

Trabajo Fin de Grado en Física

# Sistemas clásico-cuánticos y su consistencia

Pablo Rodríguez Alcalde

Universidad de Granada

Julio de 2018



**UNIVERSIDAD  
DE GRANADA**

Tutor: Lorenzo Luis Salcedo Moreno

*Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear*

*Universidad de Granada*

## **Abstract**

A review about the physical and mathematical consistency of classical-quantum hybrid systems has been made. It have been different motivations for the development of a formalism that describes this type of systems, either as methods of approaching a complete quantum system, or as a new general formalism. It has been observed that there are two opinions against the inconsistencies found in attempts to develop a formalism for these systems. The first option states that these systems are not consistent by themselves and have to be relegated to the role of approximations. The second conceives inconsistencies as emerging phenomena on which it is worthwhile to continue investigating.

## **Resumen**

Se ha realizado una revisión bibliográfica acerca de la consistencia física y matemática de los sistemas híbridos clásico-cuánticos. Se encuentran distintas motivaciones para el desarrollo de un formalismo que describa este tipo de sistemas, ya sea como métodos de aproximación a un sistema cuántico completo, o como un nuevo formalismo más general. Se ha observado que existen dos opiniones frente a las inconsistencias encontradas en los intentos de desarrollar un formalismo para estos sistemas. La primera opción afirma que estos sistemas no son consistentes en sí mismos y han de relegarse al papel de aproximaciones. La segunda concibe las inconsistencias como fenómenos emergentes sobre los que merece la pena seguir investigando.

# Índice

<b>1</b>	<b>Introducción.</b>	<b>4</b>
1.1	Conceptos teóricos. . . . .	6
<b>2</b>	<b>Sistemas clásico-cuánticos como aproximación.</b>	<b>7</b>
2.1	Dinámica clásico-cuántica de Lioville. . . . .	8
2.2	<i>Surface Hopping</i> . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Formalismo de Elze.</b>	<b>12</b>
3.1	Desarrollo teórico. . . . .	12
3.1.1	Formalismo de Heslot para la mecánica cuántica. . . . .	12
3.1.2	Colectividades híbridas clásico-cuánticas. . . . .	14
3.1.3	Dinámica clásico-cuántica de Elze. . . . .	16
3.2	Críticas al formalismo. . . . .	18
<b>4</b>	<b>Formalismo de Hall-Reginatto.</b>	<b>19</b>
4.1	Desarrollo teórico. . . . .	20
4.2	Inconsistencias del formalismo. . . . .	21
<b>5</b>	<b>Formalismo de Koopman-Sudarshan.</b>	<b>23</b>
5.1	Desarrollo teórico. . . . .	24
5.1.1	Aparatos de medida en el formalismo de Koopman. . . . .	25
5.2	Inconsistencias del formalismo. . . . .	26
<b>6</b>	<b>Formalismo de Caro-Gil-Salcedo.</b>	<b>27</b>
6.1	Impedimentos a la formulación de sistemas híbridos clásico-cuánticos. . . .	27
6.2	Construcción del paréntesis dinámico híbrido. . . . .	30
<b>7</b>	<b>Summary and Conclusions.</b>	<b>33</b>
	<b>Referencias</b>	<b>36</b>

## 1 Introducción.

Existe consenso en el mundo de la física acerca de que la mecánica cuántica proporciona la correcta descripción de la naturaleza, al menos en lo que concierne a los fenómenos que se han observado en la actualidad, y sin embargo aún se sigue haciendo uso de la mecánica clásica para el estudio de ciertos sistemas ya sea por simplicidad, por la falta de una teoría cuántica consistente o como aproximación.

Desde los orígenes de la mecánica cuántica la definición del límite entre los mundos microscópico y macroscópico no ha sido completamente satisfactoria. Incluso es difícil saber si una variable va comportarse clásica o cuánticamente. Por otro lado, la dificultad presente en la correcta interpretación de la mecánica cuántica ha acarreado numerosos problemas filosóficos a raíz de la propuesta de experimentos ideales como la paradoja Einstein-Podolsky-Rosen (EPR) , la aparición de la decoherencia dentro de la teoría o el papel que cumple la información en la física como nueva forma de estudiar los sistemas [1, 2].

Este problema de interpretación radica en el principio de superposición, según el cual se admite como sistema cuántico cualquier superposición de estados pertenecientes a un espacio de Hilbert, que no se manifiesta de forma clara a escala macroscópica. Entonces, ¿cómo es posible establecer una correspondencia entre el mundo cuántico y las observaciones intuitivas de la vida cotidiana clásica? Encontrar la respuesta a esta pregunta es lo que se conoce como el problema de la emergencia de la clasicidad.

La solución propuesta por Bohr fue la de "dibujar" un límite movable entre los mundos clásico y cuántico, manteniendo en el lado clásico ciertos objetos como los aparatos de medida y los observadores. Esta propuesta dio lugar a llamada interpretación de Copenhague (CI) de la mecánica cuántica: "ningún fenómeno (cuántico) es un fenómeno hasta que es un fenómeno registrado (medido)"[1]. La CI no proporciona las herramientas para asentar el límite entre lo clásico y lo cuántico, por lo que dentro de su paradigma el universo se rige por dos conjuntos de leyes cuyo dominio no está claro. Y a pesar de ello es la interpretación de la mecánica cuántica más extendida [3].

Existe otra interpretación de la cuántica conocida como la interpretación de muchos mundos (MWI), donde el principio de superposición se aplica a escala universal y donde todo se representa como una gigantesca combinación de estados cuánticos. Esta interpretación no presenta la dualidad que sufre la CI, pero tampoco resuelve el problema de la emergencia de clasicidad, sino que según [1] sólo posterga el problema, viola el intuitivo concepto de las leyes de conservación (las cuales requieren la existencia de un único universo) y no contempla la existencia de bases privilegiadas de un sistema.

En este contexto, cobra especial relevancia el papel de la decoherencia en la evolución de los sistemas cuánticos. Y es que el principio de superposición enunciado como anteriormente sólo tiene aplicabilidad total a sistemas aislados. En presencia de entorno, la interacción del sistema con éste lleva a la aparición de estados privilegiados ("*einselection*"), "*pointer states*" que son estables ante la acción del sistema y proporcionan ventajas en las mediciones, ver [1] para los detalles de la discusión. La consecuencia más importante de la decoherencia es que es una característica propia de los sistemas que se comportan (de forma efectiva) clásicamente [4].

La interpretación de Copenhague de la mecánica cuántica postula que los aparatos de medida se mantienen dentro del mundo clásico y perturban los sistemas que se someten

a medición, produciendo alteraciones en el mismo, como el conocido “colapso” de la función de onda. Sin embargo, la naturaleza de esta interacción sigue siendo un problema sin resolver en la actualidad a pesar de contar con numerosas propuestas entre las que se encuentran [4, 5, 6].

La teoría de la información cuántica predice el entrelazamiento como una correlación entre sistemas donde la información del sistema conjunto no proporciona la información completa de los subsistemas que lo forman [7], y éste es un fenómeno puramente cuántico. Según Zurek [1], “La estructura de espacio físico clásica emerge del espacio de Hilbert cuántico en el límite macroscópico adecuado. La combinación de «*einselection*» con la dinámica conducen a la idealización de punto y trayectoria clásicos. En las mediciones, la «*einselection*» sustituye al entrelazamiento entre el aparato y el sistema medible, por las correlaciones clásicas”.

Mientras tanto, las leyes clásicas son autoconsistentes y sientan las bases de la mecánica cuántica.

Reflexionando sobre estos aspectos son muchos los autores que motivan la formulación de una dinámica híbrida clásico-cuántica. En sus trabajos, se pueden encontrar afirmaciones como: “La mecánica cuántica como teoría física, debe presuponer la existencia de los sistemas clásicos que pueden ser influidos por los sistemas cuánticos. Esto requiere el acoplamiento entre sistemas clásicos y cuánticos” referida al problema de la medida en [5] o “Dado que la descripción cuántica completa de los grandes sistemas de muchos cuerpos no es realizable hasta el momento, los métodos híbridos clásicos-cuánticos pueden proveer medios precisos y computacionalmente tratables para seguir la evolución de los sistemas y su entorno” [8].

Se observa pues, que existen dos intenciones distintas en cuanto al desarrollo de un formalismo que describa la interacción entre los sistemas clásicos y cuánticos. La más aceptada es la visión de que los sistemas clásico-cuánticos [9]: “son una buena aproximación a los sistemas cuyo tratamiento cuántico completo es muy complejo o por la falta de una teoría cuántica consistente, como es el caso de la teoría de la relatividad general de Einstein”.

En el caso de la gravedad, la no existencia de una teoría cuántica ha llevado al uso del tratamiento semiclásico de campo medio como aproximación, formalismo que se desarrolla y discute en la sec. (3).

Otras aplicaciones como método aproximado se encuentran en el campo de la óptica [10, 11], la química física [12, 13], o los sistemas cuánticos abiertos donde la decoherencia juega un papel fundamental en la dinámica [14]. Típicamente los métodos aproximados clásico-cuánticos consideran las partículas cuánticas en presencia de un potencial dependiente del tiempo que es generado por el movimiento de las partículas clásicas [15].

Sin embargo, si se quieren considerar los sistemas híbridos clásico-cuánticos en sí mismos (no como aproximación a sistemas cuánticos), se requiere un marco teórico general en el que ambos sectores interaccionen. La dinámica que gobierne a este tipo de sistemas deberá presentar una consistencia interna (física y matemática) similar a la que comparten la dinámica clásica y cuántica por separado. En esta línea los trabajos [9, 16, 17, 18, 19] han señalado los retos y limitaciones que presenta un acoplamiento de este tipo.

En [20] se han recopilado, categorizado y discutido los diferentes puntos de vista propuestos para el desarrollo de un formalismo capaz de describir estos sistemas.

## 1.1 Conceptos teóricos.

En este apartado de la introducción se va a tratar de recopilar de forma compacta los conceptos que involucran las dinámicas clásica y cuántica.

La dinámica clásica puede formularse sobre el espacio configuración o sobre el espacio de las fases, donde los estados se representan por sus coordenadas. El primer caso es la variedad diferenciable de todas las posibles posiciones instantáneas del sistema y su dimensión es  $N$ , donde  $N$  se corresponde con el número de grados de libertad del sistema. El espacio de las fases es la variedad diferenciable ampliada del espacio de configuración, donde además de incluirse las posiciones del sistema se incluyen sus momentos conjugados, por lo que su dimensión es  $2N$ . Las ecuaciones que evolucionan a estas coordenadas son las ecuaciones de Hamilton que para las coordenadas del espacio fásico  $(x_i, k_i)$  tienen la forma [21]:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial k_i} \quad \frac{dk_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}.$$

La dinámica cuántica por su parte se define sobre el espacio de Hilbert, un espacio vectorial complejo dotado de producto escalar donde los estados se representan por vectores  $|\Psi\rangle$  (ket en notación de Dirac) normalizados. La dimensión del espacio de Hilbert puede ser finita o infinita, como por ejemplo son el espacio de Hilbert del espín ( $\mathbb{C}^d$ ) y de posición y momento ( $L^2(\mathbb{R}^d)$ ) respectivamente. La ecuación de evolución de los estados que forman el espacio de Hilbert es la ecuación de Schrödinger [3, 22]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle.$$

Ambas dinámicas comparten que pueden ser descritas en la imagen de Heisenberg por una ecuación de evolución de la forma:

$$\frac{dA}{dt} = (A, H) + \frac{\partial A}{\partial t}$$

donde  $t$  es el tiempo,  $A$  es un observable arbitrario y  $H$  es el hamiltoniano del sistema. El término  $\partial A / \partial t$  se tiene en cuenta si  $A$  es explícitamente dependiente del tiempo, mientras que el término  $(A, H)$  representa la evolución dinámica de  $A$ . En el caso clásico, este paréntesis dinámico es el corchete de Poisson definido como:

$$(A, B)_c = \{A, B\} = \sum_i \left( \frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial x_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right)$$

mientras que en el caso cuántico, el paréntesis dinámico se corresponde con el conmutador:

$$(A, B)_q = \frac{1}{i\hbar} [A, B] = \frac{1}{i\hbar} (AB - BA).$$

Ambos casos comparten que son un paréntesis de Lie satisfaciendo una serie de propiedades que se discuten en la sec. (6).

Los estados cuánticos más generales son representados por la matriz densidad del estado que se define para un estado puro  $|\Psi\rangle$  como:  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ , en la notación de Dirac. Para estados más generales, los estados mezcla se tiene:

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad 0 \leq p_i \leq 1, \quad \sum_i p_i = 1.$$

En el caso clásico, las matrices densidad se sustituyen por funciones densidad  $\rho(x, k)$  sobre el espacio fásico, que son positivas y normalizadas.

El principio de correspondencia establece que para grandes valores de los números cuánticos la mecánica clásica es una buena aproximación a la mecánica cuántica. Comunmente se usa el límite clásico con  $\hbar \rightarrow 0$ , gracias al cual, se recupera el corchete de Poisson a partir del conmutador. Este concepto va a ser clave en el desarrollo de los sistemas híbridos clásico-cuánticos en la medida en que se quiere que este tipo de sistemas se correspondan con cierto límite para el caso del acoplamiento de dos sistemas cuánticos.

## 2 Sistemas clásico-cuánticos como aproximación.

Como se ha mencionado anteriormente, se pueden acudir a la formulación de sistemas clásico-cuánticos como aproximación a un sistema cuyo tratamiento cuántico completo es complejo, inabordable computacionalmente o dicho tratamiento no es imprescindible. Como características generales de los sistemas susceptibles a este tratamiento se tiene que son sistemas grandes y complejos de los cuales una parte pequeña del sistema es la que cobra más interés y requiere un tratamiento más detallado.

Por otro lado, es frecuente que los sistemas cuánticos no se presenten aislados, sino que las interacciones con el entorno deben ser tenidas en cuenta dado que estas interacciones son fuente de decoherencia y disipación. En muchas de estas ocasiones, el entorno se puede tratar correctamente por la mecánica clásica y es por ello que el subsistema cuántico de interés puede ser modelado como un sistema cuántico abierto en interacción con su entorno.

Ejemplos de este tipo de sistemas pueden ser encontrados en la biología como en “*excitation energy transfer from light harvesting antenna molecules to reaction center in photosynthetic bacteria and plants*” [23, 24].

El formalismo adoptado más frecuentemente en estos casos es el de sistema-baño. La mayoría de estas descripciones sistema-baño se centran en la matriz densidad del subsistema, que se puede obtener por la traza parcial sobre los grados de libertad del baño.

Además, en los sistemas se producen cambios bruscos entre estados. Estos procesos no pueden ser explicados por una dinámica adiabática, sino que los efectos no adiabáticos han de tenerse en cuenta. La dinámica no adiabática tiene un papel muy importante en la descripción de muchos fenómenos como la fotoquímica [11], donde las transiciones entre varios estados electrónicos ocurren como resultado de saltos no permitidos entre estados adiabáticos o intersecciones canónicas entre superficies de energía potencial [25, 26].

Para introducir una dinámica clásico-cuántica en este tipo de sistemas se ha de partir de la dinámica de los sistemas cuánticos abiertos donde la descripción de la evolución temporal viene dada por la ecuación de Lioville:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)] \quad (2.1)$$

aquí,  $[\cdot, \cdot]$  es el conmutador entre operadores,  $\rho(t)$  es el operador matriz densidad en el tiempo  $t$  y  $H$  es el hamiltoniano total del sistema y que a menudo se puede escribir como sigue:

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(q, Q). \quad (2.2)$$

Es conveniente separar el potencial como la suma del potencial del subsistema, el potencial del baño y los términos de acoplamiento baño-subsistema:  $V(a, Q) = V_s(q) + V_b(Q) + V_c(q, Q)$  de forma que el hamiltoniano total puede expresarse como la suma de las contribuciones:

$$H = h_s + H_b + V_c. \quad (2.3)$$

Para describir la dinámica de la matriz densidad reducida de los subsistemas débilmente acoplados con el entorno, se tiene la ecuación de Redfield, dentro del marco teórico de la aproximación de Born-Markov [27]. La aproximación consiste en suponer que las funciones de correlación de un sistema se amortiguan lo suficientemente rápido comparado con el decaimiento del sistema, de forma que estas no varían su efecto durante el proceso de interés. Expresada en la base de estados propios de la energía de  $h_s$ ,  $h_s|\lambda\rangle = \epsilon_\lambda|\lambda\rangle$  la ecuación de Redfield tiene la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_s^{\lambda\lambda'}(t) = -i\omega_{\lambda\lambda'} \rho_s^{\lambda\lambda'}(t) + R_{\lambda\lambda';\nu\nu'} \rho_s^{\nu\nu'}(t) \quad (2.4)$$

donde se ha usado el convenio de Einstein para índices repetidos. Aquí  $\omega_{\lambda\lambda'} = (\epsilon - \epsilon')/\hbar$ , mientras que el segundo sumando da cuenta de los efectos disipativos debidos a la interacción con el baño.

En general, la evolución del subsistema en el contexto de la aproximación de Born-Markov, viene regida por la ecuación de Lindblad:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_s(t) = -\frac{i}{\hbar} [h_s, \rho_s(t)] + \frac{1}{2} \sum_j ([L_j \rho_s(t), L_j] + [L_j, L_j \rho_s(t)]) \quad (2.5)$$

donde los operadores  $L_j$  caracterizan las interacciones del subsistema con el baño. Esta es la ecuación más general que garantiza  $\rho_s(t) > 0$  sin imponer una evolución unitaria [28].

## 2.1 Dinámica clasico-cuántica de Liouville.

En este apartado se va a introducir la dinámica clásico cuántica de Liouville siguiendo el trabajo de Kapral [8]. El primer paso para construir la ecuación semiclásica de Liouville es introducir una representación en el espacio fásico de los grados de libertad del baño  $(R, P)$ . Realmente estos grados de libertad son esencialmente cuánticos pero se quiere trabajar con ellos de forma clásica introduciendo de ese modo la aproximación semiclásica. Para ello es conveniente trabajar con la transformada parcial de Wigner [29] sobre estos grados de libertad definida como:

$$\rho_W(R, P) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int dZ e^{iP \cdot R/\hbar} \langle R - \frac{Z}{2} | \rho | R + \frac{Z}{2} \rangle. \quad (2.6)$$

Hay que tener en cuenta que aunque la transformada de Wigner de un operador sea una función ordinaria, físicamente sigue representado un objeto cuántico.

Haciendo uso del cambio de variable  $X = (R, P)$  la ecuación cuántica de Liouville se expresa como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_W(X, t) = -\frac{i}{\hbar} \left( H_W e^{\hbar\Lambda/2i} \rho_W - \rho_W e^{\hbar\Lambda/2i} H_W \right) \quad (2.7)$$



donde  $\Lambda = \overleftarrow{\nabla}_P \cdot \overrightarrow{\nabla}_R - \overleftarrow{\nabla}_R \cdot \overrightarrow{\nabla}_P$  es el negativo del corchete de Poisson. Las direcciones de las flechas indican la dirección en la que actúa el operador.

La ecuación semiclásica de Liouville se deriva de la expansión hasta orden  $\mathcal{O}(\hbar)$  de las exponenciales presentes en la ecuación anterior según:

$$e^{\hbar\Lambda/2i} = e^{\mu\Lambda'/2i} = 1 + \hbar\Lambda'/2i + \mathcal{O}(\hbar^2). \quad (2.8)$$

Es en este momento cuando se introduce el carácter clásico en el sistema, pues se ha truncado el desarrollo hasta primer orden en  $\hbar$ . Este truncado es válido para sistemas en los que  $M \gg m$  como es el caso de un subsistema cuántico pequeño con partículas de masa  $m$ , que presenta una gran cantidad de fluctuaciones, acoplado con su entorno formado (comparativamente) por partículas pesadas y lentas cuya masa es  $M$ .

Sustituyendo (2.8) en la ecuación (2.7), se obtiene la ecuación clásico-cuántica de Liouville (QCLE):

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_W(X, t) = -i\mathcal{L}\rho_W(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_W, \rho_W(t)] + \frac{1}{2}(\{H_W, \rho_W(t)\} - \{\rho_W(t), H_W\}) \quad (2.9)$$

El operador  $i\mathcal{L}$ , definido como el operador clásico-cuántico de Liouville (QCL), se obtiene comparando el segundo y tercer miembro de esta ecuación. Dada esta definición la solución formal de la ecuación (2.9) es:

$$\rho_W(X, t) = e^{-i\mathcal{L}t}\rho_W(X, t_0 = 0) \quad (2.10)$$

La QCLE puede ser expresada de forma similar a la ecuación cuántica de Liouville según:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_W(X, t) = -\frac{i}{\hbar}\left(\overrightarrow{H}_\Lambda\rho_W(t) - \rho_W\overleftarrow{H}_\Lambda\right) \quad (2.11)$$

donde el hamiltoniano es reemplazado por los operadores *forward* y *backward* definidos por:

$$\overrightarrow{H}_\Lambda = H_W\left(1 + \frac{\hbar\Lambda}{2i}\right); \quad \overleftarrow{H}_\Lambda = \left(1 + \frac{\hbar\Lambda}{2i}\right)H_W \quad (2.12)$$

Esta forma de la ecuación es útil para implementar las soluciones aproximadas de la QCLE y discutir las propiedades mecánico estadísticas de la dinámica clásico-cuántica de Liouville.

Por último para terminar la introducción a la QCLE se describen ciertas propiedades que presenta dicha ecuación.

1. La QCLE especifica la evolución temporal de la matriz densidad de todo el sistema comprendido por el baño y el subsistema cuántico y preserva la energía.
2. Si el potencial  $V_c$  es nulo la matriz densidad factoriza en el producto de las matrices densidad del subsistema cuántico y el baño, de forma que la matriz del subsistema satisface la ecuación cuántica de Liouville, mientras que la densidad definida en el espacio de las fases del baño satisface la versión clásica. Esto es:

$$\begin{aligned} \rho(X, t) &= \rho_s(t)\rho_b(X, t) \\ \frac{\partial}{\partial t}\rho_s(t) &= -\frac{i}{\hbar}[h_s, \rho_s(t)] \\ \frac{\partial}{\partial t}\rho_b(X, t) &= \{H_b(X), \rho_b(X, t)\} \end{aligned}$$

3. En ciertos casos se adopta una representación del acoplamiento baño-subsistema modelando el baño como un conjunto de osciladores armónicos acoplados bilinealmente al subsistema cuántico. En este caso el potencial de acoplamiento ha de reescribirse como  $V_c(q, R) = C(q) \cdot R$  de forma que la transformada parcial de Wigner del Hamiltoniano toma la forma:

$$H_W = \frac{p^2}{2m} + V_s(q) + \frac{P^2}{2M} + V_h(X) + C(q) \cdot R \equiv h_s + H_h(X) + C(q)R \quad (2.13)$$

Aquí,  $H_h$  denota el hamiltoniano de oscilador armónico del baño. Con el hamiltoniano expresado de esta forma se puede mostrar que cuando se desarrolla en serie de potencias la exponencial de la ecuación (2.8) ésta se trunca en orden uno, recuperándose la QCLE dada en la ecuación (2.11). Esto significa que la QCLE es exacta de forma general para un sistema cuántico acoplado bilinealmente a baños armónicos. Para hamiltonianos más generales las series no se truncan y la dinámica QCL es una aproximación a un tratamiento cuántico completo de la dinámica de los sistemas.

4. Esta ecuación presenta características similares a la aproximación de campo medio, pero introduce nuevas correcciones. Y es que como la aproximación de campo medio no contempla las fluctuaciones cuánticas, este método se ha tratado de modificar por ejemplo combinándolo con métodos de *surface-hopping* (que están basados en la ecuación semiclásica de Liouville) [8].

## 2.2 Surface Hopping.

Una vez presentado el formalismo empleado para modelar aquellos sistemas cuánticos acoplados a su entorno, se va a pasar a explicar en qué consisten los métodos *surface-hopping*. En concreto se describe el enfoque de Tully [25]. Estos métodos son empleados de forma frecuente para simular procesos no adiabáticos de sistemas clásico-cuánticos y se valen de la QCL [8, 30]. En estos enfoques las variables del espacio fásico del baño siguen trayectorias newtonianas sobre superficies adiabáticas. Los efectos no adiabáticos son tenidos en cuenta como saltos (“hops”) entre las diferentes superficies adiabáticas, donde estos saltos se rigen por reglas probabilísticas.

En el algoritmo de Tully, llamado de “*fewest-switches*”, se supone que la función de onda electrónica depende de la posición de los núcleos, la cual a su vez presenta dependencia temporal:  $\psi_e = |\psi(R(t), t)\rangle$ . La evolución de  $R(t)$  es gobernada por un algoritmo estocástico. Se calcula la tasa de transición para especificar la evolución en el espacio de las fases de las variables nucleares  $R(t)$  y  $P(t)$  de la siguiente manera:

Sean dos posibles estados adiabáticos  $\alpha$  y  $\beta$ . Cuando el sistema se encuentra en el estado  $\alpha$  las coordenadas evolucionan siguiendo una trayectoria newtoniana sobre la superficie adiabática  $\alpha$ . Las transiciones a otro estado  $\beta$  ocurren con probabilidades por unidad de tiempo de la forma:

$$p_{\alpha \rightarrow \beta} = r_{\alpha \rightarrow \beta} \Theta(r_{\alpha \rightarrow \beta})$$

donde  $r_{\alpha \rightarrow \beta}$  es la tasa de transición y  $\Theta(x)$  es la función escalón de Heaviside. Debido a que la tasa de transición puede tomar valores negativos, se ha introducido la función de Heaviside que asigna probabilidad cero a estos valores negativos de la tasa de transición.

Además, cuando se produce un salto al estado  $\beta$  se ha de reajustar el momento del sistema para garantizar la conservación de la energía. Sin embargo, para saltos desde  $\beta$  a  $\alpha$  puede suceder que no haya suficiente energía en el entorno como para garantizar esta conservación, por lo que se modifica la regla de transición asignando a este salto probabilidad cero. Esta tasa de transición se ajusta para que reproduzca la suma total sobre los estados finales:

$$\rho_s^{\alpha' \alpha''} = -\frac{2P}{M} \cdot \text{Re}(d_{\alpha' \alpha''} \rho_s^{\alpha' \alpha''})$$

donde  $d_{\alpha\beta}$  es el elemento de matriz de acoplamiento no adiabático  $\langle \alpha; R | \frac{\partial}{\partial R} | \beta; R \rangle$ .

La prescripción de Tully es práctica pero presenta limitaciones como que puede fallar para tiempos largos. Además, estos métodos pueden sufrir defectos asociados con el tratamiento que se hace de la decoherencia. En muchos casos, para tenerla en cuenta, se introduce en un término de la forma  $-\gamma \rho_s$  en la ecuación de movimiento de los elementos no diagonales de la matriz densidad del subsistema. La tasa de decoherencia  $\gamma$  se estima con métodos perturbativos.

Los métodos de *surface-hopping* suelen formularse en la base adiabática, es decir, en estados propios instantáneos del hamiltoniano. Se puede expresar la QCLE en esta base para observar qué relación guarda la dinámica clásico-cuántica de Liouville con estos métodos. Subotnik, Ouyang y Landry en [30] y Kapral en [8] establecen esta conexión entre el método *fewest-switches surface hopping* y la QCLE, reajustando las ecuaciones del método para obtener la dinámica QCL. Como los cambios en el momento del baño en la dinámica QCL son continuos, contrariamente a lo que ocurre en el método de *fewest-switches*, se imponen limitaciones al momento nuclear. También obtienen una expresión para el término de la decoherencia que ha de ser introducido en el análisis de *surface hopping*. La expresión que proporcionan es:

$$\gamma_{\alpha\alpha'}^{(\alpha)} \approx \frac{1}{2} (F_{\alpha'} - F_{\alpha}) \cdot \frac{1}{\rho^{\alpha\alpha'}} \frac{\partial \rho^{\alpha\alpha'}}{\partial P}$$

el superíndice  $(\alpha)$  hace referencia a la superficie adiabática en la que se tiene la evolución. Los subíndices se corresponden con el elemento de matriz en la base de estados adiabáticos.

Sin embargo, Kapral no realiza un algoritmo de *fewest-switches* en esencia, pues en su trabajo el sistema puede recorrer tanto trayectorias individuales como el promedio de las mismas y presenta el inconveniente de que para tiempos largos puede presentar inestabilidades.

Kapral [8], muestra la relación entre los métodos *surface-hopping*, los métodos de campo medio y la dinámica QCL, expresando las ecuaciones en la forma que tiene la QCLE proporcionando la solución llamada solución *forward-backward*. De esta manera llega a la conclusión de que la aproximación de campo medio desprecia las correlaciones que se encuentran en la QCLE debido a que muchos grados de libertad evolucionan sujetos a un potencial que es el promedio de todos los estados cuánticos. También aplica la solución *forward-backward* a los modelos Spin-Boson [31] y Fenna-Matthews-Olson [14], modelos de salto prohibido e intersección canónica [25, 26] y a la transferencia de protones en un disolvente polar [32, 33], comparando su efectividad con otros estudios de tipo exacto.

### 3 Formalismo de Elze.

En esta sección se aborda un formalismo que trata el acoplamiento directo entre grados de libertad cuánticos y clásicos basándose en el trabajo de Heslot [34], donde la mecánica cuántica se escribe en el lenguaje de la mecánica analítica clásica. Este enfoque está basado en la teoría de colectividades en el espacio de las fases, de ahí que su propósito sea expresar la dinámica semiclásica en el lenguaje de la mecánica clásica. Otros autores, como Hall y Reginatto [35, 36], también han desarrollado enfoques basados en la estadística de colectividades, sin embargo, la teoría de Elze se diferencia en que su teoría es lineal, frente a la no linealidad introducida por Hall y Reginatto en su funcional de la acción, como se verá más adelante en este trabajo. Para finalizar esta introducción al trabajo de Elze se quiere notar que este enfoque va a llevar a un tratamiento equivalente al de campo medio, cuya crítica se incluirá también en esta sección.

#### 3.1 Desarrollo teórico.

##### 3.1.1 Formalismo de Heslot para la mecánica cuántica.

Se ha mencionado que este formalismo pretende expresar la mecánica cuántica para que se asemeje formalmente a la mecánica analítica clásica [34]. Para ello, hay conceptos fundamentales que nos resultan particularmente interesantes, como son que los observables en mecánica clásica vienen representados por funciones regulares que toman valores de un espacio fásico  $2n$ -dimensional en los números reales, donde  $n$  es el número de grados de libertad del sistema. También el corchete de Poisson, responsable de toda la estructura canónica propia de la mecánica clásica y las llamadas transformaciones canónicas [37], compatibles con la estructura que genera el corchete de Poisson, que son las que mantienen invariantes ciertas propiedades físicas del sistema al que se aplican. Ejemplo de este tipo de transformaciones son las rotaciones y las translaciones.

En mecánica cuántica, la evolución de los sistemas puede ser descrita mediante una transformación unitaria según:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t - t_0)|\Psi(t_0)\rangle.$$

Donde  $\hat{U} = e^{-i\hat{H}(t-t_0)}$ <sup>1</sup>. Para estados estacionarios (aquellos que son propios del hamiltoniano) se tiene que su evolución es harmónica:

$$\hat{H}|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle,$$

$$|\phi_i(t)\rangle = e^{-iE_i(t-t_0)}|\phi_i\rangle.$$

Las transformaciones unitarias cumplen el mismo papel que las transformaciones canónicas en la mecánica clásica.

Gracias a esta evolución harmónica se introduce la notación de oscilador para expansión de un vector estado en cierta base ortonormal:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_i |\phi_i\rangle (X_i + iP_i).$$

<sup>1</sup>Siguiendo la exposición en [38] usamos unidades de  $\hbar = 1$ .

La dependencia temporal es tenida en cuenta en los coeficientes de la expansión, escritos explícitamente en términos de las partes real e imaginaria  $X_i$  y  $P_i$  respectivamente.

Con esta notación se puede definir la función hamiltoniana como  $\mathcal{H} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$  que de forma explícita toma la forma para una base ortonormal cualquiera:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle \phi_i | \hat{H} | \phi_j \rangle (X_i - iP_i)(X_j + iP_j) =: \mathcal{H}(X_i, P_i)$$

$\mathcal{H}$  es real por ser hermítico.

Desarrollando en la base de autoestados de energía se tiene:

$$\mathcal{H}(X_i, P_i) = \sum_i \frac{E_i}{2} (P_i^2 + X_i^2).$$

Es de esta expresión de donde proviene el nombre de notación de oscilador. El punto interesante de tomar esta notación es que  $(X_i, P_i)$  toman el rol de coordenadas canónicas en un espacio de las fases clásico de dimensión  $2\dim(\mathcal{H})$ . Una vez definidos los estados cuánticos de esta manera en la que son identificados por sus dos coordenadas canónicas en un espacio fásico  $2n$ -dimensional, la condición de normalización se expresa como:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \mathcal{C}(X_i, P_i) \equiv \frac{1}{2} \sum_i (X_i^2 + P_i^2) = 1.$$

La condición de normalización se conserva durante la evolución y proporciona como resultado que un estado con estas coordenadas canónicas está confinado en la superficie de la esfera  $2N$ -dimensional de radio  $\sqrt{2}$ . Esta restricción es una diferencia con respecto a la mecánica clásica estándar.

Ahora han de definirse las transformaciones canónicas y los observables mecánico-cuánticos en este nuevo formalismo. Para ello se siguen los siguientes puntos [38]:

- Las transformaciones unitarias en el espacio de Hilbert cuántico se corresponden con transformaciones canónicas en el espacio definido por  $(X, P)$ . En la formulación cuántica una transformación unitaria está definida por un operador que satisface  $U^\dagger U = U U^\dagger = 1$ . Con la notación antes introducida un estado afectado por una transformación de este tipo se puede expresar como una rotación:

$$\hat{U}|\Psi\rangle = \sum_{i,j} |\phi_i\rangle \langle \phi_j | \hat{U} | \phi_j \rangle \frac{(X_j + P_j)}{\sqrt{2}} = \sum_i |\phi_i\rangle \frac{(X'_i + P'_i)}{\sqrt{2}}.$$

Si se define el corchete de Poisson en esta notación se tiene:

$$\{F, G\} = \sum_i \left( \frac{\partial F}{\partial X_i} \frac{\partial G}{\partial P_i} - \frac{\partial F}{\partial P_i} \frac{\partial G}{\partial X_i} \right).$$

Expresión que junto con la anterior proporciona la invarianza necesaria para identificar las transformaciones unitarias con transformaciones canónicas:

$$U\{F, G\} = \{UF, UG\}$$

- Los observables se identifican con sus valores esperados. En cuántica, los valores esperados se calculan sobre los vectores estado. En este caso, un observable que dependa de las coordenadas canónicas  $(X_i, P_i)$  se define como el valor esperado de su operador cuántico en el estado que tiene esas coordenadas.

$$G(X_i, P_i) = \langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle$$

- El conmutador es un corchete de Poisson con respecto a  $(X, P)$ . Gracias a que la expresión anterior es lineal y admite un operador identidad se demuestra el siguiente resultado a partir del corchete de Poisson antes definido:

$$\{F, G\} = \langle \Psi | \frac{1}{i} [F, G] | \Psi \rangle$$

donde ambos lados de la igualdad son funciones de las variables  $(X_i, P_i)$ .

- Restricciones impuestas a la normalización y los observables y arbitrariedad de fase. Para asegurar que la condición de normalización es un invariante en esta dinámica es necesario aplicar ciertas restricciones a los observables. En concreto lo que se quiere es:

$$\mathcal{C}(X_i, P_i) = \mathcal{C}(X'_i, P'_i)$$

donde las coordenadas con primas se corresponden con las coordenadas después de aplicar una transformación canónica a la condición de normalización. En [38], se muestra que la ligadura que debe cumplir todo observable  $G$  es la siguiente:

$$\{\mathcal{C}, G\} = \sum_i \left( \frac{\partial G}{\partial P_i} X_i - \frac{\partial G}{\partial X_i} P_i \right) = 0.$$

Esta condición es equivalente a imponer que  $G$  es invariante bajo  $|\Psi\rangle \longrightarrow e^{i\theta} |\Psi\rangle$ .

### 3.1.2 Colectividades híbridas clásico-cuánticas.

Ahora bien, durante este desarrollo se está suponiendo tácitamente la pureza de los estados cuánticos, sin tener en cuenta la existencia de los estados mezcla. Estos estados mezcla se estudian por medio de las colectividades en el espacio de las fases ya definido. En mecánica cuántica, los estados mezcla son la generalización de un estado cuántico puro y vienen representados por su operador densidad [39] que es un operador autoadjunto semidefinido positivo, con el requisito de que tengan traza unidad para poder interpretarlo probabilísticamente. En el formalismo que se está considerando, el operador densidad se corresponde con una densidad de probabilidad  $\rho$  en el espacio de las fases clásico-cuántico de las variables  $(x_k, p_k; X_i, P_i)$  quedando definida por el valor esperado del operador en un estado  $|\Psi\rangle$  cualquiera:

$$\rho(x_k, p_k; X_i, P_i) = \langle \Psi | \rho(x_k, p_k) | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \rho_{ij}(x_k, p_k) (X_i - iP_i) (X_j + iP_j)$$

Esta distribución, como observable que es<sup>2</sup>, ha de cumplir los requisitos que conciernen a la condición de normalización anterior, más concretamente la traza ha de estar normalizada a la unidad, y no violar la invarianza de  $\mathcal{C}$ :

$$\{\mathcal{C}, \rho\} = 0$$

La densidad de probabilidad permite evaluar los valores esperados de los observables híbridos de la forma usual. También permite este cálculo en el caso de observables cuánticos o clásicos gracias a las distribuciones marginales o reducidas [40], explícitamente:

$$\rho_{CL}(x_k, p_k) = N \int_{S^{2N}(\sqrt{2})} \Pi_j(dX_j dP_j) \rho(x_k, p_k; X_i, P_i)$$

$$\rho_{QM}(X_i, P_i) = \int \Pi_l(dx_l dp_l) \rho(x_k, p_k; X_i, P_i)$$

que se obtienen tomando la traza parcial sobre uno u otro de los subespacios indicado en cada caso por las variables de las que depende el proyector  $\Pi$ . La convergencia de estas integrales se asegura por ser  $\rho$  semidefinida positiva y estar normalizada, con la suposición de que el subsistema clásico ocupa una región finita en el espacio de las fases, mientras que el subsistema cuántico esta confinado a la región que dicta la normalización del estado cuántico, la esfera  $2n$ -dimensional de radio  $\sqrt{2}$  mencionada con anterioridad.

Antes de introducir la dinámica de los sistemas híbridos que propone este formalismo, esto es, el acoplamiento entre un subsistema clásico con uno cuántico descrito por las expresiones que se han ido introduciendo a lo largo de esta sección, conviene fijar la atención en lo que ocurre en el espacio conjunto clásico-cuántico en ausencia de interacción. Este espacio sin interacción es el espacio producto cartesiano de los dos sectores, dentro del cual se sugiere la definición de un corchete de Poisson generalizado para dos observables híbridos  $A$  y  $B$  cualesquiera [38]:

$$\{A, B\}_\times = \{A, B\}_{CL} + \{A, B\}_{QM} = \sum_k \left( \frac{\partial A}{\partial x_k} \frac{\partial B}{\partial p_k} - \frac{\partial A}{\partial p_k} \frac{\partial B}{\partial x_k} \right) + \sum_i \left( \frac{\partial A}{\partial X_i} \frac{\partial B}{\partial P_i} - \frac{\partial A}{\partial P_i} \frac{\partial B}{\partial X_i} \right)$$

que es bilineal, antisimétrico y cumple la regla de Leibnitz de la derivación y la identidad de Jacobi.

Si ahora se supone que un observable pertenece al sector  $CL$  ( $QM$ ) y es constante con respecto a las coordenadas del sector  $QM$  ( $CL$ ), entonces, este corchete de Poisson tiene las siguientes propiedades:

- Se reduce a los corchetes de Poisson clásico y cuántico respectivamente si uno de los observables pertenece solo a uno de los sectores.
- Se reduce a los corchetes de Poisson clásico y cuántico respectivamente si los dos observables pertenecen solo a uno de los sectores.
- Refleja la separabilidad de los sectores clásico y cuántico si los dos observables pertenecen a sectores diferentes.

---

<sup>2</sup>Estrictamente  $\rho$  no es un observable, (por ejemplo:  $\dot{A} = \{A, \mathcal{H}\}$  pero  $\dot{\rho} = -\{\rho, \mathcal{H}\}$ ) pero sigue reglas similares por consistencia con  $\langle \hat{A} \rangle = \text{tr}(\rho \hat{A})$



El significado físico de la separabilidad de los sectores se puede enunciar como sigue [38]: "Si se realiza una transformación canónica solo en el sector  $QM$  ( $CL$ ), entonces todos los observables que pertenezcan al sector  $CL$  ( $QM$ ) no son afectados por la transformación". La densidad de probabilidad entonces factoriza en las densidades de cada sector, manteniendo esta forma durante la evolución, dado que el hamiltoniano es el responsable de la transformación evolución temporal y es un observable que cumple con los requisitos que se han tratado anteriormente. De forma explícita:

$$\rho(x_k, p_k; X_i, P_i) = \rho_{CL}(x_k, p_k; t) \rho_{QM}(X_i, P_i; t)$$

donde se puede observar que esta expresión permite la evolución independiente de los sectores en el tiempo cuando no interactúan.

### 3.1.3 Dinámica clásico-cuántica de Elze.

En el apartado anterior se ha tratado el sistema conjunto clásico-cuántico sin interacción. Para ello se ha empleado el uso del producto cartesiano de los espacios físicos de ambos sectores.

En este formalismo, de manera natural la dinámica híbrida (con o sin interacción) es descrita en la imagen de Heisenberg según:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \{A, \mathcal{H}\}_\times$$

que da lugar a la siguiente ecuación de evolución temporal para la densidad de probabilidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\{\rho, \mathcal{H}\}_\times$$

que es una particularización de la ecuación de Liouville, en los casos en los que la densidad  $\rho$  es constante en el tiempo.

Se ha visto que bajo las condiciones de no interacción, o lo que es lo mismo de separabilidad, la densidad de probabilidad del espacio conjunto factoriza y evoluciona de forma independiente para los dos sectores. La dinámica subyacente a este hecho queda recogida en un hamiltoniano de interacción separable que no cuenta con términos que acoplen los subsistemas entre sí. Esto es, el hamiltoniano es la suma de los hamiltonianos del sector clásico y cuántico por separado:

$$\mathcal{H}(x_k, p_k; X_i, P_i) = \mathcal{H}_{CL}(x_k, p_k) + \mathcal{H}_{QM}(X_i, P_i)$$

y da lugar

Sin embargo, una verdadera dinámica requiere de interacción entre ambos sectores. Por este motivo se han se incluir términos de interacción en el hamiltoniano del sistema conjunto. Elze en [38] propone:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{CL}(x_k, p_k) + \mathcal{H}_{QM}(X_i, P_i) + \mathcal{I}(x_k, p_k; X_i, P_i)$$

donde  $\mathcal{H}$  ha de servir de generador de la evolución temporal. Para que este hamiltoniano sea considerado un observable, es necesario que el nuevo término de interacción introducido cumpla con las condiciones de observable. Esto va a llevar a que  $\mathcal{H}$  deba cumplir nuevas propiedades.



- Conservación de la energía. Con la estructura general que se ha propuesto para el corchete de Poisson, se tiene que la variación del hamiltoniano se corresponde con:

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \{\mathcal{H}, \mathcal{H}\}_\times = 0$$

Esta consecuencia es inmediata de la antisimetría del corchete de Poisson. Cabe señalar que en ausencia de parte clásica, la ecuación lleva a la conservación del valor esperado del operador hamiltoniano mecánico cuántico, como es de esperar.

- Obtención de las relaciones de Ehrenfest generalizadas. Garantizar la existencia de estas relaciones permite que se cumpla el límite de correspondencia. A este requisito se le llama el *test de Peres-Terno* [19]. Las relaciones de Erhrenfest cuánticas se obtienen según [41]:

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{p}|\Psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|[\hat{p}, \hat{H}]|\Psi\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{x}|\Psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|[\hat{x}, \hat{H}]|\Psi\rangle$$

donde  $\hat{x}$  es el operador posición,  $\hat{p}$  es el operador momento y  $\hat{H}$  es el operador hamiltoniano.

En este formalismo, no existen operadores sino funciones reales en el espacio de las fases definidas por el valor esperado en cierto estado de los operadores correspondientes. Concretamente para los operadores posición y momento se tiene:

$$X(X_i, P_i) = \langle\Psi|\hat{x}|\Psi\rangle \quad P(X_i, P_i) = \langle\Psi|\hat{p}|\Psi\rangle$$

Ya se ha mostrado que el valor medio del conmutador entre operadores es un corchete de Poisson con respecto a  $(X, P)$ . Sustituyendo estas expresiones en las relaciones cuánticas de Erhrenfest se tienen las relaciones de Erhrenfest en este formalismo:

$$\dot{X} = \{X, \mathcal{H}\}_\times = \{X, \mathcal{H}\}_{QM} = -i\langle\Psi|[\hat{x}, \hat{H}_{QM} + \hat{I}]|\Psi\rangle = P - i\langle\Psi|[\hat{x}, \hat{I}(x_k, p_k; X_i, P_i)]|\Psi\rangle$$

$$\dot{P} = \{P, \mathcal{H}\}_\times = \{P, \mathcal{H}\}_{QM} = -i\langle\Psi|[\hat{p}, \hat{H}_{QM} + \hat{I}]|\Psi\rangle = -\langle\Psi|V'(\hat{x})|\Psi\rangle - i\langle\Psi|[\hat{p}, \hat{I}(x_k, p_k; X_i, P_i)]|\Psi\rangle$$

donde  $V'$  denota la derivada del potencial. Estas relaciones no forma un conjunto cerrado de ecuaciones, por lo que no permiten calcular la evolución [38].

- Ecuaciones de Hamilton del formalismo. Finalmente las ecuaciones de Hamilton en este formalismo se escriben como:

- Para las variables clásicas:

$$\dot{x}_k = \{x_k, \mathcal{H}_\pm\}_\times = p_k + \frac{\partial}{\partial p_k}\mathcal{I}(x_k, p_k, X_i, P_i)$$

$$\dot{p}_k = \{p_k, \mathcal{H}_\Sigma\}_\times = -\frac{\partial}{\partial t}v(x_l) - \frac{\partial}{\partial x_k}\mathcal{I}(x_k, p_k, X_i, P_i)$$

- Para las variables cuánticas, que no son observables:

$$\dot{X}_i = \{X_i, \mathcal{H}_\Sigma\}_\times = E_i P_i + \frac{\partial}{\partial P_i}\mathcal{I}(x_k, p_k, X_i, P_i)$$

$$\dot{P}_i = \{P_i, \mathcal{H}_\Sigma\}_\times = E_i X_i + \frac{\partial}{\partial X_i}\mathcal{I}(x_k, p_k, X_i, P_i)$$

### 3.2 Críticas al formalismo.

Se puede observar tanto en las ecuaciones de evolución como en la definición de los observables que se hace en este formalismo que estamos ante un enfoque basado en el campo medio. El campo medio ha sido tratado ampliamente, tanto como método aproximado para un sistema cuántico completo [42, 43], como para desarrollar un modelo teórico consistente. Este enfoque, a pesar de ser un formalismo elegante y estar muy extendido en muchos campos [44], también presenta muchos problemas y limitaciones [37, 45, 46]. En concreto, la primera crítica que se puede hacer al formalismo de esta sección es que no hay novedad introducida por Elze [47, 48], sino que se han reformulado las ya conocidas ecuaciones de campo medio. En esencia, este tipo de acoplamiento semiclásico consiste en acoplar las variables clásicas con el valor esperado del hamiltoniano cuántico, donde la evolución recae sobre este valor medio y no sobre el operador cuántico [41, 17]:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial}{\partial k_i} \langle H(x, k) \rangle_\psi \quad \frac{dk_i}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \langle H(x, k) \rangle_\psi$$

Para visualizar el origen de esta estructura de campo medio en el formalismo de Elze, se pueden escribir las ecuaciones que definen una transformación unitaria y reexpresarlas en las variables  $(X_i, P_i)$  de Heslot [34]. Una transformación unitaria  $\hat{U}$  puede ser generada por un operador autoadjunto como se puede observar en su forma infinitesimal:

$$\hat{U} = 1 - i\hat{G}\delta\alpha$$

donde  $\hat{G}$  es el operador autoadjunto y  $\delta\alpha$  es la variación infinitesimal en torno a la variable canónica  $\alpha$ . Ahora bien, si se quiere expresar una transformación unitaria sobre las variables  $(X_i, P_i)$  de Elze, se ha de escribir:

$$X_i \longrightarrow X'_i = X_i + \frac{\partial \langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle}{\partial P_i} \delta\alpha$$

$$P \longrightarrow P'_i = X_i - \frac{\partial \langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle}{\partial X_i} \delta\alpha$$

Estas expresiones presentan esta forma por el deseo de expresar la mecánica cuántica en términos de la mecánica clásica analítica, donde los observables y las variables son funciones reales en el espacio de las fases, en contraposición a los operadores sobre espacios de Hilbert cuánticos. Es de la comparación entre estas ecuaciones y las ecuaciones que definen una transformación canónica en mecánica clásica, a saber [34]:

$$x_k \longrightarrow x'_k = x_k + \frac{\partial g}{\partial p_k} \delta\alpha$$

$$p_k \longrightarrow p'_k = p_k - \frac{\partial g}{\partial x_k} \delta\alpha$$

de donde Elze extrae su definición para los observables. Aquí  $g$  es el observable clásico que genera la transformación canónica sobre un sistema tratado clásicamente.

Un ejemplo muy conocido de ecuaciones de campo medio son las ecuaciones semiclásicas de Einstein [49]:

$$G_{\mu\nu} = 8\pi G \langle T_{\mu\nu} \rangle$$

donde  $G$  es el campo clásico de la gravedad y  $T$  es el tensor energía-momento del campo cuántico de materia.

El principal problema que se detecta en el formalismo de campo medio es que no tiene en cuenta las fluctuaciones cuánticas sobre el sector clásico [9, 37, 46], entendiendo por fluctuaciones cuánticas la probabilidad que predice la teoría cuántica de encontrar a un sistema en diferentes estados en un tiempo  $t$ . En otras palabras, el sistema clásico no se acopla a las fluctuaciones cuánticas, como cabría esperar si se hiciera un tratamiento cuántico completo, donde los dos sectores se rigen por las leyes de la mecánica cuántica. En [9, 46] se demuestra este inconveniente y se comentan algunas de sus consecuencias en las ecuaciones semiclásicas de Einstein. Si la métrica clásica no hereda las fluctuaciones cuánticas de la materia cuántica, el campo medio no puede explicar la inflación cósmica o la formación de galaxias. También se ha observado en [45], que la gravedad semiclásica permite que se transmitan señales a velocidad mayor que la de la luz.

Salcedo y colaboradores también critican dos aspectos de este formalismo en [17] y [18]. El paréntesis de Lie al que llega Elze, el corchete de Poisson antes introducido, cumple que es una derivación (ver teoremas non-go en la sección del enfoque de Salcedo), pero no es un observable, esto es, no es el valor esperado de ningún operador. Como consecuencia, no se cierra el álgebra de Lie de los observables en este formalismo.

La explicación se encuentra en que los observables son definidos por valores esperados de los operadores, siendo éstos bilineales en  $\psi$  y  $\psi^*$ . El álgebra de este tipo de observables incluye todas las funciones del tipo  $F(x, k, X, P)$  que cumplan la condición de invarianza de fase en el sector cuántico. Esta restricción permite que funciones arbitrarias de  $\psi$  y  $\psi^*$  sean tomadas como observables, incrementado el número de nuevos observables que no existen en mecánica cuántica. Por ejemplo, la derivada temporal de un observable, no es un observable estándar, puesto que se convierte en una función cuántica (en lugar de una cuadrática) de la función de onda y su conjugada.

Como consecuencia de esta pérdida de la linealidad que existe en mecánica cuántica, el formalismo de campo medio no es estadísticamente consistente, como también se señala en [17].

## 4 Formalismo de Hall-Reginatto.

El formalismo propuesto por Hall y Reginatto recibe el nombre de "*statistical ensemble in the configuration space*" (SECS) y se basa en aplicar la teoría de colectividades canónica en el espacio de configuración, donde se mezclan las dinámicas de las colectividades clásica y cuántica. En palabras de sus autores [35, 36], este formalismo consigue superar los dos requisitos mínimos que se imponen a un formalismo clásico-cuántico consistente, a saber:

- Debe definirse un paréntesis de Lie en el conjunto de observables del sistema.
- EL paréntesis de Lie debe reducirse a su versión clásica (corchete de Poisson) para dos observables clásicos y a su versión cuántica (el conmutador) para dos observables cuánticos.

Estos requisitos son el resultado de aplicar una serie de axiomas que se espera que satisfaga toda dinámica híbrida por el hecho de que se cumplen de forma independiente en las dinámicas clásica y cuántica por separado [50].

Por otro lado, la motivación de mezclar colectividades de las distintas mecánicas, se encuentra en el hecho de que la mecánica estadística clásica y la mecánica cuántica se pueden ver en forma de mecánica de fluidos empleando una densidad y un campo de velocidades irrotacional como variables canónicas. Se trata de un enfoque no lineal y complejo, por lo que otros autores han tratado de sintetizar los puntos clave para su mejor comprensión [17, 20].

#### 4.1 Desarrollo teórico.

El formalismo SECS es descrito por dos funciones reales,  $P(x, q)$  y  $S(x, q)$ , definidas en el espacio de configuración, donde  $x$  se corresponde con las coordenadas clásicas y  $q$  con las cuánticas.  $P(x, q)$  representa la densidad de probabilidad del estado  $(x, q)$  y por lo tanto es no negativa y está normalizada.

En el caso en el que sólo se tiene un sector clásico, la densidad de probabilidad en el espacio de las fases se puede escribir en función de  $P(x)$  y  $S(x)$  como:

$$\rho(x, k) = P(x)\delta(k - \nabla S(x)) \quad (4.1)$$

donde  $\delta(x)$  es la delta de Dirac. Las ecuaciones de Hamilton para  $(x, k)$  proporcionan las ecuaciones de evolución para  $P$  y  $S$  que para una partícula de masa  $M$  en presencia de un potencial toman la forma:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{1}{M}\nabla(P\nabla S) \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{2M}(\nabla S)^2 - V$$

que se corresponden con la ecuación de continuidad y la ecuación de Hamilton-Jacobi respectivamente [21]. El corchete de Poisson del que se pueden derivar estas ecuaciones es:

$$\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\} = \int dx \left( \frac{\delta \mathcal{A}}{\delta P(x)} \frac{\delta \mathcal{B}}{\delta S(x)} - \frac{\delta \mathcal{A}}{\delta S(x)} \frac{\delta \mathcal{B}}{\delta P(x)} \right)$$

y por lo tanto  $d\mathcal{A}/dt = \{\mathcal{A}, \mathcal{H}\}$  siendo el hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \int dx P \left( \frac{1}{2M}(\nabla S)^2 - V \right)$$

Si por el contrario, sólo se tiene sector cuántico, la función de onda de un estado puro viene representada en términos de  $P(q)$  y  $S(q)$  según:

$$\Psi(q) = P(q)^{1/2} e^{iS(q)/\hbar} \quad (4.2)$$

Equivalentemente, para una partícula de masa  $m$  en presencia de un potencial  $V$ , la ecuación de Schrödinger evoluciona a  $P$  y a  $S$  tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= -\frac{1}{m}\nabla(P\nabla S), \\ \frac{\partial S}{\partial t} &= -\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 P^{1/2}}{P^{1/2}} - V. \end{aligned}$$

El paréntesis dinámico que da lugar a estas ecuaciones es formalmente idéntico al anterior sustituyendo  $x$  por  $q$ , mientras que el hamiltoniano en este caso es:

$$\mathcal{H} = \int dq P \left( \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + \frac{\hbar^2}{8m} (\nabla \log P)^2 + V \right)$$

donde se observa que la diferencia entre las dinámicas clásica y cuántica se encuentra en el término no lineal con dependencia explícita en  $\hbar$ .

El principio guía de este formalismo es que los nuevos grados de libertad se añaden del mismo modo que se hace en las descripciones puramente clásica o puramente cuántica. Esto significa que se han de añadir las coordenadas de los nuevos grados de libertad a las funciones  $P$  y  $S$ . Por lo tanto se pueden generalizar las expresiones anteriores al caso híbrido escribiendo  $P(x, q)$  y  $S(x, q)$ . El paréntesis dinámico es:

$$\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\} = \int dx dq \left( \frac{\delta \mathcal{A}}{\delta P(x, q)} \frac{\delta \mathcal{B}}{\delta S(x, q)} - \frac{\delta \mathcal{A}}{\delta S(x, q)} \frac{\delta \mathcal{B}}{\delta P(x, q)} \right)$$

y entonces para partículas clásicas y cuánticas en interacción con un potencial  $V(x, q, t)$  el hamiltoniano es:

$$\mathcal{H} = \int dx dq P \left( \frac{1}{2M} (\nabla S)^2 + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 \frac{\hbar^2}{8m} (\nabla \log P)^2 + V \right)$$

que produce las siguientes ecuaciones de evolución:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{1}{M} \nabla_x (P \nabla_x S) - \frac{1}{M} \nabla_q (P \nabla_q S)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{2M} (\nabla_x S)^2 - \frac{1}{2m} (\nabla_q S)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 P^{1/2}}{P^{1/2}} - V$$

En este formalismo los observables, vienen representados por sus valores esperados como funcionales de  $P$  y  $S$ . De esta manera, un observable clásico  $f(x, k)$  es de la forma:

$$\mathcal{F} = \int dx dq P f(x, \nabla_x S)$$

mientras que un observable cuántico  $\hat{A}$  es representado por:

$$\mathcal{A} = \int dx \langle \Psi(x) | \hat{A} | \Psi(x) \rangle$$

donde  $\Psi(x, q) = \langle q | \Psi(x) \rangle = P(x, q)^{1/2} e^{iS(x, q)/\hbar}$ .

## 4.2 Inconsistencias del formalismo.

Se ha comentado que este formalismo cumple los requisitos introducidos por [50]. Sin embargo, también presenta limitaciones y problemas que son recogidos en [17]. Cabe mencionar, que el teorema no-go que veremos en la Sec. 6.2 no se aplica a este formalismo por dos motivos. El primero es que no se define el producto entre dos observables (el espacio de observables híbridos no es de tipo  $\mathcal{A}_c \otimes \mathcal{A}_q$ ) y el segundo es que el paréntesis dinámico entre observables de distintos sectores no se anula en general. Aún así, estos mismos

motivos desencadenan otro tipo de problemas, compartidos también por el formalismo de Elze.

En primer lugar, existe un problema con la definición de cuáles de los funcionales de  $(P, S)$  son válidos como observables. En [36] se establecen algunas de las condiciones que deben cumplir estos observables para asegurar la positividad de  $P$  y la invarianza global de fase de la función de onda. A pesar de ello, el conjunto de funcionales candidatos a ser observables es enorme, mientras que en los casos puramente cuánticos y puramente clásicos el número de observables que se añaden cuando crece el número de grados de libertad es limitado. Además, los observables del sistema híbrido conjunto se construyen con el producto tensorial de los observables de los subsectores, y sin embargo, el producto de un observable cuántico y uno clásico no está definido en el enfoque SECS. Este inconveniente puede subsanarse, pero no es suficiente pues en [36] no se incluye la condición (necesaria) de que el conjunto de los observables híbridos se cierre bajo la aplicación del paréntesis de Lie [17].

Se encuentra otro problema cuando el paréntesis de Lie de un observable puramente cuántico y otro puramente clásico no se anula. Esto significa que los observables clásicos no conmutan con los observables cuánticos e implica que un hamiltoniano clásico induce una evolución en los grados de libertad cuánticos, y viceversa, incluso cuando los dos sectores se encuentran desacoplados. Es cierto, que en el caso separable en el que los dos sectores *nunca* interactúan, no aparece este problema. Sin embargo, si la interacción se activa en cierto instante de tiempo, los sectores nunca más podrán ser separables, quedando entrelazados. Sin embargo, este tipo de propiedades exóticas ha sido destacado por Barceló y colaboradores en [20] como posible fenómeno emergente de interés potencialmente extraordinario.

En el formalismo SECS, el hamiltoniano no es invariante bajo rotaciones, en presencia de espín, esto es:

$$\{\vec{J}, \mathcal{H}\} \neq 0$$

como se muestra en [17] por lo que el momento angular  $\vec{J}$  no se conserva, en concreto el espín. Esto supone un inconveniente cuando se quieran implementar las simetrías internas del sector cuántico y para la descripción de partículas relativistas con espín.

La raíz de los problemas anteriores se encuentra en que representación elegida (que se reduce a (4.1) para el sector clásico y a (4.2) para el sector cuántico) no permite realizar transformaciones canónicas de forma natural. Las transformaciones canónicas, entre las que se encuentra la evolución dinámica, se corresponden con cambios de base en el sistema cuántico y cambios de coordenadas en el sistema clásico. Éstos dos tipos de transformaciones canónicas no son compatibles porque a cada sector le corresponde un distinto valor de  $\hbar$ , siendo esto una muestra de una mala hibridación (Sec. 6.1).

Ahora bien, el principal problema que presenta este formalismo clásico-cuántico es el de la consistencia estadística. Como se mencionó en la Sec. 3.2, los formalismos híbridos no lineales son susceptibles de padecer este problema. En mecánica cuántica, los estados mezcla vienen representados únicamente por su matriz densidad  $\rho$ . Esta matriz puede tener distintas descomposiciones en estados puros. Sin embargo, la descomposición de la matriz no es relevante sino que la información sobre el sistema se encuentra en la mezcla estadística  $\rho$ . El problema se presenta cuando la descomposición de este estado mezcla cobra relevancia en la dinámica cuando distintas descomposiciones dan lugar a distintas evoluciones. Si esto fuera cierto, podría saberse la "verdadera" polarización de un haz

de electrones no polarizado. En el SECS el problema se encuentra no solo en esta versión cuántica sino también en su versión clásica como demuestra el ejemplo analizado en [17].

## 5 Formalismo de Koopman-Sudarshan.

Estos formalismos consiguen expresar la mecánica clásica en el lenguaje de operadores y funciones de onda de la mecánica cuántica, de forma que se describen los estados clásicos y cuánticos en un escenario matemático común, el espacio de Hilbert producto  $H = H_c \otimes H_q$ . Un aspecto interesante al que se aplica este tipo de formalismo semiclásico es al de la medida de un sistema cuántico.

En el postulado cuántico de la medida de la interpretación de Copenhage se introduce el acoplamiento entre el aparato de medida descrito por la mecánica clásica y el sistema cuántico a medir. La necesidad de introducir la terminología clásica antes mencionada fue propuesta por Bohr, aunque él nunca consideró el proceso de medida como una interacción clásico-cuántica [6]. Sin embargo, como la materia que forma los aparatos de medida es la misma que la que forma los sistemas cuánticos medibles, estos deben obedecer las mismas leyes, por lo que es razonable pensar que en el proceso de medida exista un comportamiento cuántico.

En esta línea, von Neumann representó los aparatos de medida como un grado de libertad que se acopla al sistema cuántico y cuya descripción es puramente cuántica. Después, se introduce un segundo grado de libertad que observa al primero, de forma que se repite este proceso las veces necesarias hasta que la medida permita obtener un estado puro que pueda ser estudiado clásicamente.

Para representar matemáticamente este proceso de medida se hace uso de los llamados “positive operator-valued measurement” (POVM) [51], que son los operadores que representan a las medidas generalizadas. Estas medidas no son necesariamente proyectivas, es decir, los operadores que las representan no son ortogonales entre sí. De hecho, las medidas proyectivas (las que se introdujeron primeramente dentro de la teoría cuántica) son un caso particular de las medidas generalizadas, a las que se le ha requerido que sean ortogonales. Las medidas generalizadas se definen como el conjunto de operadores hermíticos y no negativos  $\{E_\mu\}$  que verifican la relación de completitud  $\sum_\mu E_\mu = 1$ , donde el subíndice se corresponde con los posibles resultados que se pueden obtener de medir el observable  $M$ . Estos operadores que conforman las medidas POVM pueden a su vez ser escritos en términos de las matrices de Kraus [52] como:

$$E_\mu = M_\mu^\dagger M_\mu$$

Ahora bien, aunque los formalismos de Koopman y Sudarshan se desarrollan con el mismo propósito, presentan algunas diferencias entre ellos. Sudarshan, quizás por su época, visualiza la traducción de la mecánica clásica al formalismo cuántico por medio de reglas de superselección [5], estas reglas prohíben ciertas combinaciones coherentes entre estados con el fin de no comprometer la consistencia del formalismo. De esta manera, cada punto en el espacio de las fases forma un sector de superselección, que es distinguible del resto, como se espera de la teoría clásica. Terno en cambio, en [6], desarrolla el formalismo de Koopman sin necesidad de estas reglas superselección, sino que hace uso de los POVM para ello.



Por otro lado, en ambos casos, se encuentra la presencia de magnitudes no observables, en las cuales reside la clave para encontrar la no consistencia de este tipo de modelo semiclásico.

El formalismo de Koopman para la mecánica clásica ilustra los requisitos necesarios para obtener una descripción del proceso de medida, a la vez que muestra la imposibilidad de desarrollar para el mismo un formalismo clásico-cuántico consistente.

### 5.1 Desarrollo teórico.

Aunque ambos formalismos tienen el mismo objetivo, por simplicidad aquí seguiremos el desarrollo del formalismo de Koopman de Terno en [6]. Se considera un solo grado de libertad al que se le asignan las variables canónicas  $x$  y  $k$ , posición y momento conjugado respectivamente (se reserva  $p$  para el momento cuántico). La ecuación de Liouville es la ecuación que evoluciona las densidades de probabilidad clásicas y se puede escribir como:

$$i\frac{\partial f}{\partial t} = Lf,$$

donde  $L$  es el operador de Liouville definido por:

$$L = \left( \frac{\partial H}{\partial k} \right) \left( -i \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left( \frac{\partial H}{\partial x} \right) \left( -i \frac{\partial}{\partial k} \right)$$

y  $f$  es la densidad (clásica, siempre positiva) en el espacio de las fases que representa a este grado de libertad. Se introduce la función de onda clásica de forma análoga a la que se tiene en mecánica cuántica como:

$$\psi_c = \sqrt{f}$$

Esta función de onda clásica satisface igualmente la ecuación de Liouville, de forma que se considera como la entidad fundamental del formalismo a pesar de que solo  $f$  tiene fundamento físico (como sucede en mecánica cuántica con la función de onda y la densidad de probabilidad definida por  $\rho = |\Psi|^2$ ).

Se puede probar que bajo ciertas restricciones al hamiltoniano, el operador de Liouville genera una evolución unitaria, esto es, que la norma de los estados se conserva durante la evolución, así como el producto escalar entre estados, de forma que se garantiza que no se altera la probabilidad de los estados cuando son afectados por una transformación de este tipo. De hecho es posible asemejar aún más el tratamiento a una descripción cuántica introduciendo los operadores  $\hat{x}$  y  $\hat{k}$ , que conmutan entre sí y se definen como:

$$\hat{x}\psi_c = x\psi_c(x, k, t) \quad \hat{k}\psi_c = k\psi_c(x, k, t)$$

Las cantidades no observables mencionadas anteriormente son los momentos conjugados de las variables  $\hat{x}$  y  $\hat{k}$ , definidos por:

$$\hat{p}_x = -i\partial/\partial x \quad \hat{p}_k = -i\partial/\partial k$$

y se corresponden con el operador de translación en el espacio de momentos y el operador de boost respectivamente.



En cuanto a la evolución de los estados se pueden presentar las imágenes de Schrödinger (donde los operadores son constantes y la evolución temporal repercute en las funciones de onda) y de Heisenberg (donde sucede al contrario, recayendo la evolución temporal sobre los operadores):

$$\psi(t) = U(t)\psi(0) \quad \text{Schrödinger}$$

$$X_H(t) = U^\dagger X U \quad \text{Heisenberg}$$

Entre estas dos opciones de evolución es más interesante la de Heisenberg, pues aunando la ecuación de Heisenberg con el operador de Liouville se pueden recuperar las ecuaciones de Hamilton del sistema:

$$i \frac{dX_H}{dt} = [X_H, L_H] = U^\dagger [X, L] U \quad (5.1)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial k}, \quad \frac{dk}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (5.2)$$

### 5.1.1 Aparatos de medida en el formalismo de Koopman.

Considérese una medida en la que se puede obtener un número finito de resultados. En particular si se registra un valor  $\mu$  se tiene que :

$$\rho(\mu) = \frac{1}{\text{tr}(\rho E_\mu)} \sum_i A_{\mu i} \rho A_{\mu i}^\dagger$$

y la probabilidad asociada a encontrar ese valor se calcula como el valor esperado:

$$p(\mu|\rho) = \text{tr}(\rho E_\mu)$$

donde  $A_{\mu i}$  son matrices de Kraus y  $E_\mu$  es un POVM.

Para aceptar un paradigma semiclásico de la medida, es necesario que esta dinámica dé lugar a la expresión anterior para la probabilidad y la evolución. Además, se sabe que la decoherencia cobra un papel muy importante en los procesos de medida y debe ser incluida en el Hamiltoniano de interacción aparato-sistema.

Siguiendo en la línea de reproducir una dinámica clásica matemáticamente similar a la cuántica, se pueden describir las medidas clásicas con los proyectores  $\Pi_\mu$ . Como la densidad de Liouville puede escribirse formalmente como un estado puro, estos proyectores se pueden expresar como:

$$\Pi_\mu = |\psi_{c\mu}\rangle\langle\psi_{c\mu}|$$

donde  $\langle\psi_{c\mu}|\psi_{c\nu}\rangle = 0$  para  $\mu \neq \nu$  de forma que se cumple:

$$\sum_\mu \Pi_\mu = \mathbf{1}$$

Para obtener el formalismo semiclásico de la media se hace ahora una división del Universo en sistema, aparato de medida y entorno. El sistema se rige por la mecánica cuántica, el aparato de medida por la mecánica clásica y el entorno por cualquiera de las

dos. Este último hecho no es relevante porque se va a tomar la operación de traza sobre los grados de libertad del entorno, de forma que se va a perder la información que se tenga de estos grados de libertad. En el caso de los sistemas clásicos se usa el formalismo de Koopman.

El estado inicial según las subdivisiones que se han hecho del Universo es:

$$\rho_U = \rho_q \otimes \rho_c \otimes \alpha$$

donde  $\alpha$  es el estado inicial del entorno. La evolución global es unitaria y se pueden entrelazar de forma reversible cualquiera de las partes. La irreversibilidad se introduce cuando se realiza la operación de traza parcial sobre el entorno, de forma que la base queda fijada y el estado queda transformado según:

$$\rho_{q|\mu} = \frac{1}{p(\mu|\rho)} (\mathbf{1}_q \otimes \Pi_\mu) \text{tr}_\alpha \left[ U (\rho_q \otimes \rho_c \otimes \alpha) U^\dagger \right] (\mathbf{1}_q \otimes \Pi_\mu)$$

Ahora el proceso puede verse como sigue. Obviando el entorno (puesto que al final se toma la traza parcial sobre él) el estado inicial será:

$$|\Psi^0\rangle = |\psi_q^0\rangle \otimes |\psi_c^0\rangle$$

Y después de la evolución unitaria el estado será:

$$|\Psi^1\rangle = \sum_\mu |\psi_{q\mu}^1\rangle \otimes |\psi_{c\mu}^1\rangle.$$

donde  $\sum_\mu |\alpha|^2 = 1$  y las densidades clásicas de Liouville  $f_\mu = |\psi_{c\mu}^1(x, k)|^2$  son distinguibles, es decir son ortogonales en el sentido cuántico:  $\langle \psi_{c\mu} | \psi_{c\nu} \rangle = 0$  si  $\mu \neq \nu$ . Esta propiedad se ha de mantener para hablar de estados clásicos. Entonces si el valor obtenido es  $\mu$ , la función de onda “colapsa” en  $\psi_{c\mu}^1$ . En la práctica, preparar un escenario como este depende de la posibilidad de producir una transformación unitaria responsable de la interacción clásico-cuántica.

## 5.2 Inconsistencias del formalismo.

El formalismo de Koopman proporciona dos requisitos necesarios para una teoría semiclásica. El primero de ellos es, que en ausencia de interacción las partes clásica y cuántica se separan y evolucionan obedeciendo las reglas propias de sus respectivas mecánicas. El segundo, es que los valores esperados de los operadores cuánticos positivos y de las densidades de probabilidad clásicas se mantienen positivos durante la evolución.

Presumiendo que este tipo de interacción viene dada por un operador unitario cuyo generador es  $K_i$  se tiene que los operadores cuánticos y clásicos conmutan entre sí [19]. Este hecho es garantizado por la evolución unitaria, que mantiene las relaciones de conmutación en el tiempo. Si uno se centra en el generador  $K_i$ , uno podría empezar sugiriendo que éste solo contiene cantidades observables como son  $e, x, k, q$  y  $p$ . De esta forma, la conmutatividad clásica permite separar los grados de libertad clásicos de los cuánticos:

$$[x, K_i] = [k, K_i] = 0.$$

Sin embargo, los términos de interacción más generales, donde los grados de libertad cuánticos afectan a los clásicos, son de la forma  $K_i = K_i(p_x, p_k, x, k, q, p)$  y contienen

términos como  $qp_x$ ,  $pp_k$  y similares. De esta manera, las ecuaciones para  $q$  y  $p$  presentan dependencia con las cantidades no observables  $p_x$  y  $p_k$  y no se corresponden con las ecuaciones de evolución clásica y cuántica. Esto supone que el formalismo de Koopman (y el de Sudarshan) no satisfacen el principio de correspondencia.

Sin embargo, un  $K_i$  en el que solo se encuentren observables no puede reproducir los términos de interacción clásico-cuánticos. Se incluye en [19] un ejemplo con osciladores bilinealmente acoplados en el que la introducción del término  $cqp_k$  resulta en un flujo de energía infinito desde el sector clásico al cuántico.

La discusión sobre la inconsistencia de este formalismo puede sintetizarse como sigue [6]: “Para tener una dinámica clásico-cuántica no trivial es necesaria la presencia de operadores clásicos no observables en el término de interacción del hamiltoniano, pero esta presencia lleva a la violación del principio de correspondencia y puede incluso derivar en la no conservación de la energía”.

En cuanto al problema de la medida, es imposible mantener que un aparato puede ser descrito mediante la mecánica clásica durante la interacción en este formalismo. La misma conclusión fue obtenida por Dewitt [53].

## 6 Formalismo de Caro-Gil-Salcedo.

El enfoque que se sigue en [9, 18, 16] trata de encontrar un formalismo que describa los sistemas híbridos clásico-cuánticos con una consistencia interna como la que presentan las dinámicas clásica y cuántica de forma independiente. Hay que notar que en estos trabajos, el mensaje que subyace al estudio de estos sistemas híbridos clásico-cuánticos es que los sistemas que se encuentran en la naturaleza son cuánticos y los sistemas híbridos son una aproximación más o menos válida a ellos. En el intento de construir un formalismo con estas características se llega a diversas muestras de inconsistencia cuando se les imponen ciertas restricciones de tipo físico que se cumplen tanto en la mecánica cuántica como en la mecánica clásica por separado. En concreto, se presta especial atención a la estructura algebraica de estos sistemas y las consecuencias dinámicas que desencadena la existencia o no de estructura canónica.

### 6.1 Impedimentos a la formulación de sistemas híbridos clásico-cuánticos.

En [9] se demuestra que bajo ciertas suposiciones sobre el sistema híbrido recogidas en tres axiomas, que los grados de libertad clásicos acoplados a los grados de libertad cuánticos no heredan las fluctuaciones cuánticas propias de estos últimos (este resultado es distinto al que se obtiene en [46] donde solo se demuestra para el caso del formalismo de campo medio).

Estos axiomas se recogen a continuación:

1. Los observables se construyen (en sentido algebraico) con las coordenadas  $q_i$ , sus momentos conjugados  $p_i$  y la identidad  $E$ . En mecánica clásica este conjunto lo forman las funciones complejas en el espacio de las fases y en mecánica cuántica el conjunto es el álgebra de operadores en el espacio de Hilbert del sistema.
2. La estructura algebraica de los observables es preservada en la evolución temporal (imagen de Heisenberg (5.1)). Dicho de otro modo, la evolución temporal es una

biyección que preserva las combinaciones lineales y el producto de observables. Si dos observables  $A(t_0)$  y  $B(t_0)$  evolucionan respectivamente a  $A(t)$  y a  $B(t)$  entonces  $aA(t_0) + bB(t_0)$  evoluciona a  $aA(t) + bB(t)$  y  $A(t_0)B(t_0)$  evoluciona a  $A(t)B(t)$ . Estas propiedades, que cumplen de forma independiente tanto los sistemas clásicos como los cuánticos, permiten que las relaciones de conmutación se mantengan durante la evolución.

3. Las relaciones de conmutación, que satisfacen las variables clásicas y cuánticas entre sí, deben cumplirse también en los sistemas híbridos. A saber, las variables clásicas son conmutativas y su evolución es descrita por las ecuaciones de Hamilton mientras que las variables cuánticas satisfacen las relaciones de conmutación canónicas y la ecuación de evolución de Heisenberg:

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0, \quad [q_i, p_j] = i\lambda_i \delta_{ij} E$$

donde  $\lambda_i$  es cero si el índice  $i$  se corresponde con un grado de libertad clásico y es la unidad (o  $\hbar$ ) si se corresponde con uno cuántico. La justificación de este axioma viene motivada por el hecho de que las relaciones de conmutación son independientes de la interacción elegida y por tanto se espera que al igual que se cumplen en los sistemas clásicos y cuánticos por separado se cumplan en los sistemas híbridos. Se presenta otra justificación por medio de un caso en el que se quieren acoplar un sistema cuántico y uno clásico inicialmente sin interacción, cumpliendo las relaciones anteriores. Entonces si para cierto instante se activa la interacción, gracias a que las relaciones de conmutación se conservan en el tiempo, se espera que también lo hagan cuando los dos subsistemas estén acoplados.

Invocando la tercera condición se puede justificar la imposición de la segunda para evitar la pérdida de la localidad temporal. Se plantea el caso de que se tienen los sectores desacoplados solo en un intervalo temporal  $t_1 < t < t_2$ . Si no se cumple que la estructura algebraica es conservada durante la evolución temporal, no se cumplen las relaciones de conmutación, pudiendo llegar a no cumplirse incluso cuando los sistemas ya no están acoplados. Como consecuencia de esto, dos observadores situados antes y después de que tenga lugar el acoplamiento podrían llegar a observar que las variables clásicas no conmutan debido a un acoplamiento que tuvo lugar en cierto instante remoto [9].

El resultado al que se llega después de imponer estos axiomas es que las variables clásicas no pueden heredar las fluctuaciones cuánticas. Si se considera un sistema con dos grados de libertad, uno cuántico con variables  $(q, p)$  y otro clásico con variables  $(x, k)$ , entonces  $G = \{E, x, k, q, p\}$  es un conjunto de generadores del sistema. Como  $x$  conmuta con todos los generadores, conmuta también con el resto de observables contruidos con los elementos de  $G$  (axioma 1), y en particular conmuta con  $q$  y  $p$ . Lo mismo sucede con  $k$ . Formalmente cualquier observable queda determinado por los coeficientes  $A_{abcd}$  según:

$$A = \sum_{abcd} A_{abcd} x^a k^b q^c p^d E$$

La consecuencia inmediata, debido a las relaciones de conmutación cuánticas, es que un observable que conmute con  $q$  no puede contener a  $p$  y viceversa. Es el caso de las magnitudes clásicas, que serán de la forma  $\sum_{ab} A_{ab} x^a k^b E$ . Por el axioma 2, esta forma se mantendrá para todo instante de tiempo, siguiendo trayectorias bien definidas durante la

evolución, esto es, sin fluctuaciones. Las magnitudes cuánticas sí pueden depender de las clásicas que juegan el papel de fuentes externas.

Ahora bien, si se refuerzan los axiomas dotando al sistema híbrido de una estructura canónica, se llega a que solamente se puede encontrar sistemas clásicos o cuánticos de forma consistente. Esta estructura canónica se introduce con otros tres postulados:

- Existe un paréntesis de Lie que ha de ser bilineal, antisimétrico y ha de cumplir la identidad de Jacobi. El paréntesis de Lie genera las transformaciones canónicas infinitesimales según  $\delta_A B = (A, B)$  para dos observables  $A$  y  $B$  cualesquiera. Particularmente, la evolución temporal es una transformación canónica (imagen de Heisenberg):

$$\frac{dA}{dt} = (A(t), H(t))$$

donde el hamiltoniano del sistema  $H$  es un observable.

- Las transformaciones canónicas (y no solo la evolución temporal como se ha requerido en los axiomas anteriores) preservan la estructura algebraica. Esto es equivalente a decir que la transformación canónica  $\delta_A$  es una derivación, es decir, cumple la regla del producto de Leibnitz:  $\delta_A(BC) = (\delta_A B)C + B(\delta_A C)$ .
- Se supone que se cumplen las relaciones de conmutación canónicas:

$$(\phi^\alpha, \phi^\beta) = \epsilon^{\alpha\beta} E$$

donde  $\phi^\alpha$  se usa indistintamente para  $q_i$  y  $p_i$  y  $\epsilon^{\alpha\beta}$  es  $\delta_{ij}$  para  $(q_i, p_j)$  y se anula para  $(q_i, q_j)$  y  $(p_i, p_j)$ . Estas relaciones se cumplen en el formalismo clásico y en el cuántico con sus respectivos paréntesis de Lie, el corchete de Poisson y el conmutador respectivamente y siendo  $q_i = x, q$  y  $p_j = k, p$ .

Comparativamente, estos axiomas son más restrictivos que los anteriores pues la estructura del paréntesis de Lie no permite la violación del principio de acción y reacción [9].

La identidad de Jacobi se escribe como  $\delta_A(B, C) = (\delta_A B, C) + (B, \delta_A C)$ . La importancia de la identidad de Jacobi radica en que permite escribir  $(A, B)(t) = (A(t), B(t))$ . Esta identidad asegura que las relaciones de conmutación se mantengan tras la aplicación de una transformación canónica, evitando los problemas mencionados anteriormente como la pérdida de localidad temporal y la existencia de orígenes de tiempo privilegiados. Por su parte la condición de antisimetría garantiza la conservación de la energía y la hermiticidad durante la evolución [37].

Aunando todos estos requisitos, el paréntesis de Lie queda completamente determinado y se llega a la siguiente relación:

$$[A, B] = i\lambda(A, B)$$

para un cierto  $\lambda$  y para dos observables  $A$  y  $B$  arbitrarios. Entonces, si  $\lambda$  es distinto de cero se recupera la mecánica cuántica estándar identificando  $\lambda$  con  $\hbar$ , mientras que si  $\lambda$  se anula todas las variables conmutan. Debido a que el paréntesis de Lie está completamente determinado, se recupera el corchete de Poisson para el caso  $\lambda = 0$ . Como consecuencia se tiene que bajo estas condiciones la dinámica es solo cuántica o solo clásica.

Por otro lado, en [17] se incluye un teorema *no-go*, que demuestra que un formalismo híbrido que permita definir sobre él una estructura canónica, como la que tienen los formalismos clásico y cuántico, requiere que se satisfagan los postulados que se mencionan en esta sección. A su vez el cumplimiento de estos postulados necesita que  $\hbar$  tenga el mismo valor en ambos sectores (algo que también se había mostrado en [34]). La demostración que se da es la siguiente:

Supóngase que se tienen los observables  $A_1, B_1$  en un sector y los observables  $A_2, B_2$  en el otro. Supóngase también que el paréntesis de Lie  $(,)$  del sistema conjunto cuenta con las propiedades que se mencionan en esta sección y que en particular en cada sector el paréntesis es cuántico en cada sector con diferentes valores de  $\hbar$ :

$$(A_1, B_1) = \frac{1}{\hbar_1} [A_1, B_1] \quad (A_2, B_2) = \frac{1}{\hbar_2} [A_2, B_2]$$

Suponiendo que se pueden formar los observables  $A_1 A_2$  y  $B_1 B_2$  y aplicando dos veces la regla de Leibnitz se tiene:

$$\begin{aligned} (A_1 A_2, B_1 B_2) &= (A_1 A_2, B_1) B_2 + B_1 (A_1 A_2, B_2) = \\ &= A_1 (A_2, B_1) B_2 + (A_1, B_1) A_2 B_2 + B_1 A_1 (A_2, B_2) + B_1 (A_1, B_2) A_2 = \\ &= (A_1, B_1) A_2 B_2 + B_1 A_1 (A_2, B_2). \end{aligned}$$

La última igualdad utiliza que el paréntesis se anula entre observables de distintos sectores. Por otro lado, el paréntesis es antisimétrico bajo intercambios de  $A$  y  $B$ :

$$(A_1 A_2, B_1 B_2) = -(B_1 B_2, A_1 A_2)$$

pudiéndose escribir:

$$(A_1, B_1) A_2 B_2 + B_1 A_1 (A_2, B_2) = -(B_1, A_1) A_2 B_2 - B_1 A_1 (B_2, A_2) = (A_1, B_1) B_2 A_2 + A_1 B_1 (A_2, B_2)$$

que de forma compacta implica:

$$(A_1, B_1) [A_2, B_2] = [A_1, B_1] (A_2, B_2)$$

que solo se cumple si  $\hbar_1 = \hbar_2$ .

Este teorema demuestra que no existe un acoplamiento clásico-cuántico (donde  $\hbar_1 = \hbar$  y  $\hbar_2 = 0$ ) que disfrute de las propiedades que se han introducido a lo largo de la sección. Notar que en esta demostración no se ha hecho uso de la identidad de Jacobi, pero sí se ha supuesto que el producto  $A_1 A_2$  se mantiene durante la evolución y que el paréntesis es antisimétrico.

## 6.2 Construcción del paréntesis dinámico híbrido.

Ahora bien, en [16] se comenta que el problema de la semicuantización no se puede resolver de forma consistente mediante combinaciones de corchetes de Poisson y conmutadores, o lo que es lo mismo, ordenando los operadores. Este problema de la semicuantización se basa en la definición de un paréntesis dinámico de la forma:

$$(A, B)_s = (A, B)_q + \frac{1}{2} [(A, B)_c - (B, A)_c]$$

que ha sido propuesto en trabajos como [46, 54] de forma independiente y partiendo de diferentes consideraciones, el uso de la transformada de Wigner [29] y la formulación de de Broglie-Bohm de la mecánica cuántica respectivamente [55]. La crítica se debe a que el corchete dinámico presentado no satisface la identidad de Jacobi y por lo tanto, según lo comentado en los postulados acerca de la estructura canónica, las relaciones de conmutación no se mantienen bajo la aplicación de una transformación canónica. Por otro lado, imponer antisimetría es una condición insuficiente para obtener un paréntesis de Lie en general.

En lugar de abordar el problema de la formulación de los sistemas híbridos clásico-cuánticos desde este punto de partida, se plantean nuevas condiciones generales que se esperan de una dinámica consistente. Si  $\mathcal{A}_c$  es el conjunto de los observables clásicos y  $\mathcal{A}_q$  el conjunto de observables cuánticos, entonces el conjunto de los observables del sistema híbrido conjunto  $\mathcal{A}$  se construye como el espacio producto tensorial de ambos,  $\mathcal{A} = \mathcal{A}_c \otimes \mathcal{A}_q$  donde los operadores son de la forma  $A = \sum_{ij} C_i Q_j$  y donde  $C_i$  y  $Q_j$  son observables puramente clásicos y puramente cuánticos respectivamente. Se supone que existe un paréntesis de Lie  $(, )$  que cumple las condiciones:

$$(CQ, C') = (C, C')_c Q \quad (CQ, Q') = (Q, Q')_q C \quad (6.1)$$

que se justifican si el caso clásico-cuántico es un límite del caso cuántico-cuántico.

Se pueden suavizar estos postulados y escribir las siguientes relaciones:

$$(C, C') = (C, C')_c \quad (Q, Q') = (Q, Q')_q \quad (Q, C) = 0 \quad (6.2)$$

Estas relaciones se proponen para asegurar que los sectores cuántico y clásico evolucionan según sus respectivas dinámicas cuando son desacoplados. Los nuevos postulados pueden dar lugar a los anteriores si además se supone que  $(, C)$  y  $(, Q)$  son derivaciones.

Como resultado de imponer estas condiciones a los sistemas clásico-cuánticos, se tiene que en el caso de los postulados más débiles (6.2) no se tiene información suficiente para encontrar un paréntesis de Lie que sea solución de estas relaciones. En el caso de los postulados fuertes (6.1) se enuncia un teorema que se aplica a los sistemas híbridos donde el sector cuántico es de tipo posición-momento, esto es del tipo  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$  [16]:

**Teorema:** Si  $\mathcal{A} = \mathcal{A}_c \otimes \mathcal{A}_q$  es de tipo posición-momento en ambos sectores, no existe paréntesis de Lie  $(, )$  en  $\mathcal{A}$  cumpliendo los axiomas:

$$(A, C) = (A, C)_c \quad (A, Q) = (A, Q)_q$$

para todo  $C \in \mathcal{A}_c$ ,  $Q \in \mathcal{A}_q$  y  $A \in \mathcal{A}$ . Estos axiomas son equivalentes a los escritos anteriormente en (6.1) dado que los observables de  $\mathcal{A}$  son de la forma  $A = \sum_{ij} C_i Q_j$ .

En [18] se encuentra un paréntesis dinámico como solución en  $\mathcal{A}$  a los postulados anteriores. Sin embargo, ahora el sector cuántico es de dimensión finita,  $n \equiv \dim \mathcal{H} < \infty$ . Además, se demuestra que ésta construcción es única.

Para ello se precisa de la definición de un nuevo conjunto  $\tilde{\mathcal{A}}_q \subseteq \mathcal{A}_q$ , de los operadores con traza cero:

$$\tilde{\mathcal{A}}_q = \{\tilde{Q} \in \mathcal{A}_q, \text{tr}(\tilde{Q}) = 0\}$$

De lo anterior se obtiene que un observable cuántico  $Q \in \mathcal{A}_q$  se puede escribir como:

$$Q = Q_c + \tilde{Q}$$



donde  $Q_c$  es proporcional a la identidad según:

$$Q_c = \frac{1}{n} \text{tr}(Q) E$$

Nótese que esta descomposición no existe cuando  $n = \infty$  como es el caso de  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ . De esta manera, un observable híbrido se puede escribir como:

$$A = CE + \tilde{A}$$

donde  $C$  es clásico,  $E$  es la identidad y  $\tilde{A}$  es un operador híbrido de traza cero.

El paréntesis propuesto para la dinámica híbrida puede ser expresado de varias formas, de las cuales aquí preferimos quedarnos con:

$$(CQ, C'Q') = CC'[Q, Q'] + \{C, C'\}(QQ' - \tilde{Q}\tilde{Q}')$$

por tener una forma más compacta. En [16] también se da la expresión de este paréntesis de Lie en la imagen de Schrödinger.

El problema de esta construcción es que viola la condición de que la positividad se mantenga durante la evolución y lo mismo sucede con el paréntesis que se propone en [37, 46].

En la imagen de Heisenberg, la positividad es un caso particular del caso más general de la conservación de la imagen de un observable. En el caso cuántico, esto equivale a decir que el espectro de un operador se mantiene invariante durante la evolución, cumpliéndose gracias a que la evolución temporal es una transformación unitaria. En el caso clásico, los observables son funciones complejas definidas en el espacio de las fases por lo que el recorrido del observable  $A(x, k)$  es el conjunto imagen de esta función de las coordenadas  $(x, k)$ . La evolución temporal es una biyección del espacio fásico en sí mismo que hace corresponder a  $(x, k)$  los valores  $(x(t), k(t))$ , de forma que el recorrido clásico también es un invariante.

En la imagen de Schrödinger, la matriz densidad  $\rho$  que describe al estado debe ser un operador positivo. Esta positividad garantiza que el valor esperado de los operadores positivos sea positivo y esta positividad debe mantenerse en todos los instantes de tiempo. Esta condición es cierta tanto en los sistemas cuánticos como en los clásicos.

Como se ha visto que en la imagen de Heisenberg la positividad de un observable no se conserva en el caso híbrido, se sigue de la siguiente relación que la positividad de  $\rho$  también se pierde:

$$\langle A(t) \rangle_\rho = \langle A \rangle_{\rho(t)}$$

El primer miembro de la igualdad se corresponde con el valor esperado del operador en el estado  $\rho$  en la imagen de Heisenberg, mientras que en el segundo miembro se tiene lo mismo pero en la imagen de Schrödinger. El fundamento de esta igualdad radica en que el valor esperado de un observable es medible y no puede depender de la representación elegida. Si en la imagen de Heisenberg  $A$  es positivo pero su valor esperado puede tomar valores negativos (suponiendo que  $\rho$  sí es positiva), en la imagen de Schrödinger la matriz densidad no puede ser positiva pues llevaría a que no se cumple la igualdad del valor esperado en las distintas representaciones.



Recapitulando, se demuestra a partir de los axiomas fuertes introducidos en esta sección que la construcción del paréntesis de Lie es única cuando el sector cuántico es de dimensión finita y viola la condición de la positividad en la evolución. También se demuestra que bajo suposición de la existencia de estructura canónica, no existe una dinámica no trivial en espacios de tipo posición-momento. De estos inconvenientes se concluye en [9, 16, 18] que no es posible formular una dinámica consistente para los sistemas híbridos clásico-cuánticos satisfaciendo los postulados fuertes (6.1) introducidos en esta sección. Si es posible o no hacerlo con los axiomas débiles (6.2) es un problema abierto.

## 7 Summary and Conclusions.

Several approaches have been presented attempting the development of a consistent quantum-classical formalism. The different formalisms reviewed in the sections of this work have their strenghts and their limitations.

Of coourse, including sections for all the existent proposals was not the purpose of this work and so some of the cited authors have their own attempt of coupling mixed systems. For this reason, we give a categorization of all the formalisms considered in this work, similar to that found in [20]:

1. Formalisms that try to maintain the use of quantum states, including those defined by a density matrix. Approaches of this kind are [37, 46]. This type of approach leads to a series of inconsistencies like the primary quantum fluctuations are not transferred to the classical sector, which is a problem, for example, in the theory semiclassical gravity, as we noted in Sec. (3.2), where the presentation of these quantum fluctuations are responsible for galaxy formation after cosmic inflation. Despite [46] is more sophisticated, it is found that a Lie parenthesis can not be defined. A parenthesis that governs the interaction of the system must satisfy requirements such as Jacobi's identity, which is necessary for the conservation of the positivity of the matrix density of the system. In other cases it has been found that if the classic part of the system inherits the quantum fluctuations, the commutativity of classical variables is lost [16]. "However, this is based on assuming that the total Hamiltonian is bounded from below and in the Koopman-Sudarshan approach this boundedness is lost, so that one can accomodate conmmuting variables with induced fluctuations" [20].
2. Formalisms with a quantum translation of the classical mechanics to the language of Hilbert spaces. This is what is made in the Koopman-Sudarshan scheme. The main inconsistency attributed to them is that they do not reproduce the same classical limit as the quantum-quantum case. In fact, another sample of the difference between hybrids and quantum systems is found in the dispersions, i. e. the dinamical equations for second orden momenta [19]. Some can say this is a type of unphysical hybrid system [5, 6, 19], but others, as it is noted in [20] believe to recognize these features as an example of new physics that deserves further study.
3. Formalisms based in ensembles in configuration or phase-space. This is the case of [36, 38]. Their approaches may seem different, but [38] (linear approach) can be regarded as a particular case of [36], which is non-linear. In addition, the work shown in [38] was introduced almost entirely earlier by Heslot [34]. The main problem of

these approaches is twofold that statistical consistency is not satisfied and the proliferation of observables [17]. Again, some authors say that this behavior is a sign of new physics.

4. Exotic approaches, like the one found in [15] and criticized in [56]. This work is based in the Bohmian particle formalism [55]. The proposal is to make replicas of the quantum-classical system, each one with a different position of the Bohmian particle obtained by sampling the quantum sector density. Then, each copy of the system evolves as follows: (i) the quantum sector evolves as usual, taking the classical degrees of freedom as time-dependent parameters of its Hamiltonian, (ii) the Bohmian particle evolves following the de Broglie-Bohm postulates, its velocity only depends on the quantum degrees of freedom, and (iii) the classical sector evolves following Hamilton's equation but this time with the Bohmian particle position as a time-dependent parameter in the Hamiltonian. The expectation values of the observables are obtained by averaging over the final sample of the quantum-classical degrees of freedom [56].

Then, the initial state is given by some probability distribution  $n(u, \psi)$  defined over the compound manifold defined by  $u = (x, k)$  and  $|\psi\rangle$  is the quantum state. The full distribution including the Bohmian particle with coordinates  $y$  may be written as:  $f(u, \psi, y) = n(u, \psi) |\psi(y)|^2$ . The evolution equation define a flow for  $f$  in the manifold  $(u, \psi, y)$ .

This scheme has been computationally useful providing corrections to traditional mean-field and surface hopping approaches. This is because it takes into account the quantum fluctuations and it allows ignoring multiple computational terms in the Schrödinger equation when it is applied, for example, to proton transfer processes in a polar solvent [15].

On the other hand, the problems of this proposal noted in [56] are: (i) the initial relation between  $n$  and  $f$  is not conserved after evolution, which implies that energy is not conserved and that  $n$  does not satisfy the evolution equations, so at some intermediate time  $t$  there is not sufficient information to predict the next evolution, (ii) the statistical consistency is also violated.

5. Despite what is said in sec. 6 is not a truly formalism, it has been necessary to introduce an approach dealing with the algebraic structure of the dynamics. This structure has proven to be fundamental in the physics behind the mathematical framework of all dynamic theories. Concepts like, algebra of the observables, canonical transformations and dynamical brackets have been discussed and applied to hybrid schemes.

The objective of this review about hybrid quantum-classical formalisms was the evaluation of the physical and mathematical consistency of the approaches made. This consistency requirement must be understood as internal consistency. Internal consistency means that a theory with this feature displays all the correct properties that one would expect. In the case of classical mechanics "it can be said that it does not give any clue that it is just an approximation" [16].

One can conclude by pointing out that there exists two different attitudes to the inconsistencies found. The first and most generally accepted is that hybrid quantum-classical

systems are good approximations to complex quantum ones, but they display many different inconsistencies that may lead to discard them as truly physical systems. The second and most controversial point of view [20, 38] is that the inconsistencies are features of new physics phenomena that deserves further investigations.

It can be found in [56] a commentary which can be applied to all the cases mentioned in this work: "we have to distinguish between practical and theoretical points of view. At a practical level many methods has been found to be useful and give good results in concrete applications. However, at an exigent theoretical level, they fail to be fully internally consistent (this merely reflecting its intrinsically approximate nature) and cannot be regarded as a final answer to the quantum-classical mixing problem".

Some of this good results have been avoiding the problem of the mentioned backreaction in semiclassical gravity and the generalization of superselection rules [36, 37, 46] as well as applications to calculations in chemical physics [4, 8, 15].

By regarding the advantages of mixed quantum-classical systems as approximations one of the most important areas for future research is the development of more robust and generally accurate algorithms [8]: "The construction of mixed quantum and classical dynamical theories still presents many challenges and is a fertile ground for new future developments". Some of the most important conceptual problems are related to the definition of observables, their algebra and the failure to comply with general accepted notions as statistical consistency, classical limit, and conservations laws, that quantum and classical mechanics fulfill by themselves.

Another comment that criticizes the new physics argument can be found in [17]: "If such hybrid systems would exist in nature they would have emergent properties not shared by purely classical or purely quantum dynamics. This is by itself problematic because the prime example of classical-quantum interacting system, according to the Copenhagen interpretation, would be a quantum measurement. No emergent phenomena have been detected there".

The discussion about the emergent new physics behind the quantum-classical inconsistencies is whether the hybrid systems must be regarded as a suitable limit to the quantum-quantum case. For those who defends this position, there are various points of interest [20, 38]:

(i) it is necessary to introduce hybrid notions that do not come from a straight generalization of quantum or classical systems,

(ii) only the feedback provided by mesoscopic experiment will clarify which is the best way to accomplish the correct formulation of this type of systems.

In this line of thought, together with the difficulties in the quantization of gravity, there are those who have suggested that maybe gravity is not quantized [57]. That would demand a proper quantum-classical formalism to describe the correct coupling of gravity to the quantum matter [6, 20]<sup>3</sup>.

---

<sup>3</sup>En [6], Terno no defiende que la gravedad no deba ser cuantizada, sin embargo su argumento acerca de que la inconsistencia de los formalismos que no cumplen con el principio de correspondencia puede revertirse como se hace en [20].

## Referencias

- [1] W. H. Zurek,  
*"Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical"*,  
*Reviews of Modern Physics*, **75** (2003) 715.
- [2] M. Boscá,  
*Física Cuántica en la red. El teorema Einstein-Podolsky-Rosen.*  
[Einstein-Podolsky-Rosen](http://www.fisicacuantica.es/)  
<http://www.fisicacuantica.es/>
- [3] M. Boscá,  
*Física cuántica en la red.*  
[Física cuántica en la red](#) (ibid.)
- [4] L. Diósi, J. J. Halliwell,  
*"Coupling Classical and Quantum Variables using Continuous Quantum Measurement Theory"*,  
*Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 2846.
- [5] G. Sudarshan,  
*"Interaction between classical and quantum systems and the measurement of quantum observables"*.  
*Pramana* **6** (1976) 117.
- [6] D. R. Terno,  
*"Inconsistency of Quantum—Classical Dynamics, and What it Implies"*,  
*Foundations of Physics*, **36** (2006) 102.
- [7] M. Boscá,  
*Física Cuántica en la red. Entrelazamiento.*  
[Entrelazamiento](#) (ibid.)
- [8] R. Kapral,  
*"Quantum dynamics in open quantum-classical systems"*,  
*J. Phys.: Condens. Matter* **27** (2015) 073201.
- [9] L. L. Salcedo,  
*"Absence of classical and quantum mixing"*,  
*Phys. Rev. A* **54** (1996) 3657.
- [10] T. Yoshie, A. Scherer, J. Hendrickson, G. Khitrova, H. M. Gibbs, G. Rupper, C. Ell, O. B. Shchekin, D. G. Deppe:  
*"Vacuum Rabi splitting with a single quantum dot in a photonic crystal nanocavity"*,  
*Nature* **432** (2004) 200.
- [11] T. Suzuki, B.J. Whitaker,  
*"Non-adiabatic effects in chemistry revealed by time-resolved charged-particle imaging"*,  
*Int. Rev. Phys. Chem.* **20** (2001) 313.

- [12] J. Aqvist, A. Warshel,  
*"Simulation of Enzyme Reactions Using Valence Bond Force Fields and Other Hybrid Quantum/Classical Approaches"*  
*Chem. Rev.* **93** (1993) 2523.
- [13] E. J. Heller,  
*"Time-dependent approach to semiclassical dynamics"*,  
*J. Chem. Phys.* **62** (1975) 1544.
- [14] G.D. Scholes,  
*"Quantum-Coherent Electronic Energy Transfer: Did Nature Think of It First?"*,  
*J. Phys. Chem. Lett.* **1** (2010) 2.
- [15] O. V. Prezhdo, C. Brooksby:  
*"Quantum Backreaction through the Bohmian Particle"*,  
*Phys. Rev.* **86** (2001) 3215.
- [16] J. Caro, L.L. Salcedo,  
*"Impediments to mixing classical and quantum dynamics"*,  
*Phys. Rev. A* **60** (1999) 842.
- [17] L. L. Salcedo  
*"Statistical consistency of quantum-classical hybrids"*,  
*Phys. Rev. A* **85** (2012) 022127.
- [18] V. Gil, L. L. Salcedo,  
*"Canonical bracket in quantum-classical hybrid systems"*,  
*Phys. Rev. A* **95** (2017) 012137.
- [19] A. Peres and D. R. Terno,  
*"Hybrid classical-quantum dynamics"*,  
*Phys. Rev. A* **63** (2001) 022101.
- [20] C. B. Barceló, R. Carballo-Rubio, L. J. Garay, R. Gómez-Escalante  
*"Hybrid classical-quantum formulations ask for hybrid notions"*,  
*Phys. Rev. A* **86** (2012) 042120.
- [21] H. Goldstein, *"Classical Mechanics"*,  
Addison-Wesley, Reading, Mass. (1950).
- [22] M. Boscá,  
*Física cuántica en la red. La ecuación de Schrödinger.*  
[Ecuación de Schrödinger](#) (ibid.)
- [23] V. Sundström, R. van Grondelle,  
*"Energy transfer in photosynthetic light-harvesting antennas"*,  
*J. Opt. Soc. Am. B* (1990) 1595.
- [24] Bonella S, Cocker D F, Mac Kernan D, Kapral R, Ciccotti G  
*"Energy Transfer Dynamics in Biomaterial Systems"*,  
(Ed. Springer, Berlin 2009)

- [25] J.C. Tully,  
"Molecular dynamics with electronic transitions",  
*J. Chem. Phys.* **93** (1990) 1061.
- [26] A. Migani, M. Olivucci,  
"Canonical Intersecction: Electronic Structure, Dynamics and Sprectroscopy",  
(Ed. World Scientific, California 2004)
- [27] C. Fleming, N.I. Cummings, C. Anastopoulos, B.L. Hu,  
"The rotating-wave approximation: consistency and applicability from an open quantum system analysis",  
*J. Phys. A* **43** (2010) 405304.
- [28] H-P Breuer, F. Petruccione, .  
"The Theory of Open Quantum Systems",  
(Oxford University Press, 2002).
- [29] E. P. Wigner  
"On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium",  
*Phys. Rev.* **40** (1932) 749.
- [30] J. E. Subotnik, W. Ouyang and B. R. Landry,  
"Can we derive Tully's surface-hopping algorithm from the semiclassical quantum Liouville equation? Almost, but only with decoherence",  
*J. Chem. Phys.* **139** (2013) 214107.
- [31] U. Weiss,  
"Quantum Dissipative Systems",  
(Ed. World Scientific, Stuttgart 2012).
- [32] S. Hammes-Schiffer, J. C. Tully  
"Proton transfer in solution: Molecular dynamics with quantum transitions",  
*J. Chem. Phys.* **101** (1994) 4657.
- [33] G. Hanna, R. Kapral,  
"Quantum-Classical Liouville Dynamics of Nonadiabatic Proton Transfer ",  
*J. Chem. Phys.* **122** (2005) 244505.
- [34] A. Heslot,  
"Quantum mechanics as a classical theory",  
*Phys. Rev. D* **31** (1985) 1341 .
- [35] M. J. W. Hall and M. Reginatto,  
"Interacting classical and quantum ensembles"  
*Phys. Rev. A*, **72** (2005) 062109
- [36] M. J. W. Hall,  
"Consistent classical and quantum mixed dynamics",  
*Phys. Rev. A* **78** (2008) 042104.
- [37] A. Anderson,  
"Quantum Backreaction on Classical Variables",  
*Phys. Rev. Lett.* **74** (1994) 621.

- [38] H. T. Elze,  
*"Linear dynamics of quantum-classical hybrids"*,  
*Phys. Rev. A* **85** (2012) 052109.
- [39] A. Galindo And P. Pascual, *"Mecánica cuántica"*  
(Ed. Eudema, Madrid 1989).
- [40] J.A. Bergou, M. Hillery,  
*"Introduction to the Quantum Information Processing "*  
(Ed Springer, Berlin 2013).
- [41] M. Boscá,  
*Física Cuántica en la red. Valores medios y teorema de Erhenfest.*  
[Física cuántica en la red](#) (ibid.)
- [42] L. H. Ford,  
*"Gravitational radiation by quantum systems"*,  
*Ann Phys. (N. Y.)* **144** (1982) 238.
- [43] C-I. Kuo, L. H. Ford,  
*"Semiclassical gravity theory and quantum fluctuations"*,  
*Phys. Rev. D* **47** (1993) 4510.
- [44] NPTEL – Physics – Advanced Statistical Mechanics  
[http://www.nptel.ac.in/courses/115103028/download/ch5\\_asm\\_MF\\_nptel.pdf](http://www.nptel.ac.in/courses/115103028/download/ch5_asm_MF_nptel.pdf)
- [45] D. N. Page, C. D. Geilker,  
*"Indirect Evidence for Quantum Gravity"*,  
*Phys. Rev. Lett.* **47** (1981) 989.
- [46] W. Boucher, J. Trasden,  
*"Semiclassical physics and quantum fluctuations"*,  
*Phys. Rev. D* **37** (1988) 3522.
- [47] Q. Zhang and B. Wu,  
*"General Approach to Quantum-Classical Hybrid Systems and Geometric Forces"*,  
*Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 190401.
- [48] J. L. Alonso, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, J. C. Cuchi, P. Echenique, F. Falceto,  
*"Statistics and Nosé formalism for Ehrenfest dynamics"*,  
*J. Phys A* **44** (2011) 395004.
- [49] L. Rosenfeld,  
*"On quantization of fields"*,  
*Nucl. Phys.* **40**, (1963) 353.
- [50] L. L. Salcedo,  
*"Comment on 'A quantum-classical bracket that satisfies the Jacobi identity'*  
*[J.Chem.Phys.124,201104 (2006)]"*,  
*J. Chem. Phys.* **126** (2007) 057101.

- [51] Caltech.edu: CHAPTER 3. MEASUREMENT AND EVOLUTION  
POVM  
<http://www.theory.caltech.edu/people/preskill/ph229/notes/chap3.pdf>
- [52] Kraus operators. Wikipedia  
[Kraus operators](https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_operation#Kraus_operators)  
[https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum\\_operation#Kraus\\_operators](https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_operation#Kraus_operators)
- [53] B. S. Dewitt,  
*"Definition of commutators via the uncertainty principle",*  
*J. Math. Phys.* **3** (1962) 619.
- [54] O. V. Prezhdo, V. V. Kisil,  
*"Mixing quantum and classical mechanics",*  
*Phys. Rev. A* **56** (1997) 162.
- [55] L. de Broglie,  
*Acad. Sci. Paris* **183** (1926) 447.  
D. Bohm,  
*"A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. I",*  
*Phys. Rev.* **85** (1952) 166.
- [56] L. L. Salcedo,  
*"Comment on «Quantum Backreaction through the Bohmian particle»",*  
*Phys. Rev. Lett.* **90** (2003) 118901.
- [57] S. Carlijo,  
*"Is Quantum Gravity Necessary?",*  
*Class. Quant. Grav.* **25** (2008) 154010.