{3.61}$$

Por otro lado, observando la ecuación (3.54), se tiene que puede ser expresada de la siguiente forma:

$$\frac{d\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau)}{d\tau} = \mathscr{V}^I \tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau), \tag{3.62}$$

donde el superoperador $\mathscr{V}^I$ se definirá de forma general como áquel que a un operador arbitrario $\hat{C} \in L_{\mathcal{H}}$, le asigna

$$\mathscr{V}^I\left(\hat{C}\right) = \frac{1}{\hbar^2}\sum_{\omega,k,l}\left[\Gamma_{kl}^{\infty}(\omega)\left[\hat{A}_l(\omega)\hat{C}, \hat{A}_k^\dagger(\omega)\right] + \Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega)\left[\hat{A}_l(\omega), \hat{C}\hat{A}_k^\dagger(\omega)\right]\right] \tag{3.63}$$

Por todo lo dicho hasta el momento, se tiene que el superoperador $\mathscr{V}^I$ puede ser descrito en función de los coeficientes definidos en (3.60) y (3.61) como

$$\begin{aligned}
\mathscr{V}^I(\cdot) &= \frac{1}{\hbar^2}\sum_{\omega}\sum_{k,l}\left[\Gamma_{kl}^{\infty}(\omega)\hat{A}_l(\omega)(\cdot)\hat{A}_k^\dagger(\omega) - \Gamma_{kl}^{\infty}(\omega)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)(\cdot)\right] \\
&+ \frac{1}{\hbar^2}\sum_{\omega}\sum_{k,l}\left[\Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega)\hat{A}_l(\omega)(\cdot)\hat{A}_k^\dagger(\omega) - \Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega)(\cdot)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)\right] \\
&\overset{(*)}{=} \frac{1}{\hbar^2}\sum_{\omega}\sum_{k,l}\left[2\gamma_{kl}(\omega)\hat{A}_l(\omega)(\cdot)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\underbrace{-\Gamma_{kl}^{\infty}(\omega)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)(\cdot)}\right]_{(1)} \\
&+ \frac{1}{\hbar^2}\sum_{\omega}\sum_{k,l}\underbrace{\left[-\Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega)(\cdot)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)\right]}_{(2)},
\end{aligned} \tag{3.64}$$

donde en $(*)$ se ha usado la definición de $\gamma_{kl}(\omega)$. Estudiemos por separado la suma de los términos (1) y (2):

$$\begin{aligned}
(1)+(2) &= -\Gamma_{kl}^{\infty}(\omega)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)(\cdot) - \Gamma_{lk}^{\infty *}(\omega)(\cdot)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega) \\
&\overset{(a)}{=} -\gamma_{kl}(\omega)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(w)(\cdot) - S_{kl}(\omega)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)(\cdot) \\
&- \gamma_{kl}(\omega)(\cdot)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega) + S_{kl}(\omega)(\cdot)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega) \\
&= -\gamma_{kl}(w)\{\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega), (\cdot)\} - S_{kl}(\omega)\left[\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega), (\cdot)\right]
\end{aligned} \tag{3.65}$$

donde en (a) se ha usado la definición de los coeficientes $\Gamma_{kl}^{\infty}(\omega)$, es decir, que $\Gamma_{kl}^{\infty}(\omega) = \gamma_{kl}(\omega) + S_{kl}(\omega)$, y también, que los coeficientes $\gamma_{kl}(\omega)$ son hermíticos, mientras que los $S_{kl}(\omega)$ son antihermíticos.

De esta forma, se tiene que el operador $\mathscr{V}^I$ se puede escribir de manera más compacta como sigue:

$$\begin{aligned} \mathscr{V}^I(\cdot) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\omega,k,l} \gamma_{kl}(\omega) \left[2\hat{A}_l(\omega)\,(\cdot)\,\hat{A}_k^{\dagger}(\omega) - \{\hat{A}_k^{\dagger}(\omega)\hat{A}_l(\omega), (\cdot)\} \right] \\ -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\omega,k,l} S_{kl}(\omega) \left[\hat{A}_k^{\dagger}(\omega)\hat{A}_l(\omega), (\cdot) \right]. \end{aligned} \tag{3.66}$$

Operadores tipo Lindblad

Finalmente, para obtener la ecuación tipo Lindblad, se pretende encontrar la expresión explícita de los operadores correspondientes a esta ecuación que se introdujeron en la sección 1.3. En primer lugar, veamos el siguiente resultado:

Proposición 3.2.3. *Consideremos $\hat{A} \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C})$ hermítica. Entonces se tiene que dicha matriz es diagonalizable de manera unitaria, es decir, se puede realizar la siguiente descomposición:*

$$\hat{A} = \hat{P}^{\dagger}\hat{D}\;\hat{P}, \tag{3.67}$$

donde $\hat{D}$ se trata de una matriz diagonal formada por los autovalores de $\hat{A}$ y $\hat{P}$ es una matriz unitaria.

De esta forma, como consecuencia de que la matriz $\hat{\gamma}(\omega)$ sea hermítica, tenemos que se puede escribir como

$$\hat{\gamma} = \hat{Q}^{\dagger}\hat{D}\hat{Q}, \tag{3.68}$$

donde en este caso, denotamos $\hat{Q}$ como la matriz unitaria y $\hat{D}$ como la matriz diagonal. Por tanto, se tiene que los coeficientes de esta matriz vendrán dados por

$$\gamma_{kl}(\omega) = \sum_{l'} Q_{l'k}^{*} d_{l'} Q_{l'l}. \tag{3.69}$$

Por otro lado, en la expresión (3.66) se puede diferenciar dos términos: un primer término que va multiplicado por los coeficientes $\gamma_{kl}(\omega)$, y otro segundo que lo hace por los $S_{kl}(\omega)$. A continuación, se va a estudiar el primero de esos términos introduciendo la descomposición de los coeficientes vista en (3.69), de manera que

$$\begin{aligned} 2\gamma_{kl}(\omega)\hat{A}_l(\omega)\,(\cdot)\,\hat{A}_k^\dagger(\omega) - \gamma_{kl}(\omega)\{\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega),(\cdot)\} &= 2\sum_{l'} Q_{l'k}^* d_{l'} Q_{l'l}\hat{A}_l(\omega)\,(\cdot)\,\hat{A}_k^\dagger(\omega) \\ &- \sum_{l'}\{Q_{l'k}^* d_{l'} Q_{l'l}\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega),(\cdot)\}. \end{aligned} \tag{3.70}$$

Observando esta expresión, se tiene que se puede definir unos operadores como $\hat{G}_{l'}(\omega) = \sum_l Q_{l'l}\hat{A}_l(\omega)$ y $\hat{G}_{l'}^\dagger(\omega) = \sum_k Q_{l'k}\hat{A}_k^\dagger(\omega)$ (donde l' es una variable muda), por tanto, se tiene que

$$\begin{aligned} \mathscr{V}^I(\cdot) = \frac{1}{\hbar^2}\sum_{\omega,k}&\left[2d_k\hat{G}_k(\omega)\,(\cdot)\,\hat{G}_k^\dagger(\omega) - d_k\{\hat{G}_k^\dagger(\omega)\hat{G}_k(\omega),(\cdot)\}\right] \\ &-\frac{1}{\hbar^2}\sum_{\omega,k,l} S_{kl}(\omega)\left[\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega),(\cdot)\right]. \end{aligned} \tag{3.71}$$

Una vez ya se tiene escrito el superoperador $\mathscr{V}^I$ de esta forma, será muy sencillo definir los operadores tipo Lindblad. Para ello se ha de tener en cuenta que los coeficientes d_k son positivos para todo valor de k; esto supone que su raíz cuadrada está bien definida. El hecho de que estos coeficientes sean positivos se tiene como consecuencia directa de que la matriz $\hat{\gamma}(\omega)$ sea una matriz semidefinida positiva (demostración en anexo B.6).

De manera que definiendo los operadores que serán conocidos como operadores tipo Lindblad de la siguiente forma: $\hat{L}_k = \sqrt{d_k}\,\hat{G}_k$ (y el operador adjunto correspondiente); se tendrá que el superoperador $\mathscr{V}^I$ vendrá dado por

$$\begin{aligned} \mathscr{V}^I(\cdot) = \frac{1}{\hbar^2}\sum_{\omega,k}&\left[2\hat{L}_k(\omega)\,(\cdot)\,\hat{L}_k^\dagger(\omega) - \{\hat{L}_k^\dagger(\omega)\hat{L}_k(\omega),(\cdot)\}\right] \\ &-\frac{1}{\hbar^2}\sum_{\omega,k,l} S_{kl}(\omega)\left[\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega),(\cdot)\right]. \end{aligned} \tag{3.72}$$

En la expresión (3.72) se puede observar que el término correspondiente a los $S_{kl}(\omega)$ se trata de un término de tipo hamiltoniano. Esto nos indica que el término hamiltoniano que aparecerá en la ecuación tipo Lindblad no sólo estará formado por el hamiltoniano del sistema en ausencia del baño, sino que tiene un término añadido debido a la interacción del sistema con el baño. Por simplificar la notación, definiremos el siguiente término:

$$\hat{H}_{SB} = \frac{1}{i}\sum_{\omega,k,l} S_{kl}(\omega)\hat{A}_k^\dagger(w)\hat{A}_l(\omega), \tag{3.73}$$

donde se ha introducido la unidad imaginaria para que así el operador definido $\hat{H}_{SB}$ sea hermítico. Entonces se tiene que la ecuación de evolución del operador $\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau)$, teniendo en cuenta (3.62) y la definición de $\hat{H}_{SB}$, (3.73), se puede escribir como

$$\frac{d\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau)}{d\tau} = \frac{-i}{\hbar^2}\left[\hat{H}_{SB}, \tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau)\right] + \frac{1}{\hbar^2}\sum_{w,k,l}\gamma_{kl}(\omega)\left[2\hat{A}_l(\omega)\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau)\hat{A}_k^\dagger(\omega) - \{\hat{A}_k^\dagger(w)\hat{A}_l(w), \tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau)\}\right]. \tag{3.74}$$

A continuación, para obtener la evolución del operador $\hat{\rho}_S^I(t)$, recordemos el cambio de variable realizado ($\tau = \lambda^2 t$) y la forma en la que definimos el operador $\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau)$ en (3.45). Entonces se tiene que la variación del operador viene determinada por

$$\frac{d\tilde{\hat{\rho}}_S^I(\tau)}{d\tau} = \frac{d\hat{\rho}_S^I\left(\frac{\tau}{\lambda^2}\right)}{d\tau} = \frac{1}{\lambda^2}\frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt}, \tag{3.75}$$

donde se ha aplicado la *Regla de la cadena*. De esta forma, teniendo en cuenta las expresiones (3.45), (3.74) y (3.75) se llega a que la ecuación de evolución del operador densidad reducido del sistema en la imagen de interacción viene dada por

$$\frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} = \frac{-i\lambda^2}{\hbar^2}\left[\hat{H}_{SB}, \hat{\rho}_S^I(t)\right] + \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\sum_{\omega,k,l}\gamma_{kl}(\omega)\left[2\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S^I(t)\hat{A}_k^\dagger(\omega) - \{\hat{A}_k^\dagger(w)\hat{A}_l(\omega), \hat{\rho}_S^I(t)\}\right].$$

Para finalizar este capítulo, nos faltaría describir la evolución del operador densidad reducido en la imagen de Schrödinger. Para ello, escribiendo de manera explícita el operador en la imagen de interacción como se vio en (3.7) y multiplicando por $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}$ por la izquierda y $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}$ por la derecha, se concluye que la ecuación de evolución del operador densidad reducido en la imagen de Scrhödinger viene dada por:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = \frac{\lambda^2}{\hbar}\sum_{\omega,k,l}\gamma_{kl}(\omega)\left[2\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(t)\hat{A}_k^\dagger(\omega) - \{\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega), \hat{\rho}_S(t)\}\right]\\ - \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_S + \lambda^2\hat{H}_{SB}, \hat{\rho}_S(t)\right],\end{aligned} \tag{3.76}$$

donde se ha obtenido una ecuación tipo Lindblad, como esperábamos. El paso de la ecuación de evolución en la imagen de interacción a la de Schrödinger se encuentra detallado en el anexo B.7

Conclusiones

El objetivo principal de este trabajo era llevar a cabo un estudio detallado sobre las ecuaciones tipo Lindblad. Dos aspectos fundamentales a destacar son:

1. Se ha podido comprobar que estas ecuaciones resultan de gran utilidad para describir la evolución temporal de sistemas cuánticos abiertos. Es más, se ha demostrado que las ecuaciones tipo Lindblad son las que rigen la evolución temporal de dichos sistemas, bajo ciertas hipótesis sobre el operador densidad reducido (hermiticidad, traza unidad y completa positividad).

2. Se han obtenido estas ecuaciones de manera formal a partir de modelos microscópicos para el caso en el que el hamiltoniano del sistema total es independiente del tiempo.

Finalmente, comentar que existen diversas vías de continuación del trabajo. Una de gran interés para mí es la generalización de estos resultados para el caso en el que el sistema cuántico abierto en cuestión posea una dinámica periódica.

Bibliografía

[1] J.J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company 1994.

[2] Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics, Volume 1: Basic Concepts, Tools and Applications*. WILEY-VCH 2019.

[3] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. John Eiley & Sons, INC 1998.

[4] P. Pearle. *Simple derivation of the Lindblad equation*. European Journal of Physics, **33**, 805 (2012)

[5] A. Rivas y S. Huelga. *Open Quantum Systems*. Springer 2012.

[6] Thomas C. Sideris. *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems. Volume 2*. Atlantis Press 2013.

[7] R. Feynman. *Statiscal Mechanics: A set of lectures*. THE BENJAMIN/CUMMINGS PUBLISHING COMPANY, INC. Second edition, 1972.

Anexo A

Imágenes en Mecánica Cuántica

En esta sección se estudia las diversas formas que existen para describir las ecuaciones evolutivas de los distintos sistemas (información obtenida de [1] y [3]). Vamos a definir las tres imágenes conocidas actualmente y debemos destacar que son equivalentes entre sí, es decir, la evolución del sistema no dependerá de la imagen utilizada.

Una clasificación inicial, a grandes rasgos, sobre las tres posibles formas de caracterizar la dinámica temporal de un sistema sería:

- Imagen de Schrödinger, la evolución temporal del sistema viene representada por la evolución del estado que lo representa.
- Imagen de Heissemberg, en este caso la evolución de dicho sistema se representa a través de la evolución de las magnitudes medibles.
- Imagen de interacción, se trata de una mezcla entre las dos imágenes anteriores, en la cual la dinámica del sistema se presenta tanto en la evolución del estado como en la de las magnitudes medibles.

A continuación, veremos una descripción más detallada de las diferentes imágenes.

A.1. Imagen de Schrödinger

Esta imagen se corresponde con la que se ha estado tratando hasta el momento en el trabajo. Como ya se ha adelantado, en la imagen de Schrödinger son los estados los que nos determinan la evolución del sistema y como vimos en la sección 1.1 esta evolución viene dada a través de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, expresión (1.36).

No obstante, destacar que el hecho de que la evolución del sistema se determine a través de los estados no significa que las magnitudes observables no tengan una dependencia explícita del tiempo. Asimismo, como se ha visto para los casos del operador densidad y operador densidad reducido se puede estudiar la evolución de estos operadores a través de la de los estados.

A.2. Imagen de Heissemberg

Partiendo de la imagen de Schrödinger es muy sencillo llegar a la descripción dada por Heissemberg aplicando una transformación unitaria dependiente del tiempo tanto a los estados como a los operadores. En esta sección del trabajo, denotaremos con el subíndice "S" cuando se trate de la imagen de Schrödinger y "H" cuando nos refiramos a la de Heissemberg.

En la imagen de Schrödinger, los operadores correspondientes a magnitudes medibles son constantes en el tiempo (a no ser que tengan una dependencia explícita); mientras que en la de Heissemberg estos operadores sí varían, pero no lo hacen los estados, que son constantes en el tiempo. Esto último significará que se mantendrán en el estado en el que se encontraban inicialmente, t_0.

Por simplicidad, trabajaremos con magnitudes medibles que en la imagen de Schrödinger no tienen una dependencia explícita del tiempo. De esta forma, tenemos que la transformación unitaria que da resultado a la imagen de Hesissemberg es la del operador evolución:

$$|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\,|\psi_H(t_0)\rangle \ \text{ y} \tag{A.1}$$

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}(t,t_0)\hat{A}_S\hat{U}^\dagger(t,t_0). \tag{A.2}$$

Asimismo, se puede comprobar, como ya se adelantó, que las imágenes son equivalentes. Para ello, verifiquemos que el valor esperado de un observable no depende de la imagen en la que se esté trabajando:

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{A}_S(t) \right\rangle &= \langle \psi_S(t)|\hat{A}_S(t)|\psi_S(t)\rangle = \langle \psi_H(t_0)|\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}_S(t)\hat{U}(t,t_0)|\psi_H(t_0)\rangle = \\ &= \langle \psi_H(t_0)|\hat{A}_H(t)|\psi_H(t_0)\rangle = \left\langle \hat{A}_H(t) \right\rangle .\end{aligned} \tag{A.3}$$

Destaquemos, que como ya se vio en la sección 1.1, el operador de evolución verifica que $\hat{U}(t_0,t_0) = \hat{I}$; esto supone que las imágenes coinciden en el instante de tiempo $t = t_0$.

Para finalizar, la ecuación de evolución en la imagen de Heissemberg, viene determinada por la evolución de las magnitudes medibles, es:

$$i\hbar\frac{\partial \hat{A}_H(t)}{\partial t} = \left[\hat{A}_H(t), \hat{H}(t)\right] + i\hbar\frac{\partial \tilde{A}_H(t)}{\partial t}, \tag{A.4}$$

donde el término de $\frac{\partial \tilde{A}_H(t)}{\partial t}$ se corresponde con la transformada de la derivada, es decir:

$$\frac{\partial \tilde{A}_H(t)}{\partial t} = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\frac{\partial \hat{A}_H(t)}{\partial t}\hat{U}(t,t_0). \tag{A.5}$$

A.3. Imagen de interacción

La representación de interacción, como se dijo al principio, no es más que una combinación de las dos imágenes descritas hasta el momento. En esta nueva imagen, tanto el estado del sistema como la magnitud de interés evolucionan en el tiempo. El uso de esta representación será útil en teoría de perturbaciones. Se va a considerar el caso en el cual el hamiltoniano del sistema se pueda escribir:

$$\hat{H} = \hat{H}_0(t) + \hat{V}(t), \tag{A.6}$$

donde $\hat{V}(t)$ se pueda considerar una perturbación del hamiltoniano $\hat{H}_0(t)$. Entonces, en estos casos se escogerá como operador de transformación unitaria (para pasar de la imagen de Schrödinger a la de interacción) aquel que satisfaga la siguiente expresión:

$$i\hbar\frac{\partial \hat{U}^\dagger(t,t_0)}{\partial t} = -\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{H}_0(t) \tag{A.7}$$

donde en este caso t_0 no se referirá a la condición inicial. De esta forma, tendremos que la correspondiente transformación unitaria para las magnitudes medibles vendrá dada por:

$$\hat{A}_I(t) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}_S\hat{U}(t,t_0). \tag{A.8}$$

Por tanto, se tiene que la ecuación de evolución de los observables en esta imagen vendrá dada por:

$$i\hbar\frac{\partial \hat{A}_I(t)}{\partial t} = \left[\hat{A}_I(t), \hat{H}_0(t)\right] + i\hbar\frac{\partial \tilde{A}_I(t)}{\partial t}. \tag{A.9}$$

Por otro lado, tenemos que los estados de la representación de interacción vendrán descritos por:

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\,|\psi_S(t)\rangle \tag{A.10}$$

A continuación, estudiemos la ecuación de evolución que satisfacen dichos estados del sistema:

$$i\hbar\frac{\partial|\psi_I,t\rangle}{\partial t} = \underbrace{i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,t_0)}{\partial t}|\psi_S,t\rangle}_{(1)} + \underbrace{i\hbar\hat{U}(t,t_0)\frac{\partial|\psi_S,t\rangle}{\partial t}}_{(2)}. \tag{A.11}$$

Aplicando en el término (1) las ecuaciones (A.7) y (A.10) y en el término (2) la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y (A.10) se llega a:

$$i\hbar\frac{\partial|\psi_I,t\rangle}{\partial t} = -\hat{U}(t,t_0)\hat{H}_0(t)|\psi_I,t\rangle + \hat{U}(t,t_0)\hat{H}(t)\hat{U}^\dagger(t,t_0)|\psi_I,t\rangle = \hat{V}_I(t)|\psi_I,t\rangle, \tag{A.12}$$

donde $\hat{V}_I(t)$ es la perturbación del hamiltoniano en la imagen de interacción.

En el caso particular en el cual el hamiltoniano $\hat{H}_0$ no dependa del tiempo, se tendría que la transformación unitaria correspondiente a ese sistema vendría dada por:

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}. \tag{A.13}$$

Además, en este caso particular se tendría también que el hamiltoniano $\hat{H}_0$ coincidiría en la imagen de Schrödinger y en la de interacción.

Para el caso particular del operador densidad, que será el operador cuya evolución temporal nos interese, se tendrá que la transformación vendrá dada por:

$$\hat{\rho}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}\hat{\rho}(t)e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}. \tag{A.14}$$

Como ya se ha visto, por la propia definición del operador densidad,(1.45) , se tiene que:

$$\hat{\rho}_I(t) = \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}|\psi\rangle}_{|\psi_I,t\rangle}\underbrace{\langle\psi|e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}}_{\langle\psi_I,t|} = |\psi_I,t\rangle\langle\psi_I,t| \tag{A.15}$$

Por tanto, ahora para hallar la evolución temporal del operador densidad en la imagen de Schrödinger basta derivar (A.15) y aplicar lo deducido en (A.12) (y la ecuación conjugada a ésta):

$$\frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} = \frac{|\psi_I,t\rangle}{dt}\langle\psi_I,t| + |\psi_I,t\rangle\frac{\langle\psi_I,t|}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{V}_I(t)|\psi_I,t\rangle\langle\psi_I,t| + \frac{i}{\hbar}|\psi_I,t\rangle\langle\psi_I,t|\hat{V}_I^\dagger(t) \quad \text{(A.16)}$$

Finalmente, como $\hat{V}(t)$ es hermítico por ser una parte del hamiltoniano y la energía es un observable se tiene como consecuencia que $\hat{V}_I(t)$ es hermítico y la ecuación de evolución nos queda:

$$\boxed{i\hbar\frac{d\hat{\rho}_I(t)}{dt} = \left[\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(t)\right].} \quad \text{(A.17)}$$

Anexo B

Complementos del Capítulo 3

B.1. Superoperadores proyección ortogonales

En esta primera sección, se probará que los operadores $\mathscr{P}$ y Q definidos en (3.10) y (3.11), respectivamente, son operadores proyección ortogonales. Por tanto deberemos probar los tres siguientes resultados:

$$\mathscr{P}^2 = \mathscr{P}, \tag{B.1}$$

$$Q^2 = Q \quad \text{y} \tag{B.2}$$

$$\mathscr{P}Q = Q\mathscr{P} = 0. \tag{B.3}$$

- <u>Demostración de B.1</u>

  Para probar B.1 verificaremos que se tiene $\mathscr{P}^2\hat{A} = \mathscr{P}\hat{A}$ para cualquier operador $\hat{A} \in L_{\mathcal{H}}$ arbitrario. Por tanto consideremos $\hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}$ con la traza bien definida.

  Por la propia definición del operador $\mathscr{P}$ se tiene que $\mathscr{P}\hat{A} = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B$, estudiemos ahora la acción de $\mathscr{P}^2$ sobre $\hat{A}$:

$$\begin{aligned} \mathscr{P}^2\hat{A} = \mathscr{P}\mathscr{P}\hat{A} = \mathscr{P}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B = \mathrm{Tr_B}\left[\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B\right] \otimes \hat{\rho}_B \\ \overset{(*)}{=} \left(\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right]\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_B\right]\right) \otimes \hat{\rho}_B \overset{(**)}{=} \mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B, \end{aligned} \tag{B.4}$$

  donde en $(*)$ hemos usado la propiedad $\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A} \otimes \hat{B}\right] = \hat{A} \otimes \mathrm{Tr}\left[\hat{B}\right]$ (propiedad probada en el anexo C) y en $(**)$ que $\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_B\right] = 1$ (por definición de operador densidad). Se puede concluir que

$$\boxed{\mathscr{P}^2\hat{A} = \mathscr{P}\hat{A} \quad \forall \hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}} \tag{B.5}$$

□

- Demostración de B.2

Análogamente a la prueba anterior, consideramos un operador arbitrario $\hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}$ con $\hat{A}$ con traza bien definida y veamos que $Q^2\hat{A} = Q\hat{A}$.

Por definición del operador Q se tiene que $Q\hat{A} = \hat{A} - \mathscr{P}\hat{A}$, desarrollemos ahora la acción de Q^2 sobre $\hat{A}$:

$$\begin{aligned} Q^2\hat{A} = QQ\hat{A} = Q\left(\hat{A} - \mathscr{P}\hat{A}\right) = Q\left(\hat{A} - \mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B\right) \\ \overset{(lineal)}{=} Q\hat{A} - Q\left(\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B\right) = \hat{A} - \mathscr{P}\hat{A} \\ - \left[\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B - \mathscr{P}\left(\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B\right)\right] \\ = \hat{A} - \mathscr{P}\hat{A} - \mathscr{P}\hat{A} + \mathscr{P}^2\hat{A}. \end{aligned} \tag{B.6}$$

Por tanto, como ya se ha probado que $\mathscr{P}$ es un proyector y por la propia definición de Q se llega a que:

$$\boxed{Q^2\hat{A} = Q\hat{A} \quad \forall \hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}} \tag{B.7}$$

□

- Demostración de B.3

Dividiremos esta prueba en dos partes: primero se demostrará que $\mathscr{P}Q = 0$ y luego que $Q\mathscr{P} = 0$. De forma análoga a las dos pruebas anteriores, consideramos un operador $\hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}$ arbitrario y con traza bien definida. Comencemos probando la primera igualdad:

$$\mathscr{P}Q\hat{A} = \mathscr{P}\left(\hat{A} - \mathscr{P}\hat{A}\right) \overset{(lineal)}{=} \mathscr{P}\hat{A} - \mathscr{P}^2\hat{A} \overset{(*)}{=} 0, \tag{B.8}$$

donde $(*)$ hemos aplicado que el operador $\mathscr{P}$ es proyector. De esta forma podemos concluir que:

$$\boxed{\mathscr{P}Q\hat{A} = 0 \quad \forall \hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}} \tag{B.9}$$

A continuación, estudiemos la segunda igualdad:

$$\begin{aligned} Q\mathscr{P}\hat{A} = Q\left(\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B\right) = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B - \mathscr{P}\left(\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] \otimes \hat{\rho}_B\right) \\ = \mathscr{P}\hat{A} - \mathscr{P}^2\hat{A} \overset{(*)}{=} 0, \end{aligned} \tag{B.10}$$

donde en $(*)$ se ha vuelto a hacer uso de que $\mathscr{P}$ es proyector. De manera que se tiene que:

$$\boxed{Q\mathscr{P}\hat{A} = 0 \quad \forall \hat{A} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}} \tag{B.11}$$

Finalmente, se puede concluir entonces que los operadores $\mathscr{P}$ y Q son ortogonales.

□

NOTA.- En las igualdades señaladas con (*lineal*) hemos utilizado que tanto el operador $\mathscr{P}$ como Q son lineales, lo cual es directo por la composición de aplicaciones lineales.

B.2. Resolución de la ecuación diferencial

Previo a la resolución de la ecuación diferencial del operador $\hat{r}_2^I(t)$, demostraremos un resultado que será necesario para resolverla.

Proposición B.2.1. *Supongamos que tenemos un operador $\hat{A}(t)$ arbitrario con $t \in \mathbb{R}$, entonces tendremos que se puede escribir la siguiente igualdad:*

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 ... \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{A}(t_1)...\hat{A}(t_n) = \frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 ... \int_{t_0}^{t} dt_n \mathscr{T}\left[\hat{A}(t_1)...\hat{A}(t_n)\right], \tag{B.12}$$

donde se tiene que $t \geq t_1 \geq t_2 \geq ... \geq t_n \geq t_0$ y $\mathscr{T}$ es el operador ordenación temporal que se define para dos operadores $\hat{A}(t)$ y $\hat{B}(t)$ arbitrarios como:

$$\mathscr{T}\left[\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\right] = \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2) \text{ si } t_1 \geq t_2, \\ \hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1) \text{ si } t_1 < t_2. \end{cases} \tag{B.13}$$

Demostración. En primer lugar, denotemos:

$$\hat{D}^n(t, t_0) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 ... \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{A}(t_1)...\hat{A}(t_n). \tag{B.14}$$

A continuación, vamos a considerar el factor de ordenación temporal

$$\varepsilon(t_1, t_2) = \begin{cases} 1 \text{ si } t_1 \geq t_2, \\ 0 \text{ si } t_1 < t_2, \end{cases} \tag{B.15}$$

de forma que introduciéndolo en la expresión (B.14) se tendría que:

$$\hat{D}^n(t, t_0) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 ... \int_{t_0}^{t} dt_n \varepsilon(t_1, t_2)\varepsilon(t_2, t_3)...\varepsilon(t_{n-1}, t_n)\hat{A}(t_1)...\hat{A}(t_n). \tag{B.16}$$

Considerando ahora el caso particular en el que $n = 2$, tendríamos que se podría escribir lo siguiente:

$$\begin{aligned}\hat{D}^2(t,t_0) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \varepsilon(t_1,t_2)\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2) = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \varepsilon(t_1,t_2)\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)+ \\ + \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \varepsilon(t_2,t_1)\hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1).\end{aligned} \tag{B.17}$$

Se puede observar que el primer sumando será distinto de cero cuando $t_1 \geq t_2$, mientras que el segundo lo será cuando $t_2 \geq t_1$. De manera que si introducimos el operador cronológico definido en (B.13) se tendría que:

$$\hat{D}^2(t,t_0) = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \mathscr{T}\left[\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)\right]. \tag{B.18}$$

De forma general, expandiendo el resultado para el caso de $\hat{D}^n(t,t_0)$ se obtiene el resultado deseado. □

Resolución de la ecuación diferencial

Seguidamente, una vez ya se ha probado el resultado que se utilizará a continuación, consideremos la ecuación diferencial del operador $\hat{r}_2^I(t)$ que queremos resolver. Recordemos que ésta era:

$$\frac{d\hat{r}_2(t)}{dt} = i\lambda Q\mathscr{L}(t)\hat{r}_1(t) + i\lambda Q\mathscr{L}(t)\hat{r}_2(t) \tag{B.19}$$

Para resolver esta ecuación diferencial emplearemos el método de variación de parámetros para operadores. Además, cabe destacar que por simplicidad consideraremos con instante inicial $t_0 = 0$. A continuación, dividiremos en dos pasos la resolución:

1. Resolución la ecuación homogénea de (B.19)

$$\frac{d\hat{r}_2(t)}{dt} = i\lambda Q\mathscr{L}(t)\hat{r}_2(t) \tag{B.20}$$

Denotemos la solución a la ecuación homogénea como $\hat{r}_H(t)$; sabemos que por ser una ecuación lineal dependiente del tiempo, esta solución se puede escribir como:

$$\hat{r}_H(t) = \mathscr{G}(t,0)\hat{r}_H(0). \tag{B.21}$$

Introduciendo la solución homogénea en (B.20) y observando que $\mathscr{G}(s,s) = \hat{I}\ \forall s$, se llega a que el propagador $\mathscr{G}(t,0)$ ha de verificar el siguiente problema:

$$\begin{cases}\frac{d\mathscr{G}(t,0)}{dt} = i\lambda Q\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0), \\ \mathscr{G}(0,0) = \hat{I}.\end{cases} \tag{B.22}$$

Para hallar la expresión explícita de este propagador, en primer lugar consideremos la ecuación integral asociada al problema planteado:

$$\mathscr{G}(t,0) - \underbrace{\mathscr{G}(0,0)}_{\hat{I}} = i\lambda \int_0^t dt_1 Q\mathscr{L}(t_1)\mathscr{G}(t_1,0) \tag{B.23}$$

Por recurrencia, introduciendo la expresión de $\mathscr{G}(t_1,0)$ de nuevo se tendría que:

$$\mathscr{G}(t,0) = \hat{I} + i\lambda \int_s^t dt_1 Q\mathscr{L}(t_1)\hat{I} + (i\lambda)^2 \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 Q\mathscr{L}(t_1)Q\mathscr{L}(t_2)\mathscr{G}(t_2,0) \tag{B.24}$$

Reiterando este procedimiento un número n de veces se obtiene:

$$\begin{aligned}\mathscr{G}(t,0) = \hat{I} + i\lambda \int_0^t dt_1 Q\mathscr{L}(t_1) + (i\lambda)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 Q\mathscr{L}(t_1)Q\mathscr{L}(t_2) + \\ + ... + (i\lambda)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 ... \int_0^{t_{n-1}} dt_n Q\mathscr{L}(t_1)...Q\mathscr{L}(t_n)\mathscr{G}(t_n,0).\end{aligned} \tag{B.25}$$

Por la proposición B.2.1 podemos escribir de forma más compacta cada término, obteniendo así que $\mathscr{G}(t,0)$ se puede escribir como:

$$\begin{aligned}\mathscr{G}(t,0) &= \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \mathscr{T}\left[\frac{(i\lambda)^n}{n!}\int_0^t dt_1 Q\mathscr{L}(t_1)...\int_0^t dt_n Q\mathscr{L}(t_n)\right] = \\ &= \mathscr{T}\left[\mathscr{I} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(i\lambda)^n}{n!}\left(\int_0^t dt' Q\mathscr{L}(t')\right)^n\right] \overset{(*)}{=} \mathscr{T}\left[e^{\int_0^t dt' Q\mathscr{L}(t')}\right],\end{aligned} \tag{B.26}$$

donde en $(*)$ se ha usado la definición de exponencial. Finalmente, podemos concluir que la solución homogénea vendrá dada por:

$$\boxed{\hat{r}_H(t) = \mathscr{T}\left[e^{i\lambda\int_0^t dt' Q\mathscr{L}(t')}\right]\hat{r}_H(0)} \tag{B.27}$$

2. Variación de parámetros

A continuación, buscaremos una solución de la ecuación total, (B.19), realizando una variación de la obtenida para la homogénea, es decir:

$$\hat{r}_2(t) = \mathscr{G}(t,0)\hat{A}(t,0). \tag{B.28}$$

De manera que derivando esta expresión respecto del tiempo se tiene que:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{r}_2(t)}{dt} &= \frac{d\mathscr{G}(t,0)}{dt}\hat{A}(t,0) + \mathscr{G}(t,0)\frac{d\hat{A}(t,0)}{dt} \overset{(*)}{=} \\ &= i\lambda Q\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)\hat{A}(t,0) + \mathscr{G}(t,0)\frac{d\hat{A}(t,0)}{dt},\end{aligned} \tag{B.29}$$

donde en $(*)$ se ha utilizado la expresión que sabemos que satisface el propagador, (B.22). Por otro lado, sabemos que esta derivada ha de verificar la ecuación diferencial (B.19):

$$\cancel{i\lambda Q\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)}\hat{A}(t,0) + \mathscr{G}(t,0)\frac{d\hat{A}(t,0)}{dt} = i\lambda Q\mathscr{L}(t)\hat{r}_1(t) + \cancel{i\lambda Q\mathscr{L}(t)\mathscr{G}(t,0)}\hat{A}(t,0). \tag{B.30}$$

Integrando entre 0 y t la ecuación (B.30), se puede obtener una expresión explícita de $\hat{A}(t,0)$:

$$\hat{A}(t,0) = \hat{A}(0,0) + i\lambda \int_0^t dt' \mathscr{G}^{-1}(t',0) Q\mathscr{L}(t')\hat{r}_1(t'), \tag{B.31}$$

donde se ha de verificar que $\hat{A}(0,0) = \hat{r}_2(0)$. Esto se tiene directamente evaluando en el instante de tiempo $t = 0$ en la ecuación (B.28).

De esta forma, introduciendo (B.31) en la expresión (B.28), se llega a que la solución a la ecuación diferencial total vendrá dada por:

$$\hat{r}_2(t) = \mathscr{G}(t,0)\hat{r}_2(0) + i\lambda \int_0^t ds\; \mathscr{G}(t,0)\mathscr{G}^{-1}(s,0) Q\mathscr{L}(s)\hat{r}_1(s). \tag{B.32}$$

Esta expresión se puede escribir de forma más compacta estudiando el producto de $\mathscr{G}(t,0)\mathscr{G}^{-1}(s,0)$:

$$\mathscr{G}(t,0)\mathscr{G}^{-1}(s,0) = \mathscr{G}(t,0)\mathscr{G}(0,s) = \mathscr{G}(t,s) \tag{B.33}$$

Finalmente, la solución nos queda:

$$\boxed{\hat{r}_2(t) = \mathscr{G}(t,0)\hat{r}_2(0) + i\lambda \int_0^t ds\; \mathscr{G}(t,s) Q\mathscr{L}(s)\hat{r}_1(s)} \tag{B.34}$$

B.3. Traza parcial del potencial interacción

En esta sección queremos ver que esta propiedad se va a verificar siempre; y que en el caso en el que no lo haga, podremos redefinir el término de interacción del hamiltoniano de forma que se verifique. Destacar que esta prueba ha sido obtenida de [5]. Realizaremos los dos siguientes cambios de forma que el hamiltoniano total del sistema no varíe:

$$\begin{aligned} \hat{V}' &= \hat{V} - \mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}\hat{\rho}_B\right] \otimes \hat{I}_B \quad \text{y} \\ \hat{H}'_S &= \hat{H}_S + \mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}\hat{\rho}_B\right] \otimes \hat{I}_B. \end{aligned} \tag{B.35}$$

A continuación, veamos que tras este cambio se verifica que $\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}_I'(t)\hat{\rho}_B\right] = 0$:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}_I'(t)\hat{\rho}_B\right] &\overset{(1)}{=} \mathrm{Tr_B}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S'+\hat{H}_B\right)t}\ \hat{V}' e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_S'+\hat{H}_B\right)t}\ \hat{\rho}_B\right] \\
&\overset{(2)}{=} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S'}\mathrm{Tr_B}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B}\hat{\rho}_B\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S'} \\
&- e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S'}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}\hat{\rho}_B\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S'}\mathrm{Tr_B}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B}\hat{\rho}_B e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B}\right] \\
&\overset{(3)}{=} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S'}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}\hat{\rho}_B\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S'} - e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S'}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}\hat{\rho}_B\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S'} = 0
\end{aligned} \tag{B.36}$$

donde en (1) se ha aplicado el cambio de la imagen de interacción a la de Schrödinger para un hamiltoniano independiente del tiempo; en (2) la definición de $\hat{V}'$ y que la aplicación traza parcial no actúa sobre elementos de $\mathcal{H}_S$; por último, en (3) se ha utilizado que $\hat{\rho}_B$ conmuta con $\mathcal{H}_B$, que $\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\ \hat{B}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{B}\ \hat{A}\right]$ (ver anexo C) y que $\mathrm{Tr_B}\left[\hat{\rho}_B\right] = 1$.

B.4. Descomposición del potencial de interacción en la imagen de interacción

Esta sección constará a su vez de tres subsecciones en la que se desarrollarán una serie de resultados. En la primera de éstas se estudiará un resultado sobre las descomposición del potencial de interacción, $\hat{V}$. En la segunda subsección se demostrará que el conmutador del hamiltoniano del sistema $\hat{H}_S$ con $\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)$ es 0, lo cual nos resultará de utilidad posteriormente para la deducción de la ecuación de evolución del operador densidad reducido en la imagen de Schrödinger. Finalmente, en la última subsección se desarrollará la expresión del operador densidad reducido en la imagen de interacción.

B.4.1. Resultado sobre la descomposición del potencial de interacción

Se va a llevar a cabo la demostración de un resultado utilizado en el capítulo 3 sobre la descomposición que se puede llevar a cabo del potencial $\hat{V}$:

Proposición B.4.1. *Sea $\hat{V}$ el potencial de interacción hermítico, es decir, $\hat{V} = \hat{V}^\dagger$, entonces podemos encontrar siempre unos operadores $\hat{A}_k$ y $\hat{B}_k$ autoadjuntos verificando que:*

$$\hat{V} = \sum_{k=1}^{2N} \hat{A}_k \otimes \hat{B}_k \tag{B.37}$$

Demostración. De forma general, siempre se puede encontrar una base factorizada del espacio vectorial de operadores lineales y continuos de $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$. Esto supone que podemos escribir el potencial $\hat{V}$ como la suma de productos de unos operadores arbitrarios $\hat{X}_k$ y $\hat{Y}_k$ de la siguiente forma:

$$\hat{V} = \sum_{k=1}^{N} \hat{X}_k^\dagger \otimes \hat{Y}_k + \hat{X}_k \otimes \hat{Y}_k^\dagger \tag{B.38}$$

A su vez, todos los operadores se pueden descomponer como:

$$\hat{X}_k = \hat{X}_k^{(a)} + i\hat{X}_k^{(b)}, \quad \text{donde} \quad \hat{X}_k^{(a)} = \frac{\hat{X}_k^\dagger + \hat{X}_k}{2} \quad \text{y} \quad \hat{X}_k^{(b)} = \frac{i\left(\hat{X}_k^\dagger - \hat{X}_k\right)}{2}, \tag{B.39}$$

tales que los operadores definidos como $\hat{X}_k^{(a)}$ y $\hat{X}_k^{(b)}$ son autoadjuntos. De manera totalmente análoga se desarrolla para $\hat{Y}_k = \hat{Y}_k^{(a)} + \hat{Y}_k^{(b)}$. Entonces la ecuación (B.38) se puede escribir tal que:

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \sum_{k=1}^{N} \left(\hat{X}_k^{(a)} - i\hat{X}_k^{(b)}\right) \otimes \left(\hat{Y}_k^{(a)} + i\hat{Y}_k^{(b)}\right) + \left(\hat{X}_k^{(a)} + i\hat{X}_k^{(b)}\right) \otimes \left(\hat{Y}_k^{(a)} - i\hat{Y}_k^{(b)}\right) \\ &= 2\sum_{k=1}^{N} \left(\hat{X}_k^{(a)} \otimes \hat{Y}_k^{(a)} + \hat{X}_k^{(b)} \otimes \hat{Y}_k^{(b)}\right) \end{aligned} \tag{B.40}$$

Si elegimos ahora $\hat{A}_k$ y $\hat{B}_k$ tales que:

$$\begin{aligned} \hat{A}_k = 2\hat{X}_k^{(a)}, \quad \hat{B}_k = 2\hat{Y}_k^{(a)} \quad \forall k = 1, ..., N \\ \hat{A}_k = 2\hat{X}_{k-N}^{(b)}, \quad \hat{B}_k = 2\hat{Y}_{k-N}^{(b)} \quad \forall k = N+1, ..., 2N, \end{aligned} \tag{B.41}$$

ya se tendría el resultado buscado. □

B.4.2. Estudio del conmutador

Recordemos que los operadores $\hat{A}_k(\omega)$ se habían definido como:

$$\hat{A}_k(\omega) = \sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} |\psi_\epsilon\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \langle \psi_{\epsilon'}| \quad \forall k = 1, ..., 2N \tag{B.42}$$

Además, durante en desarrollo del capítulo 3 se vio que estos operadores también verifican que:

$$\hat{A}_k^\dagger(\omega) = \hat{A}_k(\omega) \;\; \forall k = 1, ..., 2N. \tag{B.43}$$

El resultado que será clave para la conclusión del capítulo y en el cual nos centraremos aquí en demostrar es:

$$\left[\hat{H}_S, \hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)\right] = 0. \tag{B.44}$$

Estudiemos este conmutador, sobre un elemento arbitrario del espacio que podemos escribir en función de la base de autoestados correspondientes al operador $\hat{H}_S$, es decir, sobre $|\varphi\rangle = \sum_\alpha C_\alpha |\psi_\alpha\rangle$

$$\left[\hat{H}_S, \hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)\right]|\varphi\rangle = \underbrace{\hat{H}_S\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)|\varphi\rangle}_{(1)} - \underbrace{\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)\hat{H}_S|\varphi\rangle}_{(2)} \tag{B.45}$$

Trabajemos los términos (1) y (2) por separado; para probar (B.44) bastaría con ver que ambos términos son iguales:

$$\begin{aligned}
(1) &= \hat{H}_S \sum_{\beta-\gamma=-\omega} |\psi_\gamma\rangle \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\beta \right\rangle \langle\psi_\beta| \sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} |\psi_\epsilon\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \langle\psi_{\epsilon'}| \sum_\alpha C_\alpha |\psi_\alpha\rangle \\
&= \sum_{\beta-\gamma=-\omega}\sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega}\sum_\alpha C_\alpha \gamma |\psi_\gamma\rangle \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\beta \right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \delta_{\beta,\epsilon}\delta_{\epsilon',\alpha} \\
&\overset{(a)}{=} \sum_{\beta-\gamma=-\omega}\sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} C_{\epsilon'} \gamma |\psi_\gamma\rangle \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\beta \right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \delta_{\beta,\epsilon} \\
&\overset{(b)}{=} \sum_{\gamma-\epsilon=\omega}\sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} C_{\epsilon'} \gamma |\psi_\gamma\rangle \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\epsilon \right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \\
&\overset{(c)}{=} \sum_{\gamma-\epsilon=\omega} C_\gamma \gamma |\psi_\gamma\rangle \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\epsilon \right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_\gamma \right\rangle .
\end{aligned} \tag{B.46}$$

Mientras que el término (2):

$$\begin{aligned}
(2) &= \sum_{\beta-\gamma=-\omega} |\psi_\gamma\rangle \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\beta \right\rangle \langle\psi_\beta| \sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} |\psi_\epsilon\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \langle\psi_{\epsilon'}| \hat{H}_S \sum_\alpha C_\alpha |\psi_\alpha\rangle \\
&= \sum_{\beta-\gamma=-\omega}\sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega}\sum_\alpha C_\alpha \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\beta \right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \delta_{\beta,\epsilon}\delta_{\epsilon',\alpha}\alpha |\psi_\alpha\rangle \\
&\overset{(a)}{=} \sum_{\beta-\gamma=-\omega}\sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} C_{\epsilon'} \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\beta \right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \delta_{\beta,\epsilon}\epsilon' |\psi_{\epsilon'}\rangle \\
&\overset{(b)}{=} \sum_{\gamma-\epsilon=\omega}\sum_{\epsilon'-\epsilon=\omega} C_{\epsilon'} \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\epsilon \right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_{\epsilon'} \right\rangle \epsilon' |\psi_{\epsilon'}\rangle \\
&\overset{(c)}{=} \sum_{\gamma-\epsilon=\omega} C_\gamma \gamma |\psi_\gamma\rangle \left\langle \psi_\gamma \middle| \hat{A}_k \middle| \psi_\epsilon \right\rangle \left\langle \psi_\epsilon \middle| \hat{A}_l \middle| \psi_\gamma \right\rangle .
\end{aligned} \tag{B.47}$$

Tanto en el desarrollo expuesto en (B.46) como en el de (B.47) se ha procedido de manera análoga: en (a) hemos suprimido la delta correspondiente a α, y en (b) la de β; mientras que en (c) se ha usado que realmente teníamos el mismo sumatorio y que se verifica que $\gamma = \epsilon'$.

Finalmente, podemos concluir que el operador $\hat{H}_S$ conmuta con $\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)$, que era lo que queríamos demostrar.

B.4.3. Desarrollo explícito para la obtención del operador densidad reducido en la imagen de interacción

En este apartado, desarrollaremos de manera explícita la deducción de la ecuación de evolución del operador densidad $\hat{\rho}_S^I(t)$. En primer lugar, recordemos que partimos de la siguiente ecuación:

$$\hat{\rho}_S^I(t) = \hat{\rho}_S(0) - \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t ds \int_0^s du \mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}^I(s), \left[\hat{V}^I(s-u), \hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right]\right] + \mathscr{O}(\lambda^3). \quad \text{(B.48)}$$

Además, utilizaremos las siguientes descomposiciones para los correspondientes operadores $\hat{V}^I(s)$ y $\hat{V}^I(s-u)$:

$$\hat{V}^I(s) = \sum_{\omega',k} e^{\frac{i}{\hbar}\omega' s}\hat{A}_k^\dagger(\omega')\otimes\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s) \quad \text{y} \quad \text{(B.49)}$$

$$\hat{V}^I(s-u) = \sum_{\omega,l} e^{-\frac{i}{\hbar}\omega(s-u)}\hat{A}_l(\omega)\otimes\hat{B}_l^I(s-u). \quad \text{(B.50)}$$

A continuación, vamos a comenzar desarrollando el conmutador que se tiene en la ecuación (B.48):

$$\begin{aligned}\left[\hat{V}^I(s), \left[\hat{V}^I(s-u), \hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right]\right] &= \underbrace{\left[\hat{V}^I(s), \hat{V}^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right]}_{(1)} \\ &- \underbrace{\left[\hat{V}^I(s), \hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B, \hat{V}^I(s-u)\right]}_{(2)}\end{aligned} \quad \text{(B.51)}$$

Por simplicidad, estudiemos los términos (1) y (2) por separado; para llevar a cabo este desarrollo usaremos la propiedad de los conmutadores que nos dice que $\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C}$, de forma que:

$$\begin{aligned}(1) &= \hat{V}^I(s-u)\left[\hat{V}^I(s), \hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right] + \left[\hat{V}^I(s), \hat{V}^I(s-u)\right]\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B \\ &= \cancel{\hat{V}^I(s-u)\hat{V}^I(s)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B} - \hat{V}^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s) \\ &+ \hat{V}^I(s)\hat{V}^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B - \cancel{\hat{V}^I(s-u)\hat{V}^I(s)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B} \\ &= \hat{V}^I(s)\hat{V}^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B - \hat{V}^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s),\end{aligned} \quad \text{(B.52)}$$

$$\begin{aligned}(2) &= \hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\left[\hat{V}^I(s), \hat{V}^I(s-u)\right] + \left[\hat{V}^I(s), \hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right]\hat{V}^I(s-u) \\ &= \cancel{\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s)\hat{V}^I(s-u)} - \hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s-u)\hat{V}^I(s) \\ &+ \hat{V}^I(s)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s-u) - \cancel{\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s)\hat{V}^I(s-u)} \\ &= \hat{V}^I(s)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s-u) - \hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s-u)\hat{V}^I(s).\end{aligned} \quad \text{(B.53)}$$

De manera que podemos escribir la ecuación (B.51) como la suma de cuatro términos tales que:

$$\begin{aligned}\left[\hat{V}^I(s),\left[\hat{V}^I(s-u),\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right]\right] &= \hat{V}^I(s)\hat{V}^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B - \hat{V}^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s)\\ &\quad -\left(\hat{V}^I(s)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s-u)-\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s-u)\hat{V}^I(s)\right).\end{aligned} \tag{B.54}$$

Como se puede observar en la ecuación (B.48) a esos términos habría que aplicarle el operador traza; por tanto, como la traza es lineal podemos escribir:

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}^I(s),\left[\hat{V}^I(s-u),\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right]\right] &= \underbrace{\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}^I(s)\hat{V}^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right]}_{(3)}\\ &-\underbrace{\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s)\right]}_{(4)}+\underbrace{\mathrm{Tr_B}\left[\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s-u)\hat{V}^I(s)\right]}_{(5)}\\ &-\underbrace{\mathrm{Tr_B}\left[\hat{V}^I(s)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{V}^I(s-u)\right]}_{(6)}.\end{aligned} \tag{B.55}$$

Al igual que antes, vamos a estudiar estos cuatro términos por separado. Ahora sí, ya se van a escribir las expresiones de los operadores $\hat{V}^I(s)$ y $\hat{V}^I(s-u)$, descritas en (B.49) y (B.50) respectivamente:

$$\begin{aligned}(3) &= \mathrm{Tr_B}\left[\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l}e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\hat{A}_k^\dagger(\omega')\otimes\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\hat{A}_l(\omega)\otimes\hat{B}_l^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\right]\\ &\overset{(*)}{=}\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l}e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\hat{A}_k^\dagger(\omega')\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(s)\mathrm{Tr}\left[\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\hat{B}_l^I(s-u)\hat{\rho}_B\right],\end{aligned} \tag{B.56}$$

$$\begin{aligned}(4) &= \mathrm{Tr_B}\left[\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l}e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\hat{A}_l(w)\otimes\hat{B}_l^I(s-u)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{A}_k^\dagger(\omega')\otimes\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\right]\\ &\overset{(*)}{=}\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l}e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(s)\hat{A}_k^\dagger(\omega')\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_l^I(s-u)\hat{\rho}_B\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\right],\end{aligned} \tag{B.57}$$

$$\begin{aligned}(5) &= \mathrm{Tr_B}\left[\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l}e^{i(\omega'-\omega)s}e^{iwu}\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{A}_l(w)\otimes\hat{B}_l^I(s-u)\hat{A}_k^\dagger(\omega')\otimes\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\right]\\ &\overset{(*)}{=}\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l}e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\hat{\rho}_S(s)\hat{A}_l(\omega)\hat{A}_k^\dagger(\omega')\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_B\hat{B}_l^I(s-u)\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\right],\end{aligned} \tag{B.58}$$

$$\begin{aligned}(6) &= \mathrm{Tr_B}\left[\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l}e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\hat{A}_k^\dagger(\omega')\otimes\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\hat{\rho}_S(s)\otimes\hat{\rho}_B\hat{A}_l(\omega)\otimes\hat{B}_l^I(s-u)\right]\\ &\overset{(*)}{=}\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l}e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\hat{A}_k^\dagger(\omega')\hat{\rho}_S(s)\hat{A}_l(\omega)\mathrm{Tr}\left[\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\hat{\rho}_B\hat{B}_l^I(s-u)\right],\end{aligned} \tag{B.59}$$

donde en todos los pasos $(*)$ se ha usado tanto la linealidad del operador traza, como también que la traza parcial de B sólo actúa sobre elementos de $\mathcal{H}_B$. Trabajemos ahora, por un lado los términos (3) y (4) como se han desarrollando y por otro (5) y (6); teniendo en cuenta la propiedad de la traza que nos dice que $\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{B}\hat{C}\hat{A}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{C}\hat{A}\hat{B}\right]$, con $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ matrices de dimensión finita (propiedad probada en el anexo C), por tanto:

$$\begin{aligned}(3)-(4) &= \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\left[\hat{A}_k^\dagger(\omega')\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(s) - \hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(s)\hat{A}_k^\dagger(\omega')\right] \\ &\quad \mathrm{Tr}\left[\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\hat{B}_l^I(s-u)\hat{\rho}_B\right] \\ &= \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\left[\hat{A}_k^\dagger(\omega'), \hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(s)\right]\mathrm{Tr}\left[\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\hat{B}_l^I(s-u)\hat{\rho}_B\right],\end{aligned} \tag{B.60}$$

$$\begin{aligned}(5)-(6) &= \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\left[\hat{\rho}_S(s)\hat{A}_l(\omega)\hat{A}_k^\dagger(\omega') - \hat{A}_k^\dagger(\omega')\hat{\rho}_S(s)\hat{A}_l(\omega)\right] \\ &\quad \mathrm{Tr}\left[\hat{B}_l^I(s-u)\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\hat{\rho}_B\right] \\ &= \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\left[\hat{\rho}_S(s)\hat{A}_l(\omega), \hat{A}_k^\dagger(\omega')\right]\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_l^I(s-u)\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s)\hat{\rho}_B\right].\end{aligned} \tag{B.61}$$

A continuación, vamos a trabajar sobre estos términos. En primer lugar, tenemos que por las descomposiciones de los potenciales realizadas y lo visto en B.4.1, se verifica que $\left(\hat{B}_k^I\right)^\dagger(s) = \hat{B}_k^I(s)\ \forall k$. De ahí que escribamos el término $(3)-(4)$ como:

$$\begin{aligned}(3)-(4) &= \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\left[\hat{A}_k^\dagger(\omega'), \hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(s)\right]\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(s)\hat{B}_l^I(s-u)\hat{\rho}_B\right] \\ &\overset{(*)}{=} -\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}e^{iwu}\left[\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(s), \hat{A}_k^\dagger(\omega')\right]\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(s)\hat{B}_l^I(s-u)\hat{\rho}_B\right],\end{aligned}$$

donde en $(*)$ se ha utilizado que $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -\left[\hat{B}, \hat{A}\right]$. Estudiemos ahora el término de $(5)-(6)$:

$$\begin{aligned}(5)-(6) &= \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\left[\hat{\rho}_S(s)\hat{A}_l(\omega), \hat{A}_k^\dagger(\omega')\right]\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_l^I(s-u)\hat{B}_k^I(s)\hat{\rho}_B\right] \\ &\overset{(*)}{=} \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}e^{i\omega u}\left[\hat{\rho}_S(s)\hat{A}_l^\dagger(-\omega), \hat{A}_k(-\omega')\right]\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_l^I(s-u)\hat{B}_k^I(s)\hat{\rho}_B\right] \\ &\overset{(**)}{=} -\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega-\omega')s}e^{-i\omega u}\left[\hat{A}_k(\omega'), \hat{\rho}_S(s)\hat{A}_l^\dagger(\omega)\right]\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_l^I(s-u)\hat{B}_k^I(s)\hat{\rho}_B\right] \\ &\overset{(***)}{=} -\sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega-\omega')s}e^{-i\omega u}\left[\hat{A}_l(\omega'), \hat{\rho}_S(s)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\right]\mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(s-u)\hat{B}_l^I(s)\hat{\rho}_B\right],\end{aligned}$$

donde en $(*)$ se ha utilizado la propiedad deducida de los operados $\hat{A}_k(\omega)$ que nos dice que $\hat{A}_k(\omega) = \hat{A}_k^\dagger(-\omega)$, y en $(**)$ hemos redefinido las variables mudas ω y ω' y aplicado que

$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = -\left[\hat{B},\hat{A}\right]$. Finalmente en $(***)$ por simplicidad en la notación hemos permutado las variables k y l, lo cual es posible pues son también mudas.

Finalmente, para que la ecuación de evolución nos quede más compacta vamos a definir los siguientes coeficientes:

$$\Gamma^{s}_{kl}(\omega) = \int_0^s du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}^I_k(s)\hat{B}^I_l(s-u)\hat{\rho}_B\right] \quad \text{y} \tag{B.62}$$

$$\Gamma^{s*}_{lk}(\omega) = \int_0^s du\ e^{-i\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}^I_k(s-u)\hat{B}^I_l(s)\hat{\rho}_B\right]. \tag{B.63}$$

Estudiando más en profundidad estos coeficientes, se puede llegar a una expresión más compacta de ellos con la que trabajar:

$$\begin{aligned}
\Gamma^{s}_{kl}(\omega) &= \int_0^s du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}^I_k(s)\hat{B}^I_l(s-u)\hat{\rho}_B\right] \\
&\overset{(*)}{=} \int_0^s du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B s}\hat{B}_k e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B s}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B (s-u)}\hat{B}_l e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B (s-u)}\hat{\rho}_B\right] \\
&= \int_0^s du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B s}\hat{B}_k e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{B}_l e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B (s-u)}\hat{\rho}_B\right] \\
&\overset{(**)}{=} \int_0^s du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B s}\hat{B}_k e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{B}_l\hat{\rho}_B e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B (s-u)}\right] \\
&\overset{(***)}{=} \int_0^s du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B (s-u)}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B s}\hat{B}_k e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right] \\
&= \int_0^s du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{B}_k e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right] = \int_0^s du\ e^{i\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}^I_k(u)\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right],
\end{aligned} \tag{B.64}$$

donde en $(*)$ hemos escrito los operadores en la imagen de interacción de forma explícita, en $(**)$ que el operador $\hat{\rho}_B$ conmuta con $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B t}$ y por último en $(***)$ se ha aplicado la propiedad de la traza que nos dice que $\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{B}\hat{C}\hat{A}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{C}\hat{A}\hat{B}\right]$, con $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ matrices de dimensión finita.

De manera totalmente análoga se llega a que:

$$\Gamma^{s*}_{lk}(\omega) = \int_0^s du\ e^{-i\omega u}\mathrm{Tr}\left[\hat{B}^I_k(-u)\hat{B}_l\hat{\rho}_B\right]. \tag{B.65}$$

Finalmente, concluimos que la ecuación de evolución del operador densidad reducido del sistema S viene dada por:

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}^I_S(t) = \hat{\rho}_S(0) &+ \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t ds \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega'-\omega)s}\Gamma^{s}_{kl}(\omega)\left[\hat{A}_l(w)\hat{\rho}^I_S(s),\hat{A}^\dagger_k(\omega')\right] \\
&+ \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t ds \sum_{\omega,\omega'}\sum_{k,l} e^{i(\omega-\omega')s}\Gamma^{s*}_{lk}(\omega)\left[\hat{A}_l(\omega'),\hat{\rho}^I_S(s)\hat{A}^\dagger_k(\omega)\right] + \mathscr{O}(\lambda^3),
\end{aligned} \tag{B.66}$$

B.5. Lema de Riemann-Lebesgue

Se va a llevar a cabo la demostración del Lema de Riemann-Lebesgue, esta prueba ha sido obtenida de [5].

Sea $f(t) \in L^1([a, b])$ (función integrable), entonces se tiene que:

$$\lim_{x\to\infty} \int_a^b e^{ixt} f(t)dt = 0. \tag{B.67}$$

Demostración. En primer lugar, definamos la siguiente función:

$$g(t) = f(t)\left[H(t-a) - H(t-b)\right], \tag{B.68}$$

donde la función de Heiviside se define como:

$$H(t) = \begin{cases} 1 \ si \ t \geq 0 \\ 0 \ si \ t < 0 \end{cases} \tag{B.69}$$

De esta forma, tenemos que se verifica la siguiente igualdad:

$$\int_a^b e^{ixt} f(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixt} g(t)dt = \tilde{g}(x), \tag{B.70}$$

donde $\tilde{g}(x)$ es la transformada de Fourier de $g(t)$. Trivialmente, la función $g(t)$ es de cuadrado integrable puesto que $L^1 \subset L^2$. además, como consecuencia de que la transformada de Fourier conserva la norma tenemos que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{g}(x)|^2 dx. \tag{B.71}$$

De forma que hemos probado que $\tilde{g}(x)$ es también de cuadrado integrable. Esto supone directamente que:

$$\lim_{x\to\infty} \tilde{g}(x) = 0, \tag{B.72}$$

que es el resultado que buscábamos. Vemos que esto ha de ser así pues por el contrarrecíproco, si suponemos que esto no es cierto se tendría que $\tilde{g}(x)$ no sería de cuadrado integrable. $\square$

B.6. $\hat{\gamma}(\omega)$ semidefinida positiva

Tenemos que demostrar que la matriz $\hat{\gamma}(\omega)$ es semidefinida positiva, esto es,

$$\langle \mathbf{v}|\hat{\gamma}(\omega)|\mathbf{v}\rangle \geq 0 \qquad \forall\, |\mathbf{v}\rangle \in \mathbb{C}^N. \tag{B.73}$$

Mencionar que esta demostración ha sido obtenida de [5]. Desarrollemos este término:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{v}|\hat{\gamma}(\omega)|\mathbf{v}\rangle &= \sum_{kl} v_k^* \gamma_{kl}(\omega) v_l \overset{(*)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} du\ e^{i\omega u} \sum_{k,l} v_k^* \mathrm{Tr}\left[\hat{B}_k^I(u)\hat{B}_l\hat{\rho_B}\right] v_l \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} du\ e^{i\omega u} \sum_{k,l} v_k^* \mathrm{Tr}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{B}_k e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{B}_l\hat{\rho_B}\right] v_l\end{aligned} \tag{B.74}$$

Por la definición de traza, tenemos que introduciendo unos operadores tales que $\hat{F} = \sum_l \hat{B}_l v_l$, se tiene que la expresión anterior nos queda que:

$$\langle \mathbf{v}|\hat{\gamma}(\omega)|\mathbf{v}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} du\ e^{i\omega u} \mathrm{Tr}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}\hat{\rho_B}\right]. \tag{B.75}$$

A continuación, aplicaremos el *teorema de Bochner*, el cual nos dice que la transformada de Fourier de una función de tipo positiva es una cantidad positiva. Por tanto, se tendría que demostrar que la función $\mathrm{Tr}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}\hat{\rho_B}\right]$ es de tipo positiva.

Definición B.6.1. *Una función $f(t)$ se dice que es de tipo positiva si la matriz construida por los coeficientes $f_{mn}f(t_m - t_n)$ es semidefinida positiva para cualesquiera t_m y t_n.*

Veamos que esto es cierto:

Consideremos la base de autoestado del operador $\hat{H}_B$: $\{|\phi_\epsilon\rangle\}$. Como consecuencia de estar considerando el espectro de $\hat{H}_B$ continuo y por la propia definición de la aplicación traza, podemos escribir la función como

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}\hat{\rho_B}\right] &= \int d\epsilon\, \langle\phi_\epsilon| e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}\hat{\rho_B}|\phi_\epsilon\rangle \\ &\overset{(*)}{=} \int d\epsilon\ e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon u} p_\epsilon \langle\phi_\epsilon|\hat{F}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}|\phi_\epsilon\rangle,\end{aligned} \tag{B.76}$$

donde en $(*)$ se ha tenido en cuenta que $|\phi_\epsilon\rangle$ es autoestado de $\hat{H}_B$ y la definición de $\hat{\rho}_B$ vista en (3.9) tal que:

$$\hat{\rho}_B = e^{-\beta\hat{H}_B}\left[\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{H}_B}\right)\right]^{-1}|\phi_\epsilon\rangle \equiv p_\epsilon |\phi_\epsilon\rangle, \tag{B.77}$$

con $p_\epsilon \geq 0$. Introduciendo ahora la matriz identidad tal que $\hat{I} = \int d\epsilon' |\phi_{\epsilon'}\rangle\langle\phi_{\epsilon'}|$, la ecuación (B.76) nos quedaría

$$\mathrm{Tr}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}\hat{\rho_B}\right] = \int d\epsilon\, d\epsilon' e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon u} p_\epsilon \langle\phi_\epsilon|\hat{F}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}|\phi_{\epsilon'}\rangle\ \langle\phi_{\epsilon'}|\hat{F}|\phi_\epsilon\rangle. \tag{B.78}$$

Aplicando de nuevo que $|\phi_{epsilon'}\rangle$ es autofunción de $\hat{H}_B$ se tiene que

$$\mathrm{Tr}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}\hat{\rho_B}\right] = \int d\epsilon\ d\epsilon' e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon-\epsilon')u} p_\epsilon \left| \langle\phi_{\epsilon'}|\hat{F}|\phi_\epsilon\rangle\right|^2. \tag{B.79}$$

Con el objetivo de simplificar la notación, denotemos $g(u) \equiv \mathrm{Tr}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_B u}\hat{F}\hat{\rho_B}\right]$. Para concluir la demostración consideremos otro vector arbitrario $|\mathbf{w}\rangle \in \mathbb{C}^N$ con el siguiente producto escalar:

$$\langle\mathbf{w}|g(u)\mathbf{w}\rangle = \sum_{m,n} w_m^* g(u_m - u_n) w_n \tag{B.80}$$

Estudiemos dicho producto para nuestra función $g(u)$:

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{w}|g(u)\mathbf{w}\rangle &= \int d\epsilon\ d\epsilon' \sum_{m,n} w_m^* e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon-\epsilon')(u_m-u_n)} w_n p_\epsilon \left| \langle\phi_{\epsilon'}|\hat{F}|\phi_\epsilon\rangle\right|^2 \\ &= \int d\epsilon\ d\epsilon' \left|\sum_m w_m^* e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon-\epsilon')u_m}\right|^2 p_\epsilon \left| \langle\phi_{\epsilon'}|\hat{F}|\phi_\epsilon\rangle\right|^2.\end{aligned} \tag{B.81}$$

Y ya se tendría el resultado deseado y por tanto, la matriz $\hat{\gamma}(\omega)$ es semidefinida positiva.

B.7. Obtención de la ecuación de evolución en la imagen de Schrödinger

Partimos de la ecuación de evolución del operador densidad reducido en la imagen de interacción, que era

$$\frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} = \frac{-i\lambda^2}{\hbar^2}\left[\hat{H}_{SB}, \hat{\rho}_S^I(t)\right] + \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\sum_{\omega,k,l}\gamma_{kl}(\omega)\left[2\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S^I(t)\hat{A}_k^\dagger(\omega) - \{\hat{A}_k^\dagger(w)\hat{A}_l(\omega), \hat{\rho}_S^I(t)\}\right].$$

A continuación, escribimos de manera explícita el operador densidad reducido en la imagen de interacción como se vio en (3.7). Estudiando los términos por se parado se obtiene que

Primer término:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} &= \frac{d}{dt}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\right] = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_S e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} \\ &+ e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)\hat{H}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t},\end{aligned} \tag{B.82}$$

Segundo término:

$$\begin{aligned}\frac{-i\lambda^2}{\hbar}\left[\hat{H}_{SB}, \hat{\rho}_S^I(t)\right] &= \frac{-i\lambda^2}{\hbar}\left[\hat{H}_{SB}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} - e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{H}_{SB}\right] \\ &\overset{(*)}{=} \frac{-i\lambda^2}{\hbar}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{H}_{SB}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} - e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)\hat{H}_{SB}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\right],\end{aligned} \tag{B.83}$$

donde en $(*)$ se ha usado que $\hat{H}_{SB}$ conmuta con $\hat{H}_S$ que se tiene como consecuencia directa de que $\hat{H}_S$ conmute con $\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)$, que ha sido probado en el anexo B.4.2.

Tercer término:

$$\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S^I(t)\hat{A}_k^\dagger(\omega) = \hat{A}_l(\omega)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{A}_k^\dagger(\omega), \tag{B.84}$$

Cuarto término:

$$\begin{aligned}\{\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega), \hat{\rho}_S^I(t)\} &= \hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S^I(t) + \hat{\rho}_S^I(t)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega) \\ &= \hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega) \\ &\overset{(*)}{=} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t},\end{aligned} \tag{B.85}$$

donde en $(*)$ se ha vuelto a usar el hecho de que $\hat{H}_{SB}$ conmuta con $\hat{H}_S$.

A continuación, multiplicaremos las cuatro expresiones que hemos desarrollado por $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}$ por la izquierda y $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}$ por la derecha, teniendo en cuenta que $\hat{H}_S$ conmuta con dichas exponenciales. De manera que

Expresión (B.82):

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_S\hat{\rho}_S(t) + \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} - \frac{i}{\hbar}\hat{\rho}_S(t)\hat{H}_S = \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t)\right] \tag{B.86}$$

Expresión (B.83):

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\frac{-i\lambda^2}{\hbar}\left[\hat{H}_{SB}, \hat{\rho}_S^I(t)\right]e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} = \frac{-i\lambda^2}{\hbar}\left[\hat{H}_{SB}\hat{\rho}_S(t) - \hat{\rho}_S(t)\hat{H}_{SB}\right] = \frac{-i\lambda^2}{\hbar}\left[\hat{H}_{SB}, \hat{\rho}_S(t)\right], \tag{B.87}$$

Expresión (B.84):

$$\begin{aligned}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S^I(t)\hat{A}_k^\dagger(\omega)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{A}_l(\omega)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{A}_k^\dagger(\omega)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\omega t}\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t}\hat{A}_k^\dagger(\omega) \\ &= \hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(t)\hat{A}_k^\dagger(\omega),\end{aligned} \tag{B.88}$$

Expresión (B.85):

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\{\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(w), \hat{\rho}_S^I(t)\}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} = \{\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega), \hat{\rho}_S(t)\}. \tag{B.89}$$

De esta forma, combinando los términos (B.86), (B.87), (B.88) y (B.89), llegamos a que la ecuación de evolución del operador densidad reducido en la imagen de Scrhödinger viene dada por:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} &= \frac{\lambda^2}{\hbar}\sum_{\omega,k,l}\gamma_{kl}(\omega)\left[2\hat{A}_l(\omega)\hat{\rho}_S(t)\hat{A}_k^\dagger(\omega) - \{\hat{A}_k^\dagger(\omega)\hat{A}_l(\omega), \hat{\rho}_S(t)\}\right] \\ &- \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_S + \lambda^2\hat{H}_{SB}, \hat{\rho}_S(t)\right].\end{aligned} \tag{B.90}$$

Anexo C

Propiedades traza

Esta sección del trabajo se centra en llevar a cabo las demostraciones de propiedades de los operadores traza y traza parcial que han sido utilizadas a lo largo del trabajo. Se tiene que estas dos aplicaciones se definen sobre un operador arbitrario $\hat{A} \in \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ con traza bien definida como:

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\right] = \sum_{i=1}^{N} a_{ii} \qquad \text{y} \tag{C.1}$$

$$\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\right] = \hat{A}_S \mathrm{Tr}\left[\hat{A}_B\right] = \hat{A}_S \sum_{i=N_S+1}^{N_B} a_{ii}, \tag{C.2}$$

donde N es la dimensión del espacio total verificando que $N = N_S + N_B$ y a_{ij} son los elementos de matriz correspondientes al operador $\hat{A}$.

Destacar que como estamos trabajando en un espacio de Hilbert factorizado, siempre vamos a poder escribir un operador de este espacio como: $\hat{A} = \hat{A}_S \otimes \hat{A}_B$, con $\hat{A}_S \in L_{\mathcal{H}_S}$ y $\hat{A}_B \in L_{\mathcal{H}_B}$.

En primer lugar, comenzaremos demostrando una serie de propiedades que verifica la aplicación traza de manera general. Consideremos tres operadores arbitrarios $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C} \in L_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B}$ que tengan la traza bien definida. Las propiedades que veremos son dos:

- $\underline{\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{B}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{B}\hat{A}\right]}$

  Vamos a calcular de manera separada los dos términos de la igualdad y llegaremos a que son iguales. Denotemos como a_{ij} los elementos de la matriz que representa al operador $\hat{A}$ y b_{ij} los correspondientes al operador $\hat{B}$.

Sabemos que el elemento ii de la matriz resultante del producto vendrá dado por: $\sum_{j=1}^{N} a_{ij}b_{ji}$ y por la definición de traza, (C.1), se tiene que:

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{B}\right] = \sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{N} a_{ij}b_{ji}\right) = \sum_{i,j=1}^{N} a_{ij}b_{ji}. \tag{C.3}$$

Para el caso del segundo término de la igualdad, se tiene que el elemento ii de la matriz resultante del producto vendrá dado por $\sum_{j=1}^{N} b_{ij}a_{ji}$ y entonces:

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{B}\hat{A}\right] = \sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{N} b_{ij}a_{ji}\right) = \sum_{i,j=1}^{N} b_{ij}a_{ji}. \tag{C.4}$$

De esta forma, se puede observar que las expresiones (C.3) y (C.4) son exactamente iguales pues estamos sumando sobre todos los valores de i y j; por tanto, ya tenemos el resultado deseado. □

- <u>$\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{B}\hat{C}\hat{A}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{C}\hat{A}\hat{B}\right]$</u>

  Este resultado es bastante inmediato a partir del anterior: $\mathrm{Tr}\left[\hat{M}\hat{N}\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat{N}\hat{M}\right]$. Recordemos que todos los operadores vienen representados por matrices.

  Por un lado, para probar la primera igualdad basta con considerar las matrices $\hat{M} = \hat{A}$ y $\hat{N} = \hat{B}\ \hat{C}$ y ya se tendría.

  Por otro lado, para probar la segunda igualdad lo haremos a través del primer y tercer término; considerando las matrices $\hat{M} = \hat{A}\ \hat{B}$ y $\hat{N} = \hat{C}$. □

A continuación, procederemos con las demostraciones de ciertas propiedades que verifica la aplicación traza parcial. Consideremos de nuevo un operador arbitrario $\hat{A}, \hat{C} \in L_{\mathcal{H}_S\otimes\mathcal{H}_B}$ que tenga la traza bien definida. Además, en algunas de estas propiedades denotaremos $\hat{I}_S$ como el operador identidad en el espacio $L_{\mathcal{H}_S}$. Entonces las propiedades que veremos son:

- <u>$\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\hat{I}_S\otimes\hat{C}_B\right] = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{I}_S\otimes\hat{C}_B\hat{A}\right]$</u>

  Sea $\hat{A} = \hat{A}_S\otimes\hat{A}_B$ y $\hat{C} = \hat{I}_S\otimes\hat{C}_B$, como estamos trabajando en un espacio de operadores lineales y continuos de un espacio de Hilbert factorizado, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S\otimes\mathcal{H}_B$, tenemos que el producto de estos dos operadores se podrá escribir como:

$$\hat{A}\hat{C} = \hat{A}_S\hat{I}_S\otimes\hat{A}_B\hat{C}_B. \tag{C.5}$$

Por tanto, estudiemos la traza parcial de este producto; por la definición de esta aplicación, (C.2), se tiene que:

$$\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\hat{C}\right] = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}_S\hat{I}_S \otimes \hat{A}_B\hat{C}_B\right] = \hat{A}_S\hat{I}_S\mathrm{Tr}\left[\hat{A}_B\hat{C}_B\right]. \tag{C.6}$$

A continuación, por la primera propiedad que hemos probado se tiene que $\mathrm{Tr}\left(\hat{A}_B\hat{C}_B\right) = \mathrm{Tr}\left(\hat{C}_B\hat{A}_B\right)$; y además, cualquier operador conmuta con el operador identidad, por tanto $\hat{A}_S\hat{I}_S = \hat{I}_S\hat{A}_S$. Entonces, la traza del producto nos quedaría:

$$\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\hat{C}\right] = \hat{I}_S\hat{A}_S\mathrm{Tr}\left[\hat{C}_B\hat{A}_B\right] = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{I}_S \otimes \hat{C}_B\hat{A}\right]. \tag{C.7}$$

□

- $\underline{\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\hat{C}_S \otimes \hat{C}_B\right] = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\hat{I}_S \otimes \hat{C}_B\right]\hat{C}_S}$

Análogamente, consideremos ahora $\hat{A} = \hat{A}_S \otimes \hat{A}_B$ y $\hat{C} = \hat{C}_S \otimes \hat{C}_B$, y como ya se vio antes, el producto de estos dos operadores se escribirá como $\hat{A}\hat{C} = \hat{A}_S\hat{C}_S \otimes \hat{A}_B\hat{C}_B$. Estudiemos entonces su traza:

$$\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\hat{C}\right] = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}_S\hat{C}_S \otimes \hat{A}_B\hat{C}_B\right] = \hat{A}_S\hat{C}_S\mathrm{Tr}\left[\hat{A}_B\hat{C}_B\right]. \tag{C.8}$$

Ahora usaremos que el resultado de aplicar la traza es un número y también que cualquier operador por la identidad es de nuevo dicho operador:

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\hat{C}\right] &= \hat{A}_S\mathrm{Tr}\left[\hat{A}_B\hat{C}_B\right]\hat{C}_S = \hat{A}_S\hat{I}_S\mathrm{Tr}\left[\hat{A}_B\hat{C}_B\right]\hat{C}_S \\ &= \mathrm{Tr_B}\left[\hat{A}\hat{I}_S \otimes \hat{C}_B\right].\end{aligned} \tag{C.9}$$

Y ya se tendría el resultado deseado. □

- $\underline{\mathrm{Tr_B}\left[\hat{C}_S \otimes \hat{C}_B\hat{A}\right] = \hat{C}_S\mathrm{Tr_B}\left[\hat{I}_S \otimes \hat{C}_B\hat{A}\right]}$

Volvemos a considerar los operadores anteriores $\hat{A} = \hat{A}_S \otimes \hat{A}_B$ y $\hat{C} = \hat{C}_S \otimes \hat{C}_B$ y el correspondiente producto de estos dos $\hat{A}\hat{C} = \hat{A}_S\hat{C}_S \otimes \hat{A}_B\hat{C}_B$. Estudiando la traza parcial del producto se tiene:

$$\mathrm{Tr_B}\left[\hat{C}\hat{A}\right] = \mathrm{Tr_B}\left[\hat{C}_S\hat{A}_S \otimes \hat{C}_B\hat{A}_B\right] = \hat{C}_S\hat{A}_S\mathrm{Tr}\left[\hat{C}_B\hat{A}_B\right]. \tag{C.10}$$

A continuación, introduciremos el operador identidad entre $\hat{A}_S$ y $\hat{C}_S$, de manera que:

$$\mathrm{Tr_B}\left[\hat{C}\hat{A}\right] = \hat{C}_S\hat{I}_S\hat{A}_S\mathrm{Tr}\left[\hat{C}_B\hat{A}_B\right] = \hat{C}_S\mathrm{Tr_B}\left[\hat{I}_S \otimes \hat{C}_B\hat{A}\right]. \tag{C.11}$$

□