### UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI "FEDERICO II"



### Scuola Politecnica e delle Scienze di Base Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Dipartimento di Fisica "Ettore Pancini"

Laurea Triennale in Fisica

### Integrale sui cammini per modelli Spin-Bosone

**Relatori:** Carmine Antonio Perroni Candidato: Francesco Formicola Matr. N85001407

Anno Accademico 2020/2021

# Indice

Introduzione 1			
1	Path	Integral	4
	1.1	Rappresentazioni della meccanica quantistica	4
	1.2	L'integrale sui cammini	5
		1.2.1 Kernel della Particella libera	6
		1.2.2 Formulazione Hamiltoniana del Path Integral	6
		1.2.3 Formulazione Lagrangiana del Path Integral	10
	1.3	Il Path Integral in Meccanica Statistica	11
		1.3.1 Funzione di partizione	11
		1.3.2 Operatore statistico	13
2	Sist	emi Dissipativi	14
	2.1	Formalismo del Funzionale d'Influenza	14
		2.1.1 Condizioni al controno generali	15
		2.1.2 Condizioni al contorno separabili	17
	2.2	Esplicitazione del Funzionale d'Influenza	18
3	Mod	ello Spin-Bosone	21
	3.1	Sistemi dissipativi a due stati	21
		3.1.1 Limite Adiabatico	24
	3.2	Termodinamica	25
		3.2.1 Funzione di Partizione	26
	3.3	Dinamica	27
Co	Conclusioni		
A	Prop	pagatore dell'oscillatore armonico	33
	•	A.0.1 Esponenziale dell'azione classica	34
		A.0.2 Integrale sui cammini di $\mathcal{L}_{u}$	34
		A.0.3 Meccanica statistica dell'ocillatore armonico	35
B	Calc	olo del Funzionale d'Influenza per tempi reali	36
С	Calc	olo del Funzionale d'Influenza per tempi immaginari	38

## Introduzione

In quasi tutte le situazioni della fisica succede che l'oggetto dello studio sia a contatto con l'ambiente, che va ad influire sulle proprietà del sistema in analisi. Tale ambiente, che possiamo anche chiamare reservoir o bagno termico, è molto più grande del primo sistema, motivo per cui dall'interazione con quest'ultimo non vede cambiare le proprie caratteristiche.

Il più semplice degli esempi di interazione con l'ambiente esterno è un sistema isolato che è oggetto di misurazione. In questo caso appare evidente che l'apparato sperimentale di misura produce una perturbazione sul sistema. Ciò è particolarmente importante in meccanica quantistica, dove è buona norma calcolare una perturbazione costante all'Hamiltoniana dovuta alla misurazione.

Ma nella realtà un sistema non è mai del tutto isolato, dunque non si può mai, a rigore, considerare un sistema fisico privo di attriti e effetti dissipativi. Ovviamente non in tutti i casi è necessario considerare tali effetti: su scala atomica il problema di singolo corpo può essere approcciato anche solo tramite campi conservativi. Stessa cosa dicasi a livello celeste. Ma già sistemi reali a molti corpi non consentono l'approssimazione esatta di sistema isolato. Inoltre per le Teorie Quantistiche di Campo considerare lo spazio come vuoto non è esatto nemmeno concettualmente.

Constatato che quindi è fondamentale saper prevedere gli affetti che il contatto col bagno ha sul sistema, la ora domanda è come valutare tali effetti dissipativi. In meccanica classica si possono inserire nelle equazioni del moto termini di attrito, viscosità, smorzamento e altri ancora. Questo però è molto complicato in meccanica quantistica, dove si incontrano molti problemi nel quantizzare i termini di attrito, specialmente quelli che dipendono dalla velocità.

Un ulteriore complicazione si aggiunge quando i gradi di libertà aumentano a dismisura. In queste condizioni, infatti, non solo è complicato risolvere le equazioni, ma anche impostarle, poiché è impossibile conoscere i parametri e le condizioni iniziali di ciascun corpo.

I sistemi a molti corpi sono oggetto di studio della meccanica statistica. Qui il modo molto semplice che si è trovato per modellizzare l'accoppiamento tra bagno e sistema è una termalizzazione di quest'ultimo: il contatto (se pensiamo ad un ensamble di tipo canonico) si manifesta in fluttuazioni dell'energia del sistema finché non si raggiunge un equilibrio detto termico. In questa condizione i due sistemi condividono il valore di alcune grandezze, prima fra tutte la temperatura (ma in termodinamica dei grancanonici se ne considerano all'occorrenza anche altre, come la pressione e il potenziale chimico).

Tale modus operandi è molto semplice, poiché non richiede alcun tipo di informazione sul reservoir. Tra l'altro, non essendo il bagno l'oggetto dello studio, non siamo neanche interessati a saperne qualcosa. Talvolta, però, si ha la necessità di studiare più dettagliatamente gli effetti dell'accoppiamento tra sistema e ambiente. Se si uniscono i problemi dei gradi di libertà e della quantizzazione dei termini di attrito, si conclude che impostare delle equazioni non è una strada percorribile. Come procedere ?

Un concetto di accoppiamento tra sistema e ambiente molto usato e con molto successo segue l'idea di Feynman e Vernon di modellizzare il reservoir con un insieme di oscillatori armonici. Tale sistema è molto semplice, in quanto non è difficile trattare i gradi di libertà singolarmente. Difatti in meccanica quantistica dell'oscillatore armonico è noto tutto. Tale bagno va poi accoppiato tramite alcuni coefficienti con il sistema in osservazione. Alcune applicazioni di tale approccio sono un atomo che si ritrova a contatto con un campo elettro-magnetico, per esempio un fascio ottico che incide sulla materia, oppure le cariche in un reticolo solido che interagiscono con i fononi. Tali sistemi sono noti in letteratura come polaroni.

Oggi molti studi si stanno concentrando su questo campo con particolare attenzione al Qubit. Questo è infatti il bit su cui verranno costruiti i computer quantistici, ma l'analisi delle sue caratteristiche è tutt'altro che semplice.

L'analisi della dinamica e della termodinamica di un sistema dissipativo si implementa tramite il metodo della Master Equation; oppure con il formalismo del Funzionale d'Influenza. Quest'ultimo sarà oggetto di studio di questa tesi. Esso risulta un'interessante applicazione del Path Integral, una rappresentazione della meccanica quantistica che Feynman portò alla ribalta.

Il percorso di questa tesi comincerà nel primo capitolo con un'introduzione al Path Integral. Qui vedremo l'integrale sui cammini sia nella sua formulazione Hamiltoniana, sia nella Lagrangiana. Chiariremo la sua interpretazione e vedremo come utilizzare il Path Integral per ricavare, nell'ambito della meccanica statistica, la funzione di partizione all'equilibrio termico e l'operatore statistico.

Il secondo capitolo verterà proprio sull'operatore statistico. Poiché è da quest'ultimo che ricaviamo tutte le informazioni, per risolvere il problema della dissipazione occorre un'espressione che ci restituisca l'evoluzione temporale della matrice densità. Usando il Path Integral giungeremo al formalismo del Funzionale d'Influenza. Questo è una serie di integrali che racchiudono tutto il contributo del reservoir sul sistema.

I calcoli espliciti del Funzionale d'Influenza su tempi immaginari e su tempi reali, assieme all'esplicitazione del Path Integral per un oscillatore, sono riportati nelle appendici. Tali risultati servono per studiare rispettivamente l'operatore statistico all'equilibrio termodinamico e come si evolve nel tempo.

Nel terzo e ultimo capitolo useremo la teoria sviluppata per studiare la dinamica e la termodinamica dei sistemi dissipativi a due stati. Essi sono il più facile modello per studiare gli effetti di dissipazione (eventualmente anche di decoerenza, ma noi non ce ne occuperemo) di un sistema con pochi gradi di libertà, nel nostro caso uno spin. Il modello presentato, poiché il bagno cui lo spin è accoppiato è formato da oscillatori bosonici, è detto Spin-Bosone.

## **Capitolo 1**

### **Path Integral**

In questo primo capitolo studieremo una rappresentazione della meccanica quantistica diversa da quelle usate tradizionalmente, cioè l'integrale sui cammini, la cui teorizzazione fu ultimata, dopo alcuni lavori di Wiener e Dirac, da Richard Feynman nel 1948.

Nonostante un certo scetticismo iniziale e il fatto che sia una rappresentazione in cui è generalmente molto difficile fare calcoli espliciti, oggi il metodo dell'integrale sui cammini si è ampiamente affermato. Esso trova particolare riscontro in meccanica statistica, ottica quantistica, gravità quantistica, tutti gli esperimenti di tipo diffrattivo e soprattutto nelle teorie quantistiche dei campi, nelle quali il Path Integral permette di calcolare con esattezza i coefficienti di accoppiamento.

Nella prima parte del capitolo vedremo le formulazioni Hamiltoniana e Lagrangiana dell'integrale sui cammini, spiegandone le differenze e le interpretazioni. Nella seconda parte vedremo come trattare anche la meccanica statistica in questo formalismo. In appendice A è riportato il calcolo esplicito dell'espressione del Path Integral nel caso di oscillatore armonico, che servirà più avanti per i calcoli del Funzionale d'Influenza.

#### **1.1 Rappresentazioni della meccanica quantistica**

Nella maggioranza delle applicazioni della meccanica quantistica il sistema fisico è descritto da un vettore dello spazio di Hilbert, che è soluzione dell'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle.$$
(1.1)

Tale equazione fornisce, a partire dalla condizione iniziale  $|\psi(t=0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle$ , l'evoluzione temporale del sistema in rappresentazione di Schrödinger. Questa è definita da un operatore unitario  $\hat{U}(t, t_0)$  esprimente la propagazione del vettore  $|\psi(t_0)\rangle$  dal tempo  $t_0$  al tempo t. Applicando l'operatore al vettore si ha il vettore  $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ . Tale operatore, si può vedere, a sua volta risolve l'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = \hat{H}(t)\hat{U}(t).$$
(1.2)

La risoluzione può essere cercata trasformando l'equazione da differenziale a integrale (integrando nel tempo) e poi applicando un metodo iterativo che ci porta allo Sviluppo di Dayson [7]:

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{T}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \hat{H}(t')dt'},$$
(1.3)

ove  $\hat{T}$  è l'operatore di ordinamento temporale. Se  $\hat{H}$  è indipendente dal tempo la (1.3) diventa:

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t-t_0) = e^{-\frac{1}{\hbar}H(t-t_0)}.$$
(1.4)

Ma, com'è noto, in meccanica quantistica possono essere utilizzate varie rappresentazioni, in base alle necessità del calcolo in essere. Nella rappresentazione di Schrödinger l'osservabile fisico, descrivente la grandezza che si vuole misurare, è indipendente dal tempo e l'evoluzione temporale è scandita dal vettore di stato nella maniera sopra vista. Un'altra rappresentazione molto usata, per certi versi più simile alla fisica classica, è quella di Heisenberg, in cui invece lo stato è invariante nel tempo:  $|\psi(t)\rangle = |\psi\rangle \forall t$  e l'evoluzione temporale è scandita dell'evoluzione dell'osservabile data dalla risoluzione dell'equazione del moto di Heisenberg:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}^{(H)} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \Big[ \hat{A}^{(H)}, \hat{H} \Big] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}^{(S)}; \tag{1.5}$$

ove gli indici  $S \in H$  indicano i due operatori nelle reppresentazioni di Schrödinger e Heisenmber rispettivamente. Per la precisione:  $\hat{A}^{(H)} = \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{A}^{(S)}\hat{U}(t)$ . Oltre queste due rappresentazioni, che sono le più usate, ve ne sono altre, come quella di interazione, molto usata per calcolare le correzioni perturbative, e il Path integral, su cui ora ci soffermeremo.

#### 1.2 L'integrale sui cammini

Il formalismo del Path Integral pone particolare accento sul Kernel della funzione d'onda.

Consideriamo la funzione d'onda  $\psi(q_i, t_i) = \langle q_i | \psi(t_i) \rangle$ , la cui evoluzione temporale è  $\psi(q_f, t_f) = \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \psi(t_i) \rangle$ . Usiamo ora il teorema spettrale per inserire l'identità nella base degli autovettori dell'operatore posizione:

$$\psi(q_f, t_f) = \int dq_i \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | q_i \rangle \langle q_i | \psi(t_i) \rangle = \int dq_i \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | q_i \rangle \psi(q_i, t_i).$$
(1.6)

La funzione  $K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | q_i \rangle = \langle q_f(t_f) | q_i(t_i) \rangle$  è detta funzione di Green. Nel formalismo del Path integral questa funzione è anche chiamata Propagatore, o Kernel, di Feynman. Noi ragioneremo per una particella in una dimensione, ma il tutto è facilmente generalizzabile per un sistema di N particelle spinless in tre dimensioni: nel qual caso sarebbe  $q = (q_1, ..., q_{3N})$ .[4]

Il propagatore ci dà informazioni su una particella che viaggia dal punto spaziale  $q_i$  al tempo  $t_i$  fino al punto  $q_f$  al tempo  $t_f$ . Feynman intuì che tale propagatore potesse essere connesso con tutti i percorsi percorribili dalla particella che avessero tali coordinate spazio-temporali come punto di partenza e di arrivo.

#### **1.2.1** Kernel della Particella libera

Esplicitiamo il propagatore per una particella libera: l'Hamiltoniana è  $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ . Inseriamo una duplice identità nella base degli autostati dell'impulso:

$$\langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | q_i \rangle = \int dp' \int dp \, \langle q_f | p' \rangle \, \langle p' | \hat{U} | p \rangle \, \langle p | q_i \rangle \,; \tag{1.7}$$

ricordiamo che  $\langle q_f | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'q_f} e \langle p | q_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}pq_i}$ . Inoltre  $\hat{H}_0$  è diagonale sugli autoket dell'impulso, quindi  $\langle p' | \hat{U} | p \rangle = U(p) \langle p' | p \rangle = exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t'-t) \right\} \delta(p-p')$ , ove p è ora un autovalore, non più un operatore.[6] Giungiamo dunque a:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = K(q_f - q_i, t_f - t_i)$$

$$= \int dp' \int dp \frac{1}{2\pi\hbar} exp\left\{\frac{i}{\hbar}pq_f\right\} exp\left\{-\frac{i}{\hbar}pq_i\right\} exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_f - t_i)\right\} \delta(p - p').$$

$$= \int dp \frac{1}{2\pi\hbar} exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_f - t_i)\right\} exp\left\{\frac{i}{\hbar}p(q_f - q_i)\right\}.$$
(1.8)

Tale integrale è pseudo-gaussiano. La soluzione finale è:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar(t_f - t_i)}} exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q_f - q_i)^2}{(t_f - t_i)}\right\}.$$
(1.9)

Notiamo ora che per una particella libera la lagrangiana è  $\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{q}(t)$ , con q(t) traiettoria della particella. Ma l'unico moto concesso per tale Hamiltoniana è quello rettilineo uniforme con  $\dot{q}(t) = \frac{q_f - q_i}{t_f - t_i} = cost$ . Da questo possiamo ricavarci l'espressione dell'azione classica:

$$\mathcal{S}_{cl}([q(t)]; t_i, t_f) = \int_{t_i}^{t_f} d\tau \mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t), t) = \frac{1}{2} m \dot{q}(t) \int_{t_i}^{t_f} d\tau$$

$$= \frac{1}{2} m \frac{(q_f - q_i)^2}{(t_f - t_i)^2} \int_{t_i}^{t_f} d\tau = \frac{1}{2} m \frac{(q_f - q_i')^2}{(t_f - t_i)},$$
(1.10)

che è quasi l'esponente della (1.9). Possiamo quindi scrivere il propagatore come:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar(t_f - t_i)}} e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{cl}}.$$
(1.11)

#### **1.2.2** Formulazione Hamiltoniana del Path Integral

Ma per la particella libera solo un moto è possibile sia nel caso classico che nel caso quantistico. Per una Hamiltoniana generica questo non è vero. Benchè difatti la traiettoria classica sia sempre univoca, quantisticamente il principio di indeterminazione su q dà luogo a molti percorsi possibili, tutti che, aventi in comune le coordinate spaziotemporali di partenza e di arrivo, differiscono ora più ora meno dalla traiettoria classica. Ciò significa che la (1.11) non è immediatamente generalizzabile nel caso di sistemi con altre Hamiltoniane, poiché in questo caso non basta sostituire l'azione della particella libera con l'azione riferente alla Lagrangiana del sistema specifico. [6] Per una Hamiltoniana generica occorre suddividere l'intervallo temporale in tanti piccoli intervallini di numero N tali che  $t_{i+1} - t_i = \epsilon$  piccolo a picere  $\forall i = 1, ..., N$ . L'operatore di evoluzione temporale sarà fattorizzabile come:

$$\hat{U}(t_f, t_i) = \hat{U}(t_N, t_{N-1})\hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2})....\hat{U}(t_2, t_1) = \prod_{i=1}^N \hat{U}(t_{i+1}, t_i).$$
(1.12)

Il propagatore sarà

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f(t_f) | q_i(t_i) \rangle = \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | q_i \rangle$$
  
=  $\lim_{N \to +\infty} \langle q_f | \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots \hat{U}(t_2, t_1) | q_i \rangle.$  (1.13)

Inseriamo N-1 identità nella base delle autofunzioni della posizione tra gli N operatori di evoluzione temporale:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \lim_{N \to +\infty} \int dq_{N-1} \dots dq_1 \langle q_N | \hat{U}(t_N, t_{N-1}) | q_{N-1} \rangle \dots \langle q_2 | \hat{U}(t_2, t_1) | q_1 \rangle;$$
(1.14)

più compattamente scriviamo

$$K(q_{f}, t_{f}; q_{i}, t_{i}) = \lim_{N \to \infty} \int \prod_{i=1}^{N} dq_{i} \langle q_{i} | \hat{U}(t_{i}, t_{i-1}) | q_{i-1} \rangle$$
  
$$= \lim_{N \to +\infty} \prod_{i=1}^{N} \int dq_{i} \langle q_{i} | \hat{U}(t_{i}, t_{i-1}) | q_{i-1} \rangle.$$
 (1.15)

Da qui abbiamo, per definizione di propagatore:

$$\psi(q_f, t_f) = \lim_{N \to +\infty} \prod_{i=1}^N \int dq_i \, \langle q_i | \hat{U}(t_i, t_{i-1}) | q_{i-1} \rangle \, \psi(q_i, t_i), \tag{1.16}$$

Dove la n - ma integrazione proviene dalla (1.6). Consideriamo ora l'i - mo integrale del propagatore, cioè quello che conduce da  $t_{i-1}$  a  $t_i$ :

$$\langle q_i | \hat{U}(t_i, t_{i-1}) | q_{i-1} \rangle = \langle q_i | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon} | q_{i-1} \rangle .$$
(1.17)

Valutare quest'elemento di matrice è difficile perché, non sapendo com'è fatta l'hamiltoniana, non sappiamo come agisce sugli autostati della posizione.[4] Ciò è reso particolarmente problematico dal fatto che, poiché  $0 \neq [\hat{p}, \hat{q}] = i\hbar$ , non è indifferente far agire prima l'uno o l'altro tra  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$ : vi è dunque un problema di ordinamento degli operatori. L'ordinamento più usato segue il Criterio di Weyl. Generalmente  $H = p\dot{q} - \mathcal{L}$ , quindi in ogni intervallo  $[t_i - t_{i-1}]$  posso prendere p = cost. Non è così purtroppo per q poichè Hdipende da  $\dot{q}$ , quindi se prendessimo q = cost la derivata prima sarebbe nulla. L'ordinamento di Weyl vede la q come una funzione continua  $q(t) = (i - \frac{t}{\epsilon})q_{i-1} + (\frac{t}{\epsilon} - (i-1))q_i$ , che ci permette di prendere il valore di q nel punto medio dell'intervallo temporale:

$$H[\hat{p}(t), \hat{q}(t)] = H\left[p_i, \frac{q_i + q_{i-1}}{2}\right] = H[p_i, \bar{q}_i].$$
(1.18)



Figura 1.1: Traiettorie nello spazio dei momenti. [4]



Figura 1.2: Traiettorie nello spazio delle configurazioni. [4]

Tale procedimento viene detto Discretizzazione del punto medio.

Torniamo ora allo studio della (1.17): inseriamo l'identità negli autostati dell'impulso nell'intervallo i - mo[1]:

$$\int dp_i \langle q_i | p_i \rangle \langle p_i | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon} | q_{i-1} \rangle = \int dp_i \langle q_i | p_i \rangle \langle p_i | q_{i-1} \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} H[p_i, \bar{q}_i] \epsilon}$$

$$= \int dp_i \frac{1}{2\pi\hbar} exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p_i (q_i - q_{i-1}) \right\} exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H[p_i, \bar{q}_i] \epsilon \right\}$$

$$= \int dp_i \frac{1}{2\pi\hbar} exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \left[ \frac{p_i (q_i - q_{i-1})}{\epsilon} - \frac{i}{\hbar} H[p_i, \bar{q}_i] \right] \right\}.$$
(1.19)

Inseriamo la (1.19) nella (1.15):

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \lim_{N \to +\infty} \prod_{i=1}^{N-1} \int dq_i \prod_{i=1}^N \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar} \left[\frac{p_i(q_i - q_{i-1})}{\epsilon} - H[p_i, \bar{q}_i]\right]\right\};$$
(1.20)

ora usiamo le seguenti definizioni:

$$\lim_{N \to +\infty} \prod_{i=1}^{N-1} \int dq_i = \int \mathcal{D}q(t)$$

$$\lim_{N \to +\infty} \prod_{i=1}^N \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} = \int \mathcal{D}p(t)$$
(1.21)

e notiamo che:



Figura 1.3: Somma su tuttle le  $dq_i$ [3]

$$\lim_{\substack{N \to +\infty \\ \epsilon \to 0}} \prod_{i=1}^{N} exp\left\{\frac{i\epsilon}{\hbar} \left[\frac{p_i(q_i - q_{i-1})}{\epsilon}\right] - \frac{i}{\hbar}H[p_i, \bar{q}_i]\right\} \\
= \lim_{\substack{N \to +\infty \\ \epsilon \to 0}} exp\left\{\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \epsilon \left[p_i \dot{q}_i - H[p_i, \bar{q}_i]\right]\right\} = exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[p\dot{q} - H[p, q]\right]\right\}.$$
(1.22)

Usando la (22) e la (21) riscriviamo la (20)[4]:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q(t) \int_{p(t_i)=p_i}^{p(t_f)=p_f} \mathcal{D}p(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[ p(t)\dot{q}(t) - H[p(t), q(t)] \right]}$$
(1.23)

Questa è la forma più generale del propagatore, valida per ogni tipo di Hamiltoniana, detta infatti Rappresentazione Hamiltoniana del Path Integral. L'interpretazione che si può dare a  $\mathcal{D}q(t)$  e  $\mathcal{D}p(t)$  è un'integrazione su tutti i cammini possibili nello spazio delle configurazioni e nello spazio dei momenti.

#### 1.2.3 Formulazione Lagrangiana del Path Integral

Questa formulazione, benché sempre valida, è molto spesso sostituita da un'altra notazione molto più comoda e più semplice. Infatti se l'Hamiltoniana è al più quadratica nelle p, allora è possibile risolvere analiticamente l'integrale in  $\mathcal{D}p(t)$  (per  $p^3$  o superiori l'integrale non è più gaussiano e non si risolve).

Prendiamo quindi un comune operatore hamiltoniano del tipo  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$ . Sostituendolo nella (1.23) si ha:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \lim_{\substack{N \to +\infty\\\epsilon \to 0}} \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q(t) \prod_{i=1}^N \int dp_i \frac{1}{2\pi\hbar} exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar} \left[p_i \dot{q}_i - \frac{p_i^2}{2m} - V(\bar{q}_i)\right]\right\}.$$
(1.24)

Appare evidente quindi che abbiamo una produttoria di N integrali tutti uguali. La parte che ha all'esponente il potenziale, invece, dipendendo solo da q, passa attraverso l'integrale in Dp(t). Il singolo integrale in dp è di tipo gaussiano:

$$\int dp_i \frac{1}{2\pi\hbar} exp\left\{\frac{\mathrm{i}\epsilon}{\hbar} \left[p_i \dot{q}_i - \frac{p_i^2}{2m}\right]\right\} = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m\hbar\pi}{\mathrm{i}\epsilon}} exp\left\{\mathrm{i}\frac{\epsilon}{\hbar}\frac{m}{2}q_i^2\right\},\tag{1.25}$$

che riproduce proprio il risultato già ottenuto per la particella libera. Tenendo conto che il prefattore di normalizzazione della (1.25) filtra l'integrale in Dq(t), il propagatore quindi si scrive:

$$K(q_{f}, t_{f}; q_{i}, t_{i}) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \lim_{\substack{N \to +\infty \\ \epsilon \to 0}} \int_{q(t_{i})=q_{i}}^{q(t_{f})=q_{f}} \mathcal{D}q(t) \prod_{i=1}^{N} e\left\{\frac{i\epsilon}{\hbar} \left[\frac{1}{2m}\dot{q}_{i}^{2} - V(\bar{q}_{i})\right]\right\} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \int_{q(t_{i})=q_{i}}^{q(t_{f})=q_{f}} \mathcal{D}q(t) \lim_{\substack{N \to +\infty \\ \epsilon \to 0}} exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \epsilon\left[\frac{1}{2m}\dot{q}_{i}^{2} - V(\bar{q}_{i})\right]\right\} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \int_{q(t_{i})=q_{i}}^{q(t_{f})=q_{f}} \mathcal{D}q(t) e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_{i}}^{t_{f}} d\tau\mathcal{L}},$$

$$(1.26)$$

dove stavolta  $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = \frac{1}{2m} \dot{q}^2 - V(q)$  è la Lagrangiana riferita alla particolare Hamiltoniana  $H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ . A questo punto possiamo di nuovo usare la definizione del funzionale d'azione:

$$\mathcal{S}([q(t)];t_i,t_f) = \int_{t_i}^{t_f} d\tau \mathcal{L}(q(t),\dot{q}(t),t).$$
(1.27)

Chiamando  $\mathcal{N}$  il prefattore costante, si arriva infine alla rappresentazione Lagrangiana del Path Integral:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \mathcal{N} \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} \mathcal{D}q(t) e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}([q(t)]; t_i, t_f)}.$$
(1.28)

Tale espressione ci dà il kernel come integrazione su tutti i cammini possibili nello spazio delle configurazioni, ognuno dei quali è pesato con l'integrale della lagrangiana inerente a quel percorso. Questa difatti è una funzione che dipende solo dalle q e  $\dot{q}$  e che non sarebbe stata utile per effettuare un'analoga operazione nella formulazione Hamiltoniana del Path Integral che presenta anche traiettorie nello spazio dei momenti.



Figura 1.4: Tutti i cammini dal punto inziale al finale

Nel caso libero non vi era somma sui cammini perchè, come detto, l'unica traiettoria possibile classica era anche quella quantistica. Si nota che quando  $S >> \hbar$  per il principio della fase stazionaria (le oscillazioni diventano troppo rapide per dare contributo) l'integrale di Feynman sarà dominato dalla traiettoria che rende stazionario il funzionale dell'azione, cioè dalla traiettoria classica. Questo significa che quando l'apparato sperimentale è di dimensioni macroscopiche, gli unici cammini importanti, e quindi gli unici da considerare, sono il classico e i primi ad esso vicini, perché solo per questi si ha interferenza costruttiva, mentre per gli altri percorsi si ha interferenza distruttiva. Questa è detta approssimazione semiclassica. Si può inoltre dimostrare che le traiettorie q(t) non sono differenziabili, dunque non permettono di definire su di esse la velocità. Tale caratteristica è importante perché preserva il principio di indeterminazione di Heisenberg.

#### **1.3 Il Path Integral in Meccanica Statistica**

#### **1.3.1** Funzione di partizione

Come già anticipato, un contesto in cui l'integrale sui cammini è particolarmente utile è la meccanica statistica[1].

Consideriamo un ensamble canonico all'equilibrio termico con un reservoir alla temperatura T. Sappiamo dalla meccanica statistica che la probabilità che il macrostato corrisonda al n - mo microstato è:

$$p_n = \rho_{nn} = \langle n | \hat{\rho} | n \rangle = \langle n | e^{-\beta \hat{H}} | n \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta E_n} | n \rangle \langle n |, \qquad (1.29)$$

dove  $|n\rangle$  è l'autostato dell'energia corrispondente all'autovalore dell'energia totale del sistema  $E_n$  e  $\hat{\rho}$  è l'operatore statistico. E' detta invece Funzione di Partizione

$$\mathcal{Z} = \operatorname{Tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\right) = \sum_{n} \langle n|e^{-\beta\hat{H}}|n\rangle, \qquad (1.30)$$

con  $\beta = \frac{1}{K_BT}$ . Confrontando la (1.30) con il propagatore della (1.17) appare evidente che le due relazioni siano simili a meno di una sostituzione  $\mathbb{R} \ni \beta \to -\frac{i}{\hbar}(t_f - t_i) \in \mathbb{C}$ . Il tutto può essere dunque visto come una propagazione con un tempo immaginario, che è facilmente generalizzabile dal tempo reale. Introducendo una doppia identità nella base delle autofunzioni della posizione:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{n} \langle n | e^{-\beta \hat{H}} | n \rangle = \int dq \int dq' \sum_{n} \langle n | q' \rangle \langle q' | e^{-\beta \hat{H}} | q \rangle \langle q | n \rangle = \\ &= \int dq \int dq' \sum_{n} \langle q' | e^{-\beta \hat{H}} | q \rangle \langle q | n \rangle \langle n | q' \rangle = \int dq \int dq' \langle q' | e^{-\beta \hat{H}} | q \rangle \langle q | q' \rangle = (1.31) \\ &= \int dq \int dq' \langle q' | e^{-\beta \hat{H}} | q \rangle \, \delta(q - q') = \int dq \, \langle q | e^{-\beta \hat{H}} | q \rangle \,, \end{aligned}$$

dove  $\langle q|e^{-\beta\hat{H}}|q\rangle$  è detta Funzione di Propagazione Euclidea. Si può notare che l'integrazione è una circuitazione su un percorso chiuso, poichè i due punti estremali coincidono. In Teoria Quantistica dei Campi con tale integrale si lavora nello spazio euclideo  $\mathbb{R}^3 \times S$ , ove S è un cerchio di raggio  $\beta$ . Se  $\beta \to \infty$  lo spazio diventa  $\mathbb{R}^4$ . In fisica della materia, se  $\beta \to \infty$  allora  $T \to 0$  e il sistema precipita nel suo stato fondamentale. Con passaggi del tutto analoghi a quelli usati per il path integral in rappresentazione Hamiltoniana si giunge a:

$$\mathcal{Z} = \oint_{\gamma} \mathcal{D}q(\tau) \oint_{\gamma} \mathcal{D}p(\tau) \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{1}{\hbar}\xi^{E}(q,p)}, \qquad (1.32)$$

con

$$\xi^{E}(q,p) = \int_{0}^{\hbar\beta} d\tau [-\mathrm{i}p(\tau)\dot{q}(\tau) + H(p(\tau),q(\tau))]; \qquad (1.33)$$

dove  $\tau = it$ è l'asse immaginario del tempo lungo cui bisogna integrare e  $\gamma$  è un percorso chiuso tale che  $q(\beta\hbar) = q(0)$ . Sempre nel modo consueto, visto nelle sezioni precedenti, si ricava, per determinate Hamiltoniane, la rappresentazione Lagrangiana della Funzione di Partizione:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{N} \oint_{\gamma} \mathcal{D}q(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}^{E}[q(\tau)]}, \qquad (1.34)$$

con:

$$\mathcal{S}^{E}[q(\tau)] = \int_{0}^{\hbar\beta} d\tau \mathcal{L}^{E}(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau)$$
(1.35)

detta Azione Euclidea, e:

$$\mathcal{L}^{E}(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau) = \frac{1}{2}m\dot{q}^{2} + V(q)$$
(1.36)

detta Lagrangiana Euclidea, che differisce dalla normale per il segno del potenziale. Non abbiamo più fasi ma esponenziali reali negativi. Ciò permise a Weyl di definirvi un significato matematico rigoroso, cioè una misura, là dove non è possibile col propagatore della funzione d'onda perchè i numeri immaginari non permettono lo stesso rigore matematico.

#### **1.3.2** Operatore statistico

Nel paragrafo precedente abbiamo introdotto l'operatore statistico, che in un ensamble canonico ha espressione:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta H}}{\operatorname{Tr}\left(e^{-\beta \hat{H}}\right)}.$$
(1.37)

Esso soddisfa l'equazione di Von Neumann

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Big[\hat{H}, \hat{\rho}\Big] \tag{1.38}$$

e, poichè all'equilibrio la distribuzione di microstati è invariante temporale, tale operatore è diagonalizzabile nelle autofunzioni dell'operatore Hamiltoniano  $|n\rangle$ , cosa che ci permette di scriverlo:

$$\hat{\rho} = \sum_{n} \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n|.$$
(1.39)

Ora, come per qualsiasi operatore, l'evoluzione nel tempo in rappresentazione di Heisenberg sarà data da:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^{\dagger}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)}\hat{\rho}(0)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)}.$$
(1.40)

In rappresentazione delle coordinate:

$$\rho(x, y, t) = \langle x | \hat{\rho}(t) | y \rangle = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t)} \hat{\rho}(0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t)} | y \rangle =$$

$$= \int \int dx' dy' \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t)} | x' \rangle \langle x' | \hat{\rho}(0) | y' \rangle \langle y' | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t)} | y \rangle, \qquad (1.41)$$

dove riconosciamo, oltre l'elemento di matrice di  $\hat{\rho}(0)$ , due propagatori della funzione d'onda studiati a inizio capitolo:

$$\rho(x, y, t) = \int \int dx' dy' K(x, t; x', 0) K^*(y, t; y', 0) \langle x' | \hat{\rho}(0) | y' \rangle.$$
(1.42)

# **Capitolo 2**

### Sistemi Dissipativi

I questo secondo capitolo studieremo come la teoria del Path Integral prima sviluppata possa essere utilizzata per approcciarsi allo studio della decoerenza e della dissipazione in meccanica quantistica. Il metodo si rende necessario perché in meccanica quantistica vi sono molte difficoltà a quantizzare i termini di attrito e viscosità delle equazioni classiche, per cui è difficile impostare un'equazione per studiare la dissipazione dei sistemi.

L'idea sostitutiva è accoppiare il sistema in esame, composto da pochi gradi di libertà, con un reservoir, di invece infiniti gradi di libertà. Tale accoppiamento si manifesta attraverso l'azione complessiva che è composta da tre parti: una del sistema, una del reservoir, una dell'accoppiamento. Poiché sappiamo risolvere integrali al più gaussiani, è importante che l'accoppiamento sia al più quadratico nelle variabili d'integrazione. A tal fine vedremo che la scelta più semplice sono proprio gli oscillatori armonici, quadratici nelle nelle posizioni e di cui sappiamo tutte le funzioni principali.

Nella prima parte del capitolo riprenderemo l'evoluzione nel tempo dell'operatore statistico, arrivando a definire il formalismo del Funzionale d'Influenza. Nella seconda parte spenderemo qualche parola sull'importanza che la scelta delle condizioni iniziali ha sull'evoluzione del sistema.

Nell'ultima parte analizzeremo le espressioni finali del Funzionale d'Influenza calcolato con un reservoir di oscillatori, sia nel caso di tempi reali che nel caso di tempi immaginari. Il primo ci darà l'evoluzione temporale del sistema, il secondo l'operatore statistico per l'analisi all'equilibrio termico. Vedremo che, in ambi i casi, la parte fondamentale di questo procedimento sarà l'interazione della particella con sè stessa a tempi diversi.

Nelle appendici B e C sono riportati i calcoli espliciti per ricavare il Funzionale d'Influenza.

#### 2.1 Formalismo del Funzionale d'Influenza

L'analisi dei sistemi aperti dissipativi che porteremo avanti vede il sistema in analisi composto da due sottosistemi. Il primo è il sistema fisico di interesse, da cui fuoriesce informazione tramite i processi di dissipazione o di decoerenza, che chiameremo S. Il secondo è il reservoir, cioè l'ambiente, di dimensioni molto maggiori rispetto a S, che chiameremo R, che chiude S rispetto all'universo. Gli infiniti oscillatori indurranno sul

sistema una forza smorzante. Non a caso, degli oscillatori già sappiamo tutte le funzioni principali, ricavate nell'appendice A. Il formalismo che useremo è quello del Funzionale d'Influenza, sviluppato da Feynman e Vernon, che deriva direttamente dal Path Integral. Tale metodo è particolarmente utile perchè permette di accorpare i gradi di libertà del reservoir. Infatti poichè siamo interessati a calcolare solo l'operatore statistico del nostro sistema, possiamo valutare la traccia parziale sull'operatore del sistema S + R[1]:

$$\rho_r^S(x, x', t) = \int d\mathbf{q} \rho(x, \mathbf{q}; x', \mathbf{q}, t), \qquad (2.1)$$

dove le x sono le coordinate del sistema, mentre le q sono le coordinate dell'environment, ove  $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_N)$ , ove N può essere in principio un numero qualunque. Per quanto visto nella (1.42):

$$\rho_r^S(x_f, x'_f, t) = \int \int dx_i dx'_i d\mathbf{q}'_i d\mathbf{q}_i d\mathbf{q}_f K(x_f, \mathbf{q}_f, t; x_i, \mathbf{q}_i, 0) K^*(x'_f, \mathbf{q}_f, t; x'_i, \mathbf{q}'_i, 0) \rho(x_i, \mathbf{q}_i, x'_i, \mathbf{q}'_i, 0)$$

$$(2.2)$$

ove:

$$\begin{cases} x(t_i) = x_i \\ x(t_f) = x_f \\ x'(t_i) = x'_i \\ x'(t_f) = x'_f \end{cases} e \begin{cases} \mathbf{q}(t_i) = \mathbf{q}_i \\ \mathbf{q}(t_f) = \mathbf{q}_f \\ \mathbf{q}'(t_i) = \mathbf{q}'_i \\ \mathbf{q}'(t_f) = \mathbf{q}'_f \end{cases}$$
(2.3)

.

e, includendo nell'integrazione anche il prefattore costante:

. . .

$$K(x_f, \mathbf{q}_f, t; x_i, \mathbf{q}_i, 0) = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} \mathcal{D}x(t) \int_{\mathbf{q}(t_i)=\mathbf{q}_i}^{\mathbf{q}(t_f)=\mathbf{q}_f} \mathcal{D}\mathbf{q}(t) exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{S}([x(t), \mathbf{q}(t)]; t_i, t_f)\right\}$$
(2.4)

Osservando la (2.2) si osserva come i due propagatori  $K \in K^*$ , sono interpretabili come propagatori uno avanti e l'altro indietro nel tempo Sostituendo la (2.4) nella (2.2) e riarrangiando i termini, ottieniamo l'operatore statistico ridotto del sistema, dove possiamo raggruppare i termini che dipendono solo dall'ambiente in un funzionale detto Funzionale d'Influenza: esso descrive appunto l'influenza che il reservoir ha sull'operatore statistico ridotto del sistema. L'espressione esplicita però dipende dalle condizioni iniziali di raccordo che mettiamo per modellizzare l'interazione tra il sistema e il bagno termico al tempo iniziale. Molte condizioni iniziali sono possibili: noi tratteremo prima la più generale di queste, che produce un termine detto Funzione di Preparazione, per poi fare i calcoli espliciti con le condizioni di contorno separabili.

#### Condizioni al controno generali 2.1.1

Lavoriamo sull'operatore statistico di tutto il sistema perchè ricordiamo essere questo ad avere un'evoluzione unitaria. Detto  $\hat{\rho}_0$  l'operatore densità di matrice della coppia sistema-ambiente al tempo 0, la più generica condizione iniziale su questo sarà:

$$\hat{\rho_0} = \sum_J \hat{O}_J \hat{\rho}_\beta \hat{O}'_J, \qquad (2.5)$$

dove  $\hat{\rho}_{\beta} = \frac{1}{\overline{z}} e^{-\beta \hat{H}}$  è l'operatore statistico a termalizzazione avvenuta, mentre  $\hat{\rho}_0$  è l'operatore statistico misurato, cioè dopo che sono state effettuate alcune operazioni di misura. Queste, come detto nell'introduzione, perturbano lo stato del sistema e quindi modificano l'operatore. La J - ma operazione di misura è effettuata tramite l'azione degli operatori  $\hat{O}_J, \hat{O}'_J$ , e la sommatoria rappresenta la somma su tutte le operazioni di misura. Tali misurazioni possono agire solo sulle coordinate del sistema oppure anche su quelle del reservoir, su scelta del preparatore. Detti  $O'_j(x', \overline{x}') = \langle \overline{x}' | \hat{O}'_J | x' \rangle$  e  $O_j(\overline{x}, x) = \langle x | \hat{O}_J | \overline{x} \rangle$ , chiameremo *Funzione di Preparazione*:

$$\lambda_0(x,\overline{x},x',\overline{x}') = \sum_J O_J(x,\overline{x}) O'_j(x',\overline{x}').$$
(2.6)

Alcuni esempi possono essere: un'operazione di misura sulla posizione dei gradi di libertà del sistema rispetto a quelli del bagno termico, che equivarrebbe all'applicazione su un determinato proiettore; oppure in alcuni esperimenti di scattering la sezione d'urto differenziale è legata ad alcune variabili dinamiche della particella soggetta a moto Browniano. Dalla (2.6) segue:

$$\rho_0(x, \mathbf{q}, x', \mathbf{q}') = \int d\overline{x} \int d\overline{x}' \lambda_0(x, \overline{x}, x', \overline{x}') \rho_\beta(\overline{x}, \mathbf{q}, \overline{x}', \mathbf{q}')$$
(2.7)

con:

$$\rho_{\beta}(\overline{x}, \overline{\mathbf{q}}, \overline{x}', \overline{\mathbf{q}}') = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta}} \oint \mathcal{D}\overline{x} \mathcal{D}\overline{\mathbf{q}} e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_{EQ}^{E}[\overline{x}, \overline{\mathbf{q}}]}, \qquad (2.8)$$

Ove  $S_{EQ}^E$  è l'azione rappresentante la correlazione tra sistema e bagno prima dell'inizio della dissipazione. Sostituendo la (2.4), la (2.8) e la (2.7) nella (2.2) si giunge a:

$$\rho_r^S(x_f, x'_f, t) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\beta}} \int dx_i dx'_i d\mathbf{q}'_i d\mathbf{q}_i d\mathbf{q}_f d\overline{x} d\overline{x}' \lambda_0(x, \overline{x}, x', \overline{x}') \oint \mathcal{D}\overline{x} \mathcal{D}\overline{\mathbf{q}} \int \mathcal{D}x \mathcal{D}\mathbf{q} \mathcal{D}x' \mathcal{D}\mathbf{q}' d\mathbf{x}' d\mathbf{x}$$

Ora però dobbiamo notare che ciascuna delle tre azioni che compaiono va esplicitata nelle sue tre componenti. Infatti il calcolo prevede l'azione del sistema complessivo, e questo è formato da due sottosistemi interagenti tra loro. Quindi l'azione consta di tre fattori, uno per S, uno per R, uno per l'interazione SR:

$$S = S_S + S_R + S_{SR}, (2.10)$$

Da cui si giunge alla formula più generale possibile:

$$\rho_r^S(x_f, x'_f, t) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \int dx_i dx'_i d\overline{x} d\overline{x}' \lambda_0(x, \overline{x}, x', \overline{x}') \int \mathcal{D}\overline{x} \mathcal{D}x \mathcal{D}x' \\
\times exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left( \mathcal{S}_S[x] - \mathcal{S}_S[x'] \right) - \frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_S^{EQ}[\overline{x}] \right\} \tilde{F}[x, x', \overline{x}],$$
(2.11)

dove siamo riusciti a separare tutte le coordinate del sistema da quelle dell'enviroment. Tutti gli effetti del bagno termico, e dunque tutte le informazioni che vogliamo sapere sulla forza di smorzamento, sono in  $\tilde{F}[x, x', \overline{x}]$ . Questo è chiamato Funzionale d'Influenza, che integra su tutte le variabili del reservoir:

$$\tilde{F}[x, x', \overline{x}] = \frac{1}{\mathcal{Z}_R} \int d\mathbf{q}'_i d\mathbf{q}_i d\mathbf{q}_f \int \mathcal{D}\overline{\mathbf{q}} \mathcal{D}\mathbf{q}' \mathcal{D}\mathbf{q} \times exp \left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} (\mathcal{S}_R[\mathbf{q}] + \mathcal{S}_{SR}[x, \mathbf{q}] - \mathcal{S}_R[\mathbf{q}] - \mathcal{S}_{SR}[x', \mathbf{q}']) - \frac{1}{\hbar} (\mathcal{S}_{SR}^{EQ}[\overline{x}, \overline{\mathbf{q}}] + \mathcal{S}_R^{EQ}[\overline{\mathbf{q}}]) \right\},$$
(2.12)

ove abbiamo introdotto una nuova costante  $Z_R$ , funzione di partizione del Reservoir, tale che  $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{\beta}/\mathcal{Z}_R$ , con  $\mathcal{Z}_{\beta}$  funzione di partizione del sistema, e  $\mathcal{Z}$  quella del sistema complessivo. Così facendo il Funzionale d'Influenza è unitario per interazione nulla.

#### 2.1.2 Condizioni al contorno separabili

Le condizioni (2.5) sono in realtà molto complicate da usare e non aggiungono molto al discorso che vogliamo fare, motivo per cui da questo momento in poi useremo le cosiddette condizioni al contorno separabili, che sono le seguenti:

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}^S(0)\hat{\rho}^R(0).$$
(2.13)

La fattorizzabilità discende dal considerare i due sistemi totalmente indipendenti prima del tempo t = 0 in cui si fa iniziare l'azione dissipativa, come se i due sottosistemi entrassero in interazione solo in quel momento. Dotandosi di un opportuno apparato sperimentale è possibile in molte tipologie di esperimenti riuscire ad ottenere questa situazione con buona approssimazione, difatti è la condizione iniziale standard usata da Feynman e Vernon nella loro teorizzazione del Funzionale d'Influenza applicato ai sistemi dissipativi. Tale condizione iniziale implica che gli operatori statistici dei due sottosistemi siano calcolabili con le usuali formule di un ensamble (microcanonico perchè fino all'inizio dell'interazione sia R che S sono isolati).

La relazione della densità di matrice ridotta del sistema si semplifica notevolmente. Sostituendo la (2.13) e la (2.4) nella (2.2) e riarrangiando i termini si arriva a:

$$\rho_r^S(x_f, x'_f, t) = \int dx_i dx'_i J(x_f, x'_f, t; x_i, x'_i, 0) \rho^S(x_i, x'_i, 0), \qquad (2.14)$$

dove la funzione di propagazione è:

$$J(x_f, x'_f, t; x_i, x'_i, 0) = \int \mathcal{D}x_f \mathcal{D}x'_f exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathcal{S}_S[x] - \mathcal{S}_S[x'])\right\} \mathcal{F}[x, x'], \qquad (2.15)$$

quindi il Funzionale d'Influenza ha questa forma più semplice:

$$\mathcal{F}[x,x'] = \int d\mathbf{q}'_i d\mathbf{q}_i d\mathbf{q}_f \rho^E(\mathbf{q},\mathbf{q}_i,0) \int_{\mathbf{q}'_i}^{\mathbf{q}_f} \int_{\mathbf{q}_i}^{\mathbf{q}_f} \mathcal{D}\mathbf{q}' \mathcal{D}\mathbf{q} \\ \times exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathcal{S}_R[\mathbf{q}] + \mathcal{S}_{SR}[x,\mathbf{q}] - \mathcal{S}_R[\mathbf{q}'] - \mathcal{S}_{SR}[x',\mathbf{q}'])\right\}.$$
(2.16)

Spesso se punti iniziali e finali di un percorso non sono noti, allora si usa una media tra i possibili funzionali a seconda dei percorsi, pesata con le probabilità singole dei percorsi dette  $w_i$ 

$$\langle F \rangle = \sum_{i} w_i F_i. \tag{2.17}$$

### 2.2 Esplicitazione del Funzionale d'Influenza

Per molti sistemi quantistici complessi non dobbiamo necessariamente avere una definita comprensione microscopica della natura della forza di smorzamento, ma è sufficiente avere a disposizione un quadro fenomenologico del complesso sistema+reservoir. Tale metodo fu pensato per la prima volta da Ullersma. [8] Caldeira e Legget invece applicarono il metodo sistema + reservoir a una particella che tunnelasse tra due posizioni diverse anche lontane, come spiegheremo nel prossimo capitolo. Come abbiamo anticipato, il modo in cui modellizziamo il reservoir è un sistema di infiniti oscillatori. In realtà, svilupperemo una teoria che va bene per un sistema di N oscillatori, con N non necessariamente infinito, ma si può vedere che solo per N infinito abbiamo effetti di irreversibilità. Gli oscillatori, ciascuno con la propria frequenza  $\omega_n$ , devono essere però non anarmonici e l'accoppiamento dev'essere al più quadratico, perché altrimenti l'integrale non è gaussiano e non si sa calcolare [5]. Non li considereremo, ma citiamo esistere ampliamenti di questa teoria a particelle moventi in potenziali anarmonici, come scoperto da Zwanwig.

Esplicitiamo ora l'Hamiltoniana del sistema complessivo:

$$H = H_S + H_R + H_{SR} (2.18)$$

dove:

$$H_R = \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2} \frac{p_n^2}{m_n} + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 q_n^2.$$
 (2.19)

è l'Hamiltoniana del reservoir, di N oscillatori non accoppiati, che come anticipato è quella che mette più d'accordo tra semplicità d'uso e descrizione fenomenologica della forza di smorzamento. Spesso tali oscillazioni possono essere viste come i modi normali di un campo elettrico all'interno di uno spazio, oppure le vibrazioni fononiche di un reticolo cristallino [2].

$$H_{SR} = \sum_{n=1}^{N} F_n(x)q_n + V(x) + \sum_{n=1}^{N} \frac{F_n^2(x)}{2m_n\omega_n^2}$$
(2.20)

è l'Hamiltoniana che determina l'interazione. L'ultimo termine deve essere introdotto, matematicamente, per avere effetti di dissipazione. Scegliamo allora una interazione di tipo separabile:  $F_n(x) = c_n F(x)$ , e scegliamo F(x) lineare. Casi in cui tale funzione non è lineare sono le giunzioni Josephson e i sistemi di polaroni[8]. Sostituendo, si ha:

$$H_{SR} = -x \sum_{n=1}^{N} c_n q + x^2 \sum_{n=1}^{N} \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^2}.$$
 (2.21)

Appare evidente che  $c_n$  sia la costante dell'accoppiamento tra n - mo oscillatore e sistema. In molti casi la forza di smorzamento che l'ambiente induce può essere vista come piccola, quindi l'accoppiamento tra i sottosistemi può essere considerato debole. In quel caso nei conti può essere trascurato il termine quadratico nelle x nella (2.21). Ovviamente, avere un accoppiamento debole non significa avere deboli effetti dissipativi. Noi useremo l'accoppiamento quadratico, perché in alcuni casi risulta molto più preciso e realistico. Un esempio di tali effetti dissipativi è quello che si incontra nei componenti lineari di un circuito elettrico, come i resistori. Generalmente parlando la (2.21) può essere vista come la linearizzazione di un termine di interazione non lineare in regime di accoppiamento debole [5].

L'Hamiltoniana del sistema può avere una qualsiasi espressione del tipo parte cinetica più potenziale generico:

$$H_S = \frac{P^2}{2M} + V(x)$$
 (2.22)

La particolarità del nostro metodo è che, a differenza di come avviene usualmente in termodinamica, qui il sistema in analisi lo si considera composto di pochi gradi di libertà. In questo caso sarà addirittura uno solo. I dettagli di tale conto sono riportati in Appendice B. Di seguito riportiamo solo il risultato finale[1], [8]:

$$\mathcal{F}_{FV}[x(t), x'(t)] = exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{S}_{FV}[x(t), x'(t)]\right\}$$
(2.23)

dove:

$$S_{FV}[x(t), x'(t)] = \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t'} dt'' \left\{ x(t') - x'(t') \right\} \left\{ L(t' - t'')x(t'') - L^{*}(t' - t'')x'(t'') \right\} + i \int_{0}^{t} dt' \left\{ x^{2}(t') - x'^{2}(t') \right\} \frac{\mu}{2}$$
(2.24)

con

$$L(t) = \sum_{n=1}^{N} \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n} \frac{\cosh\left[\omega\left(\frac{\hbar\beta}{2} - \mathrm{i}t\right)\right]}{\sinh\left[\frac{1}{2}\omega_n \hbar\beta\right]}$$
(2.25)

Notiamo subito che l'effetto più importante della propagazione è manifestato da L(t' - t''), detta *funzione di correlazione del bagno*. Essa dipende da due variabili t' e t'', che di fatto sono entrambe variabili temporali. Non solo, nella formula vi è anche la differenza tra due percorsi: x e x', che, come si può vedere dalla (2.2), sono interpretabili come un percorso avanti e l'altro indietro nel tempo.

Tali risultati sono interpretabili vedendo come effetto della doppia integrazione nel tempo un'interazione del cammino con sé stesso. Questo si produce perché la particella è a contatto con tutti gli oscillatori del bagno, ognuno con una propria frequenza e quindi con un proprio tempo caratteristico. La particella interagendo con ciascuno di essi viene rallentata in maniera diversa a seconda della frequenza. L'effetto complessivo è che la particella lungo il percorso vede sé stessa sfasata e rallentata nel tempo, e interferisce quindi con sé stessa ritardata[5]. Si vede quindi come L e  $L^*$  siano oggetti altamente non locali.



Figura 2.1: Rappresentazione grafica dei termini che compongono  $S_{FV}[x(t), x'(t)])[8]$ . Le linee continue rappresentano i percorsi x(t) (linea di sopra) e x'(t)(linea di sotto). Le linee tratteggiate rappresentano l'azione, invece, di L(t' - t'') (primo e terzo grafico da sinistra) e  $L^*(t' - t'')$ (secondo e quarto). I primi due grafici rappresentano i contributi di autointerazione dei percorsi, mentre gli ultimi due rappresentano i contributi di interferenza di un percorso con l'altro.

Questi sono effetti che nascono dall'interazione del sistema col bagno, come si può vedere dalla presenza dei coefficienti di accoppiamento  $c_n$ . Caratteristica molto importante è che, com'è ovvio che sia, per accoppiamento nullo, cioè  $c_n = 0$ , il Funzionale d'Influenza è unitario.

L'ultimo termine:

$$\mu = \sum_{n=1}^{N} \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n}.$$
(2.26)

è una costantedi rinormalizzazione. Nel limite di distribuzione continua di frequenze, il propagatore diventa:

$$L(t) = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} d\omega J(\omega) \frac{\cosh\left[\omega\left(\frac{\hbar\beta}{2} - it\right)\right]}{\sinh\left[\frac{1}{2}\omega_{n}\hbar\beta\right]}$$
(2.27)

dove abbiamo introdotto la *densità spettrale* dell'accoppiamento ambientale:

$$J(\omega) = \frac{2}{\pi} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \delta(\omega - \omega_{\alpha})$$
(2.28)

Tale oggetto è fondamentale, perchè in esso compaiono sia le frequenze  $\omega$  sia i coefficienti di accoppaimento  $c_n$ , e quindi ci dice in che modo dobbiamo pesare ciascun modo.E' l'elemento fondamntale dell'acoppiamento.

Finora abbiamo trattato il Funzionale d'Influenza per tempi reali, che ci dà la funzione di propagazione J. Quindi per ora ci siamo focalizzati sull'analisi della propagazione dell'operatore statistico nel tempo. Ma molto utile è anche lo stesso calcolo effettuato per l'azione euclidea, cioè su tempi immaginari. Questo ci restituisce l'espressione dell'operatore statistico all'equilibrio termico, cioè quando le grandezze del macrostato non dipendono più dal tempo. I dettagli di tale conto sono riportati in appendice C. Il risultato finale è:

$$\mathcal{F}^{(E)}[\sigma(\tau)] = exp\left\{\frac{1}{2}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \mathcal{K}(\tau-\tau') \left(x(\tau)-x(\tau')\right)^2\right\}.$$
 (2.29)

Da qui si può vedere che la (2.25) è la continuazione analitica del propagatore K su tempo immaginario per l'azione euclidea:  $L(t) = K(\tau = it)$ .

# **Capitolo 3**

### **Modello Spin-Bosone**

In quest'ultimo capitolo parleremo di come l'approccio del Funzionale d'Influenza sviluppato nel capitolo precedente permetta l'analisi di sistemi che altrimenti non sarebbero approcciabili in altri modi.

Nella prima parte spiegheremo cos'è un sistema a due stati. Questo sarà caratterizzato da un continuo tunneling tra gli stati fondamentali di due buche diverse. Solitamente il tuneling di un sistema del genere è fortemente influenzato dall'accoppiamento ad un eventuale bagno termico.

Il primo sistema a due livelli fu teorizzato nel 1972 da Philip Warren Anderson e Philip Philips per spiegare anomalie nell'andamento del calore specifico dei vetri. Per decadi, di questi modelli furono studiati soprattutto i polaroni, cioè la coppia composta da fononi e particella che ne risente, mentre oggi ampio studio è concentrato sulle giunzioni Josephson superconduttive. Ulteriori esempi di impiego di siffatto modello sono le oscillazioni dei mesoni K e alcune stranezze nelle risonanze della molecola  $NH_3$ .

Scriveremo poi l'Hamiltoniana caratteristica per il cosiddetto modello spin-bosone, prima di dare alcune informazioni sul caso di approssimazione adiabatica.

Nel terzo e nel quarto capitolo invece ci concentreremo su un'espressione per il moto della particella. Questo prevederà solo due punti possibili, poichè le buche presenti sono solo due. Sarà quindi un cammino assolutamente discreto. Tale espressione del percorso ci permetterà di scrivere i Funzionali d'Influenza su tempo immaginario e reale, ricavando così la termodinamica all'equilibrio termico e la dinamica del sistema.

#### 3.1 Sistemi dissipativi a due stati

Molti sistemi, sia in fisica che in chimica, possono essere descritti da generiche coordinate (noi ci soffermeremo sullo spin di una particella) in presenza di un potenziale con due minimi distinti e più o meno lontani nello spazio, di fatto separati da una barriera. Se la barriera fosse molto larga, le due buche sarebbero indipendenti l'una dall'altra. Ma la buca da noi considerata non si estenderà troppo nello spazio, permettendo il tunneling della particella. In letteratura questi si chiamano "double-well systems" (per tutto il capitolo [8],[1]).

Per energie termiche minori della differenza tra il fondamentale e il primo eccitato di singola buca, è possibile considerare la dinamica solo tra gli stati fondamentali di ciascuna buca. Se la barriera è molto più alta rispetto ai due livelli energetici fondamentali, allora il tunneling avviene solo tra due stati posizionati spazialmente a destra e sinistra di essa. La dinamica che ne risulta si svolge, quindi, essenzialmente in uno spazio di Hilbert 2-D. Quindi una buona base per scrivere l'Hamiltoniana in questi casi sono gli operatori di Spin nella rappresentazione delle matrici di Pauli.

Nella nomenclatura standard dell'informatica quantistica, un sistema a due stati in uno spazio di Hilbert 2-D è detto Qubit. Questo non di rado lo si approssima (almeno in prima istanza ) ad una particella di spin  $\frac{1}{2}$ . Poiché gli effetti di decoerenza e dissipazione dello spin sono causati dall'accoppiamento all'enviroment, che è modellizzato come un bagno di infiniti oscillatori, che sono dei bosoni, allora il modello viene chiamato Modello Spin-Bosone.



Figura 3.1: Doppia buca simmetrica (sinistra) e antisimmetrica (destra), con barriera ad altezza  $V_b$  (destra)[1]

Esistono due possibili configurazioni del potenziale: una buca simmetrica o una buca asimmetrica. Denomineremo  $\hbar\Delta_0$  come energia di detuning, cioè di splitting tra i livelli energetici di bonding e anti-bonding nel caso simmetrico, e come energia  $\hbar\zeta$  la differenza di energia tra i fondamentali delle due buche nel caso asimmetrico. Siano i minimi posizionati nei punti  $x = \pm \frac{1}{2}x_0$ , autovalori dell'operatore di posizione  $\hat{x} = \frac{\hbar}{2}x_0\hat{\sigma}_z$ . Un potenziale quadratico standard da utilizzare può essere della forma  $V(x) = \frac{M\omega_0}{2x_0^2}(x^2 - \frac{x_0^2}{4})$ . Detto  $V_b$  il valor del potenziale della barriera al suo picco, per metterci nelle approssimazioni prima fatte, useremo:

$$V_b \gg \hbar \omega_0 \gg \hbar \Delta_0, \hbar |\zeta|, K_B T; \tag{3.1}$$

dove  $\hbar\omega_0$  è la differenza tra il livello energetico fondamentale e quello eccitato di ciascuna di buca, ricavabile da  $V_b = M\omega_0^2 x_0^2/32$ . Come abbiamo capito, i due stati  $|R\rangle$  e  $|L\rangle$  sarebbero i due autostati dell'Hamiltoniana se questa comprendesse solo  $\hat{\sigma}_z$ , ma vi è anche un ulteriore termine, non diagonale, che mischia i due stati prima scritti, creandone combinazioni lineari che significano un avvenuto tunneling. L'Hamiltoniana del sistema a due livelli, detta TSS , è quindi:

$$\hat{H}_{TSS} = -\frac{\hbar}{2}\Delta_0\hat{\sigma}_x - \frac{\hbar}{2}\zeta\hat{\sigma}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -\zeta & -\Delta_0\\ -\Delta_0 & \zeta \end{pmatrix}.$$
(3.2)

I due veri autostati di tale Hamiltoniana sono  $|g\rangle$ , rappresentate lo stato bonding, e  $|e\rangle$ , rappresentate l'antibonding, danno un'energia di splitting di tunnel:

$$E_e - E_g = \hbar \Delta_b = \hbar \sqrt{\Delta_0^2 + \zeta^2}.$$
(3.3)

Noi useremo per lo più gli stati loro combinazione lineare:

$$|R\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|g\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|e\rangle$$

$$|L\rangle = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|g\rangle - \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|e\rangle$$
(3.4)

con:

$$\sin(\theta) = \frac{\Delta_0}{\Delta_b}, \quad \cos(\theta) = \frac{\zeta}{\Delta_b}, \quad \tan(\theta) = \frac{\Delta_0}{\zeta}.$$
 (3.5)

Questo come si interpreta: se le buche fossero lontane, la funzione d'onda sarebbe ben localizzata su ciascuna di esse. Quindi il fondamentale sarebbe rappresentato in ambo i casi da un solo stato. Ma quando le due buche si avvicinano, ciascuna delle due funzioni d'onda riferite agli autostati dell'hamiltoniana è localizzata nel dominio di entrambe le buche. Tali funzioni d'onda sono una simmetrica e una antisimmetrica rispetto al centro della barriera. Quindi ogni singola buca vede due stati. Da qui uno stato localizzato solo su una buca terrà conto sia della funzione d'onda simmetrica, sia della funzione d'onda antisimmetrica. Ciò fa sì che ogni livello (fondamentale e non solo) subisca uno splitting in stati bonding e antibonding.

L'effetto del bagno quindi è un *hopping*, cioè uno scambio, tra spin  $|\downarrow\rangle$  e spin  $|\uparrow\rangle$ . Questo già avviene normalmente con il tunneling, ma senza il bagno il moto sarebbe coerente. Il bagno invece fa sì che le oscillazioni tra  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  diventino incoerenti. Tale incoerenza continua a cambiare e dare effetti fino alla condizione asintotica dell'equilibrio termodinamico.

Poichè  $\Delta_0$  è piccolo, il tunneling datoci da  $\hat{\sigma}_x$  è coerente, mentre  $\hat{\sigma}_z$  aggancia il sistema al bagno di oscillatori, che vorrebbe far diventare classico il sistema (la matrice classica ha solo i termini diagonali). Completiamo ora l'Hamiltoniana con il pezzo di interazione  $H_{SR}$ :

$$\hat{H}_{SR} = -\hat{\sigma}_z \mathcal{P}(t); \qquad \mathcal{P}(t) = \frac{x_0}{2} \sum_{n=1}^N c_n q_n(t).$$
(3.6)

Questo genere di accoppiamento può essere spiegato talvolta con un campo locale di dipolo, con energia di polarizzazione  $\mathcal{P}(t)$ . I singoli modi del bagno sono q(t), che generano una forza dissipativa  $\xi(t) = \sum_{n=1}^{N} c_n q_n(t)$ . Se i processi stocastici del bagno seguono una statistica gaussiana, allora il reservoir è davvero modellizzabile come un insieme di oscillatori bosonici, con Hamiltoniano il solito  $H_R$ :

$$\hat{H}_R = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \frac{\hat{p_n}^2}{m_n} + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 q_n^2.$$
(3.7)

L'Hamiltoniana complessiva del sistema + Reservoir + accoppiamento, detta Hamiltoniana Spin-Bosone, è:

$$H_{SB} = -\frac{\hbar}{2}\Delta_0\sigma_x - \frac{\hbar}{2}\zeta\sigma_z - \sigma_z\mathcal{P}(t) + H_R$$
  
$$= -\frac{\hbar}{2}\Delta_0\sigma_x - \frac{\hbar}{2}\zeta\sigma_z + \frac{1}{2}\sum_n \left(\frac{p^2}{m_n} + \frac{1}{2}m_n\omega_n^2q^2 - x_0\sigma_zc_nq_n\right).$$
(3.8)

Negli autostati della  $H_{TSS}$ , essa si può riscrivere:

$$H_{SB} = -\frac{\hbar}{2}\Delta_b\sigma_z + \left(\cos(\theta)\sigma_z - \sin(\theta)\sigma_x\right)\mathcal{P}(t) + H_R.$$
(3.9)

In questa forma si evince come l'accoppiamento dello spin al bagno si possa scomporre in parte longitudinale( $\propto \cos(\theta)$ ) e parte trasversale ( $\propto \sin(\theta)$ ), ma come solo la parte trasversale possa indurre un cambiamento di spin.

Ancora un'altra forma per questa Hamiltoniana è ricavabile usando gli operatori di creazione e distruzione e la lunghezza d'onda termica definita a partire da:  $c_n = \lambda_n \sqrt{2\hbar m_n \omega_n}/x_0$ , che di fatto rappresenterà ora l'accoppiamento tra bagno e sistema:

$$H_{SB} = H_{TSS} - \frac{1}{2}\sigma_z \sum_{n=1}^{N} \hbar \lambda_n (a_n + a_n^{\dagger}) + \sum_{n=1}^{N} \hbar \omega_n a_n^{\dagger} a_n.$$
(3.10)

A questo punto gli effetti dell'ambiente hanno come quantità di controllo la densità spettrale dell'accoppimento Spin-Bosone:

$$G(\omega) = \sum_{n=1}^{N} \lambda_n^2 \delta(\omega - \omega_n) = \frac{x_0^2}{2\hbar} \sum_{n=1}^{N} \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \delta(\omega - \omega_n), \qquad (3.11)$$

che è formata, come si vede, da tanti punti separati identificati dalla  $\delta$ , ma che è legata alla già vista densità spettrale del caso continuo da:

$$G(\omega) = \frac{x_0^2}{\pi\hbar} J(\omega).$$
(3.12)

#### 3.1.1 Limite Adiabatico

Riprendiamo ora, un po' più nel dettaglio, l'analisi del termine di splitting di tunneling  $\Delta_0$ . Mettiamoci nel limite adiabatico in cui, per definizione, gli oscillatori del bagno si adattano immediatamente alla posizione dello spin. Esplicitando gli autovalori di  $\sigma_z = \pm 1$ , possiamo quindi riscrivere tutta la parte dell'Hamiltoniana relativa agli oscillatori in questo modo:

$$H_{\pm} = \frac{1}{2} \sum_{n} \left( \frac{p^2}{m_n} + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 q^2 \mp x_0 c_n q_n \right) = \sum_{n} \left( \hbar \omega_n a_n^{\dagger} a_n \mp \frac{1}{2} \hbar \lambda_n (a_n + a_n^{\dagger}) \right).$$
(3.13)

Se introduciamo gli operatori di creazione e distruzione spostati:

$$b_{\pm,\alpha} = a_{\alpha} \mp \frac{1}{2} \frac{\lambda_{\alpha}}{\omega_{\alpha}},\tag{3.14}$$

#### 3.2. TERMODINAMICA

possiamo riscrivere:

$$H_{\pm} = \sum_{\alpha} H_{\pm,\alpha} = \sum_{\alpha} \hbar \left( \omega_{\alpha} b_{\pm,\alpha}^{\dagger} b_{\pm,\alpha} - \frac{\lambda_{\alpha}^{2}}{4\omega_{\alpha}} \right).$$
(3.15)

I nuovi operatori obbediscono alle stesse regole di commutazione dei classici operatori. Da qui, scrivendo gli stati bosonici usando gli stati coerenti, posso infine ricavarmi la probabilità che uno spin, non eccitandosi/diseccitandosi, transiti da  $|\uparrow\rangle$  a  $|\downarrow\rangle$ , che è proprio:  $\langle -|+\rangle = \Delta_0$ . Il termine di splitting di tunneling va quindi rinormalizzato a causa della posizione, che cambia, della nuvola bosonica:

$$\Delta = \Delta_0 \prod_{\alpha} \langle 0_{-,\alpha} | 0_{+,\alpha} \rangle = \Delta_0 exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha} \frac{\lambda_{\alpha}^2}{\omega_{\alpha}^2}\right) \to \Delta_0 exp\left(-\frac{1}{2}\int d\omega \frac{G(\omega)}{\omega^2}\right).$$
(3.16)

Il termine esponenziale di rinormalizzazione, è noto come fattore Franck-Condon, qui mostrato nel caso discreto e nel limite continuo. Quando l'integrale diverge si ha la cosiddetta Catastrofe dell'Ortogonalità, cioè le due buche sono indipendenti e non vi è tunneling ammesso.

Come interpretare quindi il limite adiabatico: in queste condizioni il moto non è risolvibile. Ciò che accade è che il bagno non induce una dissipazione, ma ha come effetto solo una rinormalizzazione delle quantità dinamiche. La dinamica in sè, però, procede come se non vi fosse contatto con il reservoir.

#### 3.2 Termodinamica

In un problema a doppia buca, il cammino della particella è detto cammino istantaneo, o kink, che ha per definizione  $\lim_{\tau \to \pm \infty} x(\tau) = \pm \frac{1}{2}x_0$ . Nelle condizioni in cui ci siamo messi, di tight-binding, la transizione tra le due buche avviene su un cammino senza punti intermedi, ma solo quelli di partenza e arrivo. Il flip è istantaneo e avviene al tempo  $s_j$ . Il cammino lo si può quindi scrivere  $x(\tau) = \frac{1}{2}x_0\sigma(\tau)$ , dove  $\sigma(\tau)$  è il cammino dello spin che salta avanti e indietro tra i valori  $\pm 1$ . Un'utile rappresentazione di tale funzione è la seguente, che indica un percorso di 2m kink consecutivi:

$$\sigma^{m}(\tau) = 1 + 2\sum_{j=1}^{2m} (-1)^{j} \Theta(\tau - s_{j}).$$
(3.17)

A questo punto non ci resta che prendere l'espressione del Funzionale d'Influenza, calcolato però nel caso di tempo immaginario (vedi capitolo 2 e appendice C), cioè l'IF Euclideo, e sostituirvi  $x(\tau)$ :

$$\mathcal{F}^{(E)}[\sigma(\tau)] = exp\left\{-\frac{1}{2}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \mathcal{K}(\tau-\tau') \left(\sigma(\tau) - \sigma(\tau')\right)^2 \middle/ 4\right\}.$$
 (3.18)

Quindi l'IF facente riferimento a un percorso di m coppie kink-anti kink (e quindi le interazioni tra i 2m percorsi) è:

$$\mathcal{F}_{m}^{(E)}[\{s_{j}\}] = exp\left\{\sum_{j=2}^{2m}\sum_{i=1}^{j-1}(-1)^{i+j}W(s_{j}-s_{i})\right\};$$
(3.19)



Figura 3.2: Tipico cammino multi kink con  $s_i$  come centri dei kink[8]

dove

$$W(\tau) = \int_0^\infty d\omega \frac{G(\omega)}{\omega^2} \left( D_\omega(0) - D_\omega(\tau) \right)$$
(3.20)

è la funzione che descrive l'interazione tra due percorsi (anche visibile come interazione tra due cariche). Tramite le relazioni riportate in Appendice C giungiamo a poter scrivere:

$$\mathcal{K}(\tau) = \frac{x_0^2}{\hbar} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) D(\omega); \qquad (3.21)$$

Ciò significa che  $\mathcal{K}(\tau)$  ci dà informazioni su tutte le frequenze: integro ogni modo  $G(\omega)$  con la sua densità spettrale  $J(\omega)$  del caso continuo.

#### 3.2.1 Funzione di Partizione

Abbiamo detto che il sistema a due stati in caso di doppia buca con tight-binding prevede un cammino formato da *kink*, percorsi istantanei ognuno dei quali passa tra  $|L\rangle$  e  $|R\rangle$  al tempo  $\tau = s_j$ . Come già detto nelle sezioni precedenti, essi sono *hopping* incoerenti tra  $|\downarrow\rangle$  e  $|\uparrow\rangle$ . Chiamiamo *bounce* una coppia *kink*-anti *kink*, cioè un unico ciclo completo avanti-indietro. Un intervallo tra due *bounces* consecutivi è  $\rho_j = s_{2j+1} - s_{2j}$ , che corrisponde al tempo trascorso dalla particella nella buca di partenza(arrivo); mentre la durata di ciascun *bounce* è  $\tau_j = s_{2j} - s_{2j-1}$ , che corrisponde al tempo trascorso dallo spin nell'altra buca. Per un percorso di 2m *kink*, avremo come indice dei *bounces*  $j = 1, \ldots, m$ , con  $s_0 = 0$  e  $s_{2m+1} = \hbar\beta$ .

Nella rappresentazione delle cariche, che vede ogni *kink* come un particella diversa e quindi le interazioni tra percorsi della stessa particella come interazioni tra diverse cariche, i *bounces* sono dei dipoli, e  $\rho_j$  sono le lunghezze inter-dipolo, mentre le  $\tau_j$  sono le lunghezze intra-dipolo. Ogni *bounce* contribuisce alla funzione di partizione con un termine  $\frac{\Delta^2}{4}$ . Possiamo quindi scrivere la funzione di partizione come serie nelle potenze di  $\Delta^2$ . La funzione di partizione, poiché dipende dalla probabilità di trovare il sistema in uno stato specifico, è diversa a seconda che si consideri di trovare la particella in  $|L\rangle$ o  $|R\rangle$ :

$$\mathcal{Z}_{R/L} = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2m} \int_{0}^{\hbar\beta} ds_{2m} \int_{0}^{s_{2m}} ds_{2m-1} \dots \int_{0}^{s_{2}} ds_{1} B_{R/L,m}^{(E)} \big(\{s_{j}\}\big) \mathcal{F}_{m}^{(E)} \big(\{s_{j}\}\big),$$
(3.22)

dove le  $s_j$  sono le coordinate collettive del problema (rappresentano gli istanti di tunneling, ma anche la posizione delle cariche). La funzione:

$$B_{R/L,m}^{(E)} = exp\left\{\pm\frac{1}{2}\hbar\beta\zeta \mp \zeta\sum_{j=1}^{2m}(-1)^j s_j\right\} = exp\left\{\pm\frac{1}{2}\hbar\beta\zeta \mp \zeta\sum_{j=1}^{2m}\tau_j\right\},\qquad(3.23)$$

che può essere scritta in funzione sia delle  $s_j$  che delle  $\tau_j$ , racchiude in essa tutti gli effetti della polarizzazione, mentre  $\mathcal{F}_m^{(E)}$ , definita nella (3.19) racchiude gli effetti dovuti all'interazione del percorso con sè stesso. La (3.22), sostituitevi la (3.23) e la (3.19), è detta Rappresentazione del gas di Coulomb della Funzione di Partizione.

E' a queto punto utile riscrivere la (3.22) come integrale di Laplace. Tramite questo calcolo molto semplice, la Funzione di Partizione del sistema a due stati si arriva a scrivere dunque

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_L(\zeta) + \mathcal{Z}_R(\zeta) = \mathcal{Z}_R(-\zeta) + \mathcal{Z}_R(\zeta) = \mathcal{Z}_L(\zeta) + \mathcal{Z}_L(-\zeta).$$
(3.24)

A questo punto è facile calcolare la probabilità di occupazione della buca di destra/sinistra all'equilibrio termico:

$$P_{R/L}^{(eq)} = \mathcal{Z}_{R/L} / \mathcal{Z}; \qquad (3.25)$$

e sempre all'equilibrio termico è calcolabile il valore d'aspettazione di  $\sigma_z$ 

$$\langle \sigma_z \rangle^{eq} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \operatorname{Tr} \left\{ \sigma_z e^{-\beta H} \right\} = P_R^{(eq)} - P_L^{(eq)} = \frac{\mathcal{Z}_R - \mathcal{Z}_L}{\mathcal{Z}}, \qquad (3.26)$$

anche esprimibile attraverso l'energia libera di Helmtotz:

$$\langle \sigma_z \rangle^{eq} = \frac{2}{\hbar\beta} \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \zeta} = \frac{2}{\hbar\beta} \frac{\partial \ln(\mathcal{Z})}{\partial \zeta} = -\frac{2}{\hbar} \frac{\partial F}{\partial \zeta},$$
 (3.27)

e infine il calore specifico ha espressione:

$$c = \frac{c_V}{k_B} = \beta^2 \frac{\partial^2 \ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta^2}.$$
(3.28)

### 3.3 Dinamica

Nella precedente sezione abbiamo visto come ricavare le grandezze di interesse all'equilibrio termodinamico raggiunto. Ultima nostro obbiettivo è ricavare come variano i valori d'aspettazione degli operatori di spin nel tempo. Useremo l'approccio del Funzionale d'Influenza stavolta su tempo reale. Consideriamo la seguente espressione dell'operatore statistico del sistema complessivo prima dell'avvenuto accoppiamento, con la particella preparata qui nello stato iniziale  $|R\rangle$ :

$$\rho(t=0) = |R\rangle\langle R| \otimes exp\left\{-\beta \left[H_R - \mathcal{CP}(t)\right]\right\} / \mathcal{Z}_R.$$
(3.29)

Tale operatore statistico è ovviamente fattorizzato in un proiettore, per quanto concerne il sistema TSS, e la comune matrice densità dell'equilibrio canonico per il reservoir. Qui C è un parametro importante che identifica lo shift del bagno al tempo iniziale: difatti, una volta che l'accoppiamento si attiva, gli oscillatori, come visto nelle sezioni precedenti, tendono a spostarsi sulla posizione che la particella occupa, quindi uno dei minimi delle due buche. Analiticamente,  $W(\tau)$  definito nella (3.20), è la continuazione analitica per tempi immaginari di C. Le condizioni iniziali più usuali che vengono usate sono: quando C = 0 il sistema dello spin evolve fuori dallo stato di partenza prima che il bagno possa adeguarsi alla posizione della particella; mentre quando C = 1 allora lo spin è di fatto intrappolato nello stato iniziale fino al tempo iniziale, per cui, a contatto avvenuto, gli oscillatori riescono ad adeguarsi alla posizione dello spin nella buca prima che questa cominci il tunneling. Noi non daremo spazio alla trattazione di come le condizioni iniziali abbiamo conseguenze sul moto dello spin, anche perché queste sono di fondamentale importanza solo nel limite adiabatico. Ci limiteremo a usare una forma di IF che racchiuda ambo le situazioni su descritte. Nostro obbiettivo è ricavare un'espressione analitica per i *Vettori di Bloch*, cioè i valori di aspettazione degli operatori di spin:

$$\langle \sigma_z \rangle_t = \rho_{1,1}(t) - \rho_{-1,-1}(t),$$

$$\langle \sigma_x \rangle_t = \rho_{1,-1}(t) + \rho_{-1,1}(t),$$

$$\langle \sigma_y \rangle_t = i\rho_{1,-1}(t) - i\rho_{-1,1}(t),$$
(3.30)

con i quali si può anche scrivere, poi, la matrice densità in funzione del tempo, che ci da tutte le informazioni sulla dinamica del sistema, poiché  $\hat{\rho}(t) = \frac{1}{2} \Big[ \mathbbm{1} + \sum_{j=x,y,z} \langle \hat{\sigma}_j \rangle \hat{\sigma}_j \Big]$ , con  $\langle \sigma_j \rangle = \text{Tr} \{ \rho \sigma_j \}$ . Gli elementi diagonali della matrice ridotta sono detti popolazioni, mentre gli elementi fuori diagonale sono detti coerenze.  $\langle \hat{\sigma}_z \rangle_t$  descrive la differenza tra le popolazioni degli stati localizzati sulle buche. Dà anche informazioni sulla dinamica del tunnel, rivelandosi quindi importante nello studio della Macroscopic Quantum Coherence. Addirittura  $\langle \hat{\sigma}_y \rangle_t \propto \frac{\partial \langle \hat{\sigma}_z \rangle_t}{\partial t}$ , cioè è proporzionale alla corrente di tunnel. In tutto abbiamo quindi quattro stati  $\chi$  corrispondenti ai quattro elementi della matrice ridotta:  $\chi = (\eta, 0) = \eta$  gli elementi diagonali, e  $\chi = (\xi, 0) = \xi$  gli elementi fuori diagonali. I quattro stati saranno :  $LL \equiv \eta = -1$ , corrispondente alla buca di sinistra;  $RR \equiv \eta = +1$ , corrispondente alla buca di destra;  $RL \equiv \xi = +1$ ;  $LR \equiv \xi = -1$ .

Come si evince dalla (2.14) l'evoluzione nel tempo dell'operatore statistico e, nel nostro caso, dei valori d'aspettazione degli operatori di spin, è scandita dalla funzione di propagazione J. Scelto  $\eta_o = 1$  come stato iniziale, si ha:

$$\langle \sigma_{z} \rangle_{t} = \sum_{\eta=\pm 1} \eta J(\eta, t; \eta_{0} = 1, 0),$$
  
$$\langle \sigma_{x} \rangle_{t} = \sum_{\xi=\pm 1} J(\xi, t; \eta_{0} = 1, 0),$$
  
$$\langle \sigma_{y} \rangle_{t} = i \sum_{\eta=\pm 1} \xi J(\xi, t; \eta_{0} = 1, 0).$$
  
(3.31)



Figura 3.3: Rappresentazione grafica dei quattro stati della matrice densità ridotta[8]. Gli elementi diagonali sono quelli della termodinamica, cioè all'equilibrio termico

E' molto utile quando si ragiona con un funzionale del tipo (2.23-2.24) fare un cambio di variabili e passare dai due percorsi  $\sigma'(t) \in \sigma(t')$ , ai percorsi simmetrico e antisimmetrico, rispettivamente  $\eta(t') \equiv \frac{1}{2}[\sigma(t') + \sigma'(t')] \in \xi(t') \equiv \frac{1}{2}[\sigma(t') - \sigma'(t')]$ . Il primo è generalmente chiamato cammino quasi-classico e misura la propagazione del sistema lungo gli elementi diagonali dell'operatore statistico. Il secondo invece, misura le fluttuazioni e gli effetti di decoerenza quantistica, tenendo conto delle escursioni sugli stati fuori diagonale. Nel nostro caso entrambi questi percorsi, come già detto nella sezione sulla termodinamica, sono composti da *kink*, che vanno da  $|R\rangle$  a  $|L\rangle$  e viceversa senza punti intermedi. Il funzionale d'influenza che ne segue parte da (2.23-2.24), aggiustato in modo che possa andar bene per C = 0 oppure 1, e viene poi integrato per parti. Si ha:

$$\mathcal{F}[\sigma,\sigma';t_0] = exp\left\{\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \left[\dot{\xi}(t')Q'(t'-t'')\dot{\xi}(t'') + i\dot{\xi}(t')Q'(t'-t'')\dot{\eta}(t'')\right]\right\},$$
(3.32)

dove Q = C a meno del solito cambio tra tempo immaginario e reale. Come si può vedere abbiamo una somma tra due percorsi, che può essere interpretato come un unico percorso lungo i lati del quadrato in figura, cioè che tocca tutti i quattro stati della matrice densità ridotta. Il Funzionale d'Influenza è quindi noto non appena sono noti  $\eta \in \xi$ . Chiameremo *sojourn* il periodo di tempo speso in uno stato diagonale, mentre chiameremo *blip* il periodo negli stati fuori diagonale. Supponendo che al tempo 0 si inizi da uno stato *sojourn*, le durate (o lunghezze) di *sojourn* e *blip* sono rispettivamente:

$$\tau_j = t_{2j} - t_{2j-1}, \quad s_j = t_{2j+1} - t_{2j}.$$
(3.33)

Durante la permanenza in un *sojourn*  $\xi(t) = 0$ , mentre durante la permanenza in un *blip*  $\eta(t) = 0$ . Sommando su tutti i possibili cammini, quindi sommando su tutti i possibili

*sojourn* e *blip* intermedi e integrando su tutti i *kink*, possiamo infine trovare l'esatta espressione per i *Vettori di Bloch*:

$$\langle \sigma_z \rangle_t = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \int_0^t \mathcal{D}_{2m,0}\{t_j\} \frac{1}{2m} \sum_{\xi_j = \pm 1} \left( F_m^{(+)} B_m^{(s)} - F_m^{(-)} B_m^{(a)} \right).$$
 (3.34)

Qui  $B_m^{s/a}$  sono le funzioni simmetrica e antisimmetrica (pari e dipari) di

$$B_m = exp\left(i\zeta \sum_{j=1}^m \xi_j \tau_j\right)$$
(3.35)

Come interpretare tale risultato: mentre il peso di stare nei *sojourn* è sempre 1, il peso dei *blip* è una fase. Da ciò, emerge che il sistema è favorito a stare nei *sojourn*, per questo vi è la differenza nei pesi. La (3.35) tiene conto del peso di un percorso con *m blip* toccati. Mentre invece

$$F_m^{(+)} = G_m \prod_{k=0}^{m-1} \cos(\phi_{k,m}), \quad F_m^{(-)} = G_m \sin(\phi_{0,m}) \prod_{k=0}^{m-1} \cos(\phi_{k,m}).$$
(3.36)

sono i termini che tengono conto dell'interazione con il reservoir. In particolare, vedendo ogni percorso come una carica (come anche precedentemente fatto) appare evidente che, poiché dopo un *blip* vi è sempre un *sojourn* e viceversa, i casi  $\eta = 1$  e  $\xi = 1$  siano interpretabili come un dipolo (+, -), mentre  $\eta = -1$  e  $\xi = -1$  come un dipolo (-, +). Le funzioni  $G_m$  descrivono le correlazioni inter e intra *blip*, con

$$\phi_{k,m} = \sum_{j=k+1}^{m} \xi_j X_{j,k}$$
(3.37)

che identificano le correlazioni tra il *k*-mo *sojourn* e i successivi m - k blip. E' interessante notare come se prendiamo la (3.34) nel limite di  $t \to \infty$ , di fatto stiamo analizzando il caso di smorzamento che non si arresta. Asintoticamente si raggiunge l'equilibrio termodinamico e ritroviamo la (3.26). Gli altri valori d'aspettazione sono :

$$\langle \sigma_x \rangle_t = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \int_0^t \mathcal{D}_{2m-1,0} \{t_j\} \frac{1}{2m} \sum_{\xi_j = \pm 1} \xi_m \left( F_m^{(+)} B_m^{(a)} - F_m^{(-)} B_m^{(s)} \right),$$

$$\langle \sigma_x \rangle_t = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \int_0^t \mathcal{D}_{2m-1,0} \{t_j\} \frac{1}{2m} \sum_{\xi_j = \pm 1} \xi_m \left( F_m^{(+)} B_m^{(s)} - F_m^{(-)} B_m^{(a)} \right).$$
(3.38)

# Conclusioni

Il lavoro svolto ha avuto come obbiettivo quello di studiare le moderne tecniche d'analisi degli effetti di decoerenza e dissipazione nei sistemi quantistici. Il formalismo sviluppato è stato quello dell'integrale sui cammini di Feynman, una rappresentazione della meccanica quantistica che pone l'accento sull'analisi dei percorsi che la particella può compiere dal punto iniziale al punto finale. Questo si rivela particolarmente utile nel momento in cui, come nei casi studiati, le informazioni in nostro possesso sono proprio riferenti al percorso del sistema. Abbiamo fatto i calcoli espliciti per ricavare l'operatore statistco, con il quale possiamo analizzare il sistema in ogni istante, pur non conoscendo a fondo il reservoir.

Abbiamo poi visto come questo modo di spiegare la propagazione possa essere utilizzato per ricavare J, La funzione di propagazione dell'operatore statistico ridotto del sistema, che al suo interno prevede ben due diversi propagatori K di singola particella. Inoltre esso dà alcune informazioni particolarmente rilevanti e non banali, poiché contiene una doppia integrazione nel tempo che rappresenta le interazioni del percorso con sé stesso. Queste sono indotte dal reservoir cui il sistema è accoppiato linearmente, come si può evincere dalla presenza, nel doppio integrale temporale, della costante di accoppiamento. Tutti gli effetti del bagno termico sono riassumibili nell'Integrale di Influenza, che prevede path integral sia per quanto riguarda i termini del solo ambiente, sia per termini di interazione ambiente-sistema.

Tale formalismo è stato applicato per studiare un sistema dissipativo dalla struttura molto semplice: una doppia buca, con un minimo di energia ciascuna. La particella, analizzata solo nel grado di libertà del suo spin, come spesso si usa per i qubit, può effettuare tunneling attraverso la buca, avanti e indietro, con ogni volta il bagno termico che cerca di bloccarla. Gli effetti combinati di tunneling e interazione portano alla dissipazione e alla decoerenza del sistema. I risultati più utili, considerando che si tratta di uno spin, sono i valori d'aspettazione nel tempo e all'equilibrio termico, degli operatori di spin. A partire da quest'ultimo dato si ricavano le grandezze in interesse, come l'energia rimasta alla particella.

Siamo giunti dunque a elaborare una solida teoria che riesca a predire il comportamento di sistemi dissipativi, nonostante che le equazioni, per sistemi generali, siano sempre molto complicate da risolvere analiticamente. Per fortuna il formalismo del Funzionale d'influenza è molto d'aiuto per studiare alcune di queste dinamiche, considerando che per risolvere gli integrali si può adottare anche un approccio di tipo numerico. Un altro punto di vista per studiare la dissipazione e la decoerenza è rappresentato, come anticipato all'inizio della tesi, dal formalismo della Master Equation.

Come visto nell'ultimo capitolo i modelli di sistemi aperti non sono facili da analizzare, ma sono molto importanti nello sviluppo delle moderne tecnologie. I Qubit, in particolare, sono al centro dello studio del Quantum Computing. Negli ultimi anni le ricerche hanno portato a considerare almeno tre diversi tipi di Qubit, detti di flusso, di carica e di fase. Essi rappresentano le quantità di primario interesse nell'analisi di molti dispositivi, soprattutto giunzioni Josephon, importanti perché tramite le coppie di Cooper permettono il passaggio di una corrente superconduttiva che non incontra resistività lungo il conduttore. Tali quantità sono la carica superconduttiva delle coppie di cooper, il flusso di bosoni che tunnela la giunzione e la differenza di fase al passaggio nel circuito. Ci sono ancora però molti dubbi e gli attuali fronti di ricerca su questi argomenti riusciranno probabilmente nei prossimi anni a dare un quadro più chiaro della situazione.

# **Appendice A**

### **Propagatore dell'oscillatore armonico**

Vediamo dal punto di vista matematico come effettuare la somma sui cammini in alcune particolari situazioni. Nello specifico tratteremo il caso di un sistema fisico composto da oscillatori armonici. Questi sono difatti una possibile modellizzazione per tantissimi sistemi fisici anche molto complicati e anche noi li useremo per studiare i sistemi aperti dissipativi. Calcoleremo il propagatore nella Formulazione Lagrangiana, partendo da Lagrangiane che coinvolgono al più la seconda potenza delle variabili, i cui integrali saranno quindi gaussiani.[3] Useremo un metodo variazionale che vale per tutte le lagrangiane del tipo:

$$\mathcal{L} = a(t)\dot{q} + b(t)q\dot{q} + c(t)q^2.$$
(A.1)

Sia  $q(t) = \overline{q}(t) + y(t)$ , ove  $\overline{q}(t)$  è la traiettoria classica del sistema che rende stazionaria la fase, tale cioè che  $S_{cl}([q(t)]; t_i.t_f) = S([\overline{q}(t)]; t_i, t_f)$ , mentre y(t) è una variazione differenziabile, cioè una stima della variazione del percorso in essere da quello classico, istante per istante. Andiamo ora ad espandere il funzionale dell'azione:

$$\mathcal{S}([q(t)]; t_i.t_f) = \mathcal{S}([\overline{q}(t)]; t_i, t_f) + \int_{t_i}^{t_f} dsy(s) \left. \frac{\delta \mathcal{S}}{\delta q(s)} \right|_{q(t) = \overline{q}(t)} + \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} ds_1 ds_2 y(s_1) y(s_2) \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}(q)}{\delta q(s_1) \delta q(s_2)} \right|_{q(t) = \overline{q}(t)}.$$
(A.2)

Ma per definizione di traiettoria classica  $\frac{\delta S}{\delta q(s)}\Big|_{q(t)=\overline{q}(t)} = 0$  quindi lo sviluppo dell'azione prevede solo due termini. Ciò significa che se espandiamo la (A.1) tramite la definzione di q(t) avremo:

$$\mathcal{L} = a(t)[\dot{\overline{q}}^2 + \dot{y}^2 + 2y\overline{q}] + b(t)[\dot{\overline{q}}\overline{q} + \dot{y}y + \dot{y}\overline{q} + \dot{\overline{q}}y] + c(t)[\overline{q}^2 + y^2 + 2\overline{q}y].$$
(A.3)

I termini in  $y^0$  daranno la lagrangiana dell'azione classica, quelli in  $y^1$  la lagrangiana della variazione prima dell'azione che si annulla e i termini in  $y^2$  quella della variazione seconda, che chiamaremo  $\mathcal{L}_y$ . Ora appare evidente che, poichè punti di arrivo e fine sono fissati,  $y(t_i) = y(t_f) = 0$ . A questo punto  $\mathcal{S}[q(t)] = \mathcal{S}_{cl} + \int_{t_i}^{t_f} ds \mathcal{L}_y$ , l'esponenziale dell'azione classica filtra attraverso l'integrazione perchè la traiettoria classica è  $\overline{q} = cost$  per l'integrazione sui cammini, poichè variare q(t) per come definito significa variare y(t). La parte rimanente dell'integrale avrà y(t) come variabile di integrazione,

poichè  $dq(t) = d\overline{q}(t) + dy(t) = dy(t)$ . inoltre avrà entrambi gli estremi in 0 e sarà una funzione le cui sole veriabili saranno gli estremi dell'integrazione nel tempo:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \mathcal{N}e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{cl}(q_f, q_i)} \int_0^0 \mathcal{D}y(t)e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} ds\mathcal{L}_y} = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_{cl}(q_f, q_i)}A(t_f, t_i).$$
(A.4)

Vanno calcolate separatamente le due parti del propagatore.

#### A.0.1 Esponenziale dell'azione classica

Usiamo la Lagrangiana dell'oscillatore armonico  $\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q^2$ :

$$\mathcal{S}_{cl} = \frac{1}{2}m\int_0^T ds(\dot{q}^2 + \omega^2 q^2) = \frac{1}{2}m\int_0^T v^2 ds - \frac{1}{2}m\omega^2\int_0^T q^2 ds.$$
(A.5)

Consideriamo il primo integrale integrando per parti:

$$\frac{1}{2}m\int_0^T \dot{q}\dot{q}ds = \frac{1}{2}m[\dot{q}(t)q(t)]_0^T - \int_0^T q(t)\ddot{q} = \frac{1}{2}m[\dot{q}(t)q(t)]_0^T - \int_0^T q(t)(-\omega^2 q).$$
(A.6)

Quindi:

$$\mathcal{S}_{cl} = \frac{1}{2}m[\dot{q}(t)q(t)]_0^T + \frac{1}{2}m\omega^2 \int_0^T q^2 ds - \frac{1}{2}m\omega^2 \int_0^T q^2 ds = \frac{1}{2}m[\dot{q}(t)q(t)]_0^T; \quad (A.7)$$

dove abbiamo tenuto conto che le equazioni di Eulero-Lagrange per l'oscillatore armonico non forzato sono  $\ddot{q} + \omega^2 q = 0$ , la cui soluzione è  $q(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$  che ci permette di ricavare  $q(0), \dot{q}(0), q(T), \dot{q}(T)$ . Sostituendo queste nella (A.7) si ricava:

$$\mathcal{S}_{cl} = \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)} [(q_f^2 + q_i^2)\cos(\omega T) - 2q_i q_f].$$
(A.8)

#### A.0.2 Integrale sui cammini di $\mathcal{L}_{y}$

L'integrale è di fatto lungo un cerchio, quindi si possono espandere le y(t) in serie di Fourier:

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{(n\pi t)}{T},$$
(A.9)

ove i diversi set di  $a_n$  specificano il percorso. Considerando:

$$\frac{m}{2} \int_{0}^{T} \dot{y}^{2} dt = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_{n} a_{m} \int_{0}^{T} \cos\left(\frac{m\pi t}{T}\right) \cos\left(\frac{n\pi t}{T}\right) = \frac{m}{2} \frac{T}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\pi^{2}}{T} a_{n}^{2},$$
(A.10)

si ha:

$$\frac{1}{2}m\int_0^T \dot{y}^2 dt - \frac{1}{2}m\omega^2 \int_0^T y^2 dt = \frac{m}{2}\frac{T}{2}\sum_{n=1}^\infty \frac{n\pi^2}{T}a_n^2 - \frac{1}{2}m\omega^2\frac{T}{2}\sum_{n=1}^\infty a_n^2, \qquad (A.11)$$

$$A(t_f, t_i) \propto \lim_{N \to +\infty} \prod_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} da_n exp\left\{\frac{\mathrm{i}mT}{4\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\frac{n\pi}{2T^2 - \omega^2}\right] a_n^2\right\}.$$
 (A.12)

Tralasciando una costante inziale, la produttoria di integrali dà una dipendenza del tipo:

$$\lim_{N \to +\infty} \prod_{i=1}^{N} \left[ \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right]^{-\frac{1}{2}} = \lim_{N \to +\infty} \prod_{i=1}^{N} \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \lim_{N \to +\infty} \prod_{i=1}^{N} \left( 1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}}.$$
(A.13)

Quasi tutta  $A(t_f, t_i)$  vediamo essere il prefattore della particella libera, eccetto il secondo termine della (A.13), che presenta una dipendenza da  $\omega$  e ha un limite per  $N \to +\infty$  che è  $(\frac{\sin(\omega t)}{\omega t})^{-\frac{1}{2}}$ . Unendo questo limite alla costante della particella libera otteniamo:

$$A(t_f, t_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}} \left(\frac{\sin(\omega T)}{\omega T}\right)^{-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega T)}}.$$
 (A.14)

Quindi infine il propagatore dell'oscillatore armonico è:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} exp\left\{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)} [(q_f^2 + q_i^2)\cos(\omega T) - 2q_i q_f]\right\}.$$
(A.15)

#### A.0.3 Meccanica statistica dell'ocillatore armonico

Utilizzando l'espressione del propagatore per l'oscillatore armonico riportato in (A.15), basta fare le sostituzione  $\beta \rightarrow -\frac{i}{\hbar}(t_f - t_i)$  e  $q_i \rightarrow x'; q_f \rightarrow x$  per ottenere l'operatore statistico per un oscillatore armonico[3]:

$$\rho(x,x') = \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sin(\omega\hbar\beta)}} exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \frac{m\omega}{2\sinh(\omega\hbar\beta)} [(x^2 + x'^2)\cosh(\omega\hbar\beta) - 2xx']\right\},\tag{A.16}$$

da cui facendo la traccia è facile ottenere la funzione di Partizione per l'oscillatore armonico:

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)}.\tag{A.17}$$

# **Appendice B**

# Calcolo del Funzionale d'Influenza per tempi reali

Riscriviamo la (2.16) accorpando sia i termini in  $x \in q$ , sia quelli nelle stesse variabili ma accentate, e denotandolo con FV (Feynman-Vernon), scriviamo il funzionale:

$$\mathcal{F}_{FV}[x,x'] = \int d\mathbf{q}'_i d\mathbf{q}_i d\mathbf{q}_f \rho^R(\mathbf{q},\mathbf{q}_i,0) F[x,\mathbf{q}_f,\mathbf{q}_i] F[x',\mathbf{q}_f,\mathbf{q}'_i], \qquad (B.1)$$

dove:

$$F[x, \mathbf{q}_f, \mathbf{q}_i] = \int_{\mathbf{q}_i}^{\mathbf{q}_f} exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left(\mathcal{S}_R[\mathbf{q}] + \mathcal{S}_{SR}[x, \mathbf{q}]\right)\right\}.$$
 (B.2)

Nel nostro caso le azioni hanno espressioni:

$$\mathcal{S}_{R}[\mathbf{q}] = exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}\int_{0}^{t}\left(\frac{1}{2}m_{n}[\dot{q}_{n}^{2}-\omega_{n}^{2}q^{2}]\right)ds\right\}$$
(B.3)

e

$$\mathcal{S}_{SR}[x,\mathbf{q}] = exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}\int_{0}^{t}\left(c_{n}xq_{n}-x^{2}\frac{c_{n}^{2}}{2m_{n}\omega_{n}^{2}}\right)ds\right\}.$$
 (B.4)

Con le lagrangiane indipendenti, la sommatoria delle azioni diventa una produttoria di Funzionali d'Influenza:

$$F[x, \mathbf{q}_f, \mathbf{q}_i] = \prod_{n=1}^{N} F_n[x, \mathbf{q}_{nf}, \mathbf{q}_{ni}], \qquad (B.5)$$

ove il singolo

$$F_n[x, \mathbf{q}_{kf}, \mathbf{q}_{ki}] = \int \mathcal{D}\mathbf{q}exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^t ds \left(\frac{1}{2}m_n[\dot{q}_n^2 + \omega_n^2 q^2] + c_n x q_n - x^2 \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n^2}\right)\right\}.$$
(B.6)

Da qui in poi il conto procede con lo stesso approccio del calcolo del Path Integral per oscillatore armonico. Suddividiamo la traiettoria in somma di percorso classico e variazione da quest'ultimo:

$$q_n(s) = \tilde{q}_n(s) + \alpha_n(s). \tag{B.7}$$

Esplicitiamo q in questo modo nel funzionale dell'azione. Ricordiamo che l'azione classica è costante per un integrale sui cammini e quindi filtra attraverso questo. Inoltre non compare il termine nella potenza prima delle  $\alpha$ . Perveniamo a:

$$F[x, \mathbf{q}_{kf}, \mathbf{q}_{ki}] = exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{0}^{t} ds \left(\frac{1}{2}m_{n}[\tilde{q}_{n}^{2} - \omega_{n}^{2}\tilde{q}_{n}^{2}] + c_{n}x\tilde{q}_{n} - x^{2}\frac{c_{n}^{2}}{2m_{n}\omega_{n}^{2}}\right)\right\}$$
$$\times \oint \mathcal{D}\alpha_{n}exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{0}^{t} ds \left(\frac{1}{2}m_{n}\dot{\alpha}_{n}^{2} - \omega_{n}^{2}\alpha^{2}\right)\right\}.$$
(B.8)

Qui osserviamo di nuovo due parti da calcolare. La seconda, cioè l'integrale in  $\mathcal{D}\alpha$ , è già nota, perchè è lo stesso identico calcolo fatto per l'oscillatore armonico. Il risultato è il prefattore costante che ci è mostrato nella (A.14).

Per quanto concerne l'esponenziale del cammino classico, a partire dalla lagrangiana dell'azione ricaviamo l'equazione del moto di Eulero-Lagrange:

$$m_n \ddot{\tilde{q}}_n(s) + m_n \omega^2 \tilde{q}_n(s) = c_n x(s).$$
(B.9)

Tutta la differenza con il calcolo svolto in Appendice A è insita all'interno del secondo membro della (B.9). Stavolta non vi è 0, ma un termine derivante dall'accoppiamento all'ambiente. Ciò rende i calcoli, benchè simili, più lunghi di quelli dell'oscillatore senza bagno.

Integrando per parti l'integrale nel tempo dell'azione si trova  $\Sigma(x, \mathbf{q}_{kf}, \mathbf{q}_{ki})$ . Una volta completati i conti, unendo i risultati abbiamo:

$$F[x, \mathbf{q}_{kf}, \mathbf{q}_{ki}] = \sqrt{\frac{m_n \omega_n}{2\pi i \hbar \sin(\omega_n T)}} exp\left\{\frac{i}{\hbar} \Sigma(x, \mathbf{q}_{kf}, \mathbf{q}_{ki})\right\}.$$
 (B.10)

Usando le espresioni ricavate e anche l'espressione della funzione di partizione di oscillatore armonico ricavata alla fine del capitolo 1, si perviene al rilsultato finale

$$\mathcal{F}_{FV}[x(t), x'(t)] = exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{S}_{FV}[x(t), x'(t)]\right\}.$$
(B.11)

la cui discussione è rimandata al capitolo 2.

# **Appendice C**

# Calcolo del Funzionale d'Influenza per tempi immaginari

Molte volte in meccanica statistica capita di essere interessati allo studio dell'operatore statistico all'equilibrio, motivo per cui non serve usare la funzione di propagazione J, ma si possono sfruttare la seguenti relazioni, ricavabili dal capitolo 1:

$$\begin{cases} \rho(x'',x') = \frac{1}{\mathcal{Z}} \langle x'' | e^{-\beta H} | x' \rangle \\ \mathcal{Z} = \int dq \, \langle x' | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle = \int dx'' \, \langle x'' | e^{-\beta H} | x' \rangle = \mathcal{N} \oint \mathcal{D}x(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}^{E}[q(\tau)]} \end{cases}$$
(C.1)

Quindi posso scrivere:

$$\rho(x'',x') = \frac{1}{\mathcal{Z}} \oint \mathcal{D}x(\tau) exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\mathcal{S}^E[x(\tau)]\right\}.$$
 (C.2)

Ricordando la (1.50) che definisce l'azione euclidea, posso facilmente generalizzare la (B.2) al caso di operatore statistico facente riferimento anche al reservoir:

$$\rho(x''q'';x',q') = \frac{1}{\mathcal{Z}} \oint \mathcal{D}x(\tau) \oint \mathcal{D}q(\tau) exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\mathcal{L}_S^E + \mathcal{L}_R^E + \mathcal{L}_{RS}^E\right)\right\}.$$
(C.3)

Da qui un'ulteriore integrazione sulle coordinate del reservoir farà apparire il Funzionale d'Influenza, che racchiude tutte le informazioni sugli effetti del Reservoir:

$$\rho(x'',x') = \frac{1}{\mathcal{Z}} \oint \mathcal{D}x(\tau) exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\mathcal{S}_{S}^{E}[x(\tau)]\right\} \mathcal{F}[x(\tau)], \quad (C.4)$$

dove:

$$\mathcal{F}[x(\tau)] = exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\mathcal{S}_{infl}^{E}[x(\tau)]\right\} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \oint \mathcal{D}q(\tau)exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left(\mathcal{S}_{R}^{E}[q] + \mathcal{S}_{xq}^{E}[x,q]\right)\right\}.$$
(C.5)

La soluzione è:

$$\mathcal{F}^{(E)}[\sigma(\tau)] = exp\left\{\frac{1}{2}\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\tau} d\tau' \mathcal{K}(\tau - \tau') \left(x(\tau) - x(\tau')\right)^2\right\},\tag{C.6}$$

dove:

$$\mathcal{K}(\tau) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) D(\omega); \quad D_\omega(\tau) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{2\omega}{\nu_n^2 + \omega^2} e^{i\nu_n \tau}, \quad (C.7)$$

La prima equazione qui scritta è il propagatore, che è moltiplicato per il quadrato di una differenza di camini, cioè una interferenza della stessa particella. Come si può vedere il propagatore è qui un termine del tutto non locale, per cui non ha termini aggiuntivi di rinormalizzazione come nel caso dell'IF su tempo reale. La seconda equazione, invece, è la funzione di Green di un bosone libero, con  $\nu_n$  che sono le Frequenze di Matsubara.

## Bibliografia

- [1] Subhashish Banerjee, Subhashish Banerjee, and Ahmad. *Open quantum systems*. Springer, 2018.
- [2] Amir O Caldeira and Anthony J Leggett. Path integral approach to quantum brownian motion. *Physica A: Statistical mechanics and its Applications*, 121(3):587–616, 1983.
- [3] Richard P Feynman, Albert R Hibbs, and Daniel F Styer. *Quantum mechanics and path integrals*. Courier Corporation, 2010.
- [4] David Gross. Lectures on quantum field theory.
- [5] Gert-Ludwig Ingold. Path integrals and their application to dissipative quantum systems. In *Coherent Evolution in Noisy Environments*, pages 1–53. Springer, 2002.
- [6] TD Lee. Particle physics and introduction to field theory (contemporary concepts in physics, vol. 1). *Harwood Academic*, 9, 1981.
- [7] J Sakurai and J Napolitano. Modern quantum mechanics 2nd edition. *Person New International edition*, 2014.
- [8] Ulrich Weiss. *Quantum dissipative systems*, volume 13. World scientific, 2012.