

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA, FÍSICA TÉRMICA Y
ELECTRÓNICA



TRABAJO DE FIN DE GRADO

Código de TFG: ETE38

FÍSICA ESTADÍSTICA EN SISTEMAS CUÁNTICOS PEQUEÑOS

STATISTICAL PHYSICS IN SMALL QUANTUM SYSTEMS

Supervisor: Armando Relaño Pérez

Carmen Martín Turrero

Grado en Física

Curso académico 2020-21

Convocatoria Junio

Física estadística en sistemas cuánticos pequeños: entrelazamiento y segundo principio de la termodinámica

Statistical physics in small quantum systems: entanglement and the second law of thermodynamics

Resumen:

La física estadística permite describir el funcionamiento de sistemas macroscópicos constituidos por una cantidad significativamente grande de partículas (del orden del número de Avogadro). Durante los últimos años, se ha tratado de entender bajo qué condiciones esta disciplina es aplicable a sistemas pequeños (de miles o millones de partículas), y cómo se pueden utilizar estos últimos para fortalecer la conexión entre lo macroscópico y lo microscópico. En este trabajo abordamos uno de los temas esenciales de este ámbito de estudio: la fundamentación microscópica del segundo principio de la termodinámica. Concretamente, exponemos cómo las correlaciones cuánticas pueden generar entropía, relacionando la producción de entropía de un sistema con el entrelazamiento existente entre dicho sistema y su entorno. Además, se ha realizado una simulación que presenta este concepto y muestra de forma clara y precisa el aumento de la entropía al aumentar las correlaciones cuánticas en un sistema sometido a un baño térmico.

Abstract:

Statistical physics enables us to describe the functioning of macroscopic systems formed by a significantly large number of particles (of the order of Avogadro's number). In recent years, attempts have been made to understand under which conditions this discipline is applicable to small systems (of thousands or millions of particles), and how these small systems can be used to strengthen the connections between the macroscopic and microscopic worlds. In this project, we address one of the essential topics of this field of study: the microscopic foundation of the second law of thermodynamics. More precisely, we present how quantum correlations can produce entropy, connecting entropy production of a system with the existing entanglement between that system and its environment. In addition, a model has been developed which introduces this concept and precisely illustrates the increase of entropy when quantum correlations rise in a system subject to a reservoir.

Índice

1. Introducción	3
2. Objetivos	4
3. Desarrollo teórico	4
3.1. Correlaciones entre sistema y baño: El estado canónico	4
3.2. Producción de entropía	5
3.3. Entropía relativa e irreversibilidad	6
3.4. Entropía de entrelazamiento	7
4. Metodología	8
4.1. Construcción de la base del espacio de Hilbert y del Hamiltoniano	8
4.2. Evolución temporal de un estado del universo	9
4.3. Matriz densidad del sistema y entropía de entrelazamiento	10
4.4. Estudio de los efectos de la aleatoriedad de la interacción	11
5. Resultados	11
6. Conclusiones	14
Referencias	16

1. Introducción

En 1845 Joule relacionó por primera vez las leyes de la termodinámica con la mecánica Hamiltoniana, vinculando el calor con el trabajo mecánico. Treinta años después, Boltzmann y Gibbs realizaron grandes avances siguiendo esta línea de trabajo: relacionaron ambas disciplinas utilizando nociones de estadística y teoría de probabilidades y, gracias a ello, formularon muchos de los conceptos más importantes de la mecánica estadística actual. De hecho, fue Boltzmann en 1877 quién definió la entropía por primera vez como una medida estadística del desorden del sistema, dando pie a su definición vigente.

En los últimos años la física estadística ha seguido avanzando y, actualmente, la termodinámica cuántica trata de buscar una teoría fundamental basada en la mecánica cuántica pura que explique los fenómenos termodinámicos sin necesidad de apoyarse en la mecánica clásica. Siguiendo esta línea de trabajo, Gemmer *et al* [1] demuestran la derivación cuántica del estado canónico de equilibrio. Además, enuncian que la descripción termodinámica de los sistemas es posible gracias al entrelazamiento existente entre los mismos y su entorno, y que dicho entrelazamiento es posible incluso si el entorno es pequeño. La principal consecuencia de este resultado es que la termodinámica ya no tiene por qué ser considerada una teoría únicamente macroscópica. Y, por tanto, el comportamiento de las leyes de la termodinámica puede ser estudiado también en sistemas cuánticos pequeños, donde estas leyes surgen de las interacciones existentes entre los subsistemas.

Gracias a los avances experimentales que permiten manipular miles de átomos con mucha precisión, existen numerosas líneas de investigación abiertas en esta disciplina actualmente, siendo uno de los temas fundamentales la construcción de una entropía microscópica que reproduzca el segundo principio de la termodinámica. Este problema trata de explicar el conflicto aparente entre una dinámica microscópica reversible y la irreversibilidad macroscópica, y se estudia desde distintos puntos de vista; como la asimetría del tiempo, que se mencionará más adelante (Sec. 3.3), o el entrelazamiento cuántico. El trabajo que se realiza a continuación se centra en estudiar la irreversibilidad microscópica como consecuencia de la aparición de correlaciones cuánticas entre un sistema y su entorno. Para ello, se ha realizado un estudio en profundidad de la entropía de entrelazamiento.

Gibbs [2] identificó el índice de probabilidad ($-\log \rho$) con la entropía en la colectividad microcanónica. Actualmente, se define la entropía de Gibbs para un estado clásico en equilibrio como la media de este índice de probabilidad: $S = -k_B \int \rho \log \rho \, dq dp$, siendo k_B la constante de Boltzmann [3]. No obstante, el teorema de Liouville enuncia la invariancia del volumen de cualquier región del espacio de fases en un sistema Hamiltoniano ($\frac{d\rho}{dt} = 0$). Estas dos definiciones juntas implican que la entropía de un sistema Hamiltoniano en mecánica clásica permanece constante en el tiempo ($\frac{dS}{dt} = 0$). De forma análoga, en mecánica cuántica se puede definir la entropía como $S = -k_B \text{tr}[\rho \log \rho]$, siendo ρ la densidad de estados. Esta densidad de estados proviene directamente de la función de ondas ($\rho = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|$) y, al igual que ocurre con la entropía clásica, si esta función de ondas es solución a la ecuación de Schrödinger y, por tanto, su evolución es unitaria, la entropía es constante.

Estas definiciones nos sirven para contextualizar el problema con el que estamos trabajando y resaltar la importancia del concepto que se introduce. Consideremos un universo¹ cuya evolución viene dada por una función de ondas $|\Psi(t)\rangle$, entonces se puede constatar que su entropía total no

¹A lo largo de este trabajo se utiliza la acepción del término universo como conjunto de elementos cualesquiera en los cuales se consideran una o más características que se someten a estudio estadístico.

solo es constante, sino que es nula. Sin embargo, existe la posibilidad de introducir el entrelazamiento cuántico y estudiar una entropía que sí aumente con la evolución temporal del estado, y este es el principal resultado que se discute en este trabajo. Para ello, consideremos que el universo está formado por un sistema rodeado de un baño térmico. Entonces, hay cierta información del sistema que se propaga por el baño a lo largo del tiempo, lo cual conlleva la existencia de un entrelazamiento entre ambos y el aumento de las entropías del sistema y el baño. Por tanto, dichas entropías dependerán del tiempo. Este razonamiento implica que la entropía del universo se mantiene constante, mientras que la entropía de los subsistemas que lo componen aumenta, hecho paradójico cuya explicación reside en el entrelazamiento cuántico.

La descripción que se acaba de realizar permite explicar el segundo principio de la termodinámica en un contexto diferente al habitual. Se introduce el concepto de entrelazamiento de un sistema con su entorno como explicación a la producción de entropía de dicho sistema. En este trabajo se expondrá su funcionamiento en detalle y se estudiará su validez.

2. Objetivos

El objetivo de este trabajo es estudiar con detalle la entropía microscópica, tratándola como resultado de las correlaciones que aparecen entre un sistema y su entorno. En particular, se ha desarrollado una simulación para demostrar el valor positivo de la producción de entropía en un sistema rodeado por un baño a temperatura constante, y la aparición de irreversibilidad introducida como consecuencia de las correlaciones cuánticas que aparecen entre ambos con el tiempo.

3. Desarrollo teórico

En un universo formado por un sistema sometido a un baño térmico, a lo largo del tiempo habrá información del sistema que tenderá a propagarse por el baño y esto llevará al aumento del entrelazamiento entre ambos y, como veremos a continuación, a un aumento de la entropía. Antes de describir la simulación realizada en este trabajo, cabe realizar una breve descripción teórica que introduzca algunos conceptos necesarios para entender el proceso y los resultados obtenidos.

3.1. Correlaciones entre sistema y baño: El estado canónico

El postulado de equiprobabilidad *a priori* enuncia que dado un sistema aislado en equilibrio, este tiene en principio la misma probabilidad de estar en cualquiera de los microestados disponibles [1]. En un universo sujeto a una restricción global ($\mathcal{H}_R \subseteq \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$), como sería la conservación de la energía en el caso de la física estadística, este postulado implica la asunción de que, en el equilibrio, el universo está descrito por el estado equiprobable (ε_R) dado por:

$$\varepsilon_R = \frac{1}{d_R} \mathbb{1}_R, \quad (1)$$

donde d_R indica la dimensión de \mathcal{H}_R y $\mathbb{1}_R$ es la matriz identidad con esta dimensión.

Si efectivamente fijamos la restricción del universo como la energía total del mismo, relacionando así este principio con la física estadística, podemos interpretar el estado equiprobable (1) como que todos los estados con la misma energía tienen la misma probabilidad.

Cuando el universo está descrito por este estado de equilibrio, el estado reducido en el que se encuentra el sistema es:

$$\Omega_S = \text{tr}_B \varepsilon_R, \quad (2)$$

siendo tr_B la traza sobre la base del baño, restringiendo así el estado a los grados de libertad del sistema.

Con este resultado en mente, Pospescu *et al* [4] demuestran que si se considera un estado puro del universo, $|\phi\rangle$, el estado reducido del sistema ($\rho_S = \text{tr}_B |\phi\rangle\langle\phi|$) se encuentra casi siempre aproximadamente en el estado canónico, Ω_S .

$$\Omega_S \approx \rho_S \quad (3)$$

En particular, estando este universo descrito por el Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_U = H_S + H_B + H_{int}, \quad (4)$$

donde H_S y H_B son los Hamiltonianos del sistema y el baño, respectivamente, y H_{int} es el Hamiltoniano de interacción entre ambos; los autores prueban que, independientemente de que la interacción sea débil o fuerte, la distancia media (sobre todos los estados $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_R$) entre el estado del sistema y el estado canónico verifica:

$$\langle D(\rho_S, \Omega_S) \rangle \leq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_S}{d_B^{ef}}}, \quad (5)$$

siendo d_S y d_B^{ef} la dimensión del sistema y la dimensión efectiva del baño ($d_B^{ef} = 1/\text{tr} \Omega_B^2$), respectivamente.

Esta definición permite ilustrar como, a pesar de estar un universo en un estado puro, en los subsistemas que lo componen aparece una termalización consecuencia del entrelazamiento entre cada uno de ellos y su entorno. De esta forma, en el universo particular con el que estamos trabajando, aparece una entropía en el sistema aun cuando la entropía total del propio universo es nula. Esta última hipótesis es lo que trabajamos en la simulación.

Como conclusión a estas demostraciones, Popescu *et al* enuncian que cualquier estado puro del universo es, desde el punto de vista del sistema, indistinguible del equiprobable (ε_R). Por consiguiente, se puede afirmar que cualquier sistema se comporta como si el universo estuviese en el estado canónico, y esto se debe al entrelazamiento masivo que hay entre dicho sistema y su entorno. La entropía de von Neumann del operador densidad del sistema mide este entrelazamiento existente con el resto de estados del universo [5]:

$$S(\rho) = -\text{tr} \rho \log \rho \quad (6)$$

3.2. Producción de entropía

Anteriormente se ha explicado como la entropía total del universo se mantiene constante en el tiempo; y que, sin embargo, las entropías de sistema y baño pueden aumentar aunque la restricción $\Delta S_{univ} = 0$ se siga cumpliendo. En los cambios de entropía del sistema encontramos dos

partes diferenciadas: el flujo de entropía ($\Delta_f S(t)$), que representa la contribución reversible y es consecuencia de los intercambios de calor; y la producción de entropía ($\Delta_p S(t)$), que representa la contribución irreversible de los cambios en el sistema.

$$\Delta S(t) = \Delta_f S(t) + \Delta_p S(t) \quad (7)$$

En este trabajo lo interesante es estudiar la producción de entropía, dado que el objetivo es explicar la irreversibilidad microscópica. Su valor es siempre positivo excepto cuando las correlaciones entre el sistema y su entorno son inexistentes, en cuyo caso es nulo.

$$\Delta_p S(t) \geq 0 \quad (8)$$

En caso de que la producción de entropía sea nula, se dice que el estado del sistema está completamente decorrelacionado de aquel del baño y, por comodidad para el estudio que se va a realizar, será este estado del universo el que se tomará como condición inicial a lo largo de este trabajo.

3.3. Entropía relativa e irreversibilidad

La entropía relativa entre dos funciones de densidad de probabilidad, también denotada como la distancia de Kullback-Leibler, es un concepto de teoría de la información que expresa la dificultad de distinguir muestras de dos densidades de probabilidad diferentes [6]. Trasladando esta definición a la mecánica cuántica, esta entropía relativa se entiende como la distancia existente entre dos estados definidos por sus respectivas matrices densidad, ρ y $\tilde{\rho}$, y se enuncia de la siguiente forma:

$$D [\rho \parallel \tilde{\rho}] = \text{tr } \rho \log \rho - \text{tr } \rho \log \tilde{\rho} \quad (9)$$

Esta definición se puede relacionar directamente con la irreversibilidad y el segundo principio de la termodinámica. Dado que la producción de entropía aumenta según lo hacen las correlaciones y que el estado sin correlación es aquel para el que toma un valor nulo, se puede definir la producción de entropía como la medida de la distancia entre un estado $\rho(t)$ y el estado separable, $\rho(0)$ ². De esta manera, se cuantifica cuánto de ‘lejos’ se encuentra un estado del estado totalmente decorrelacionado [7].

$$\Delta_p S(t) = k_B D [\rho(t) \parallel \rho(0)] \quad (10)$$

Sin embargo, este no es el único uso de la distancia de Kullback-Leibler en este ámbito de estudio. Parrondo *et al* [8] relacionan la producción de entropía con la flecha del tiempo. Para ello, comparan la densidad de probabilidad de un proceso hacia adelante en el tiempo, $\rho(t)$, con la de su inverso temporal (el mismo proceso hacia atrás), $\check{\rho}(t)$, y demuestran que existe una relación directa entre la entropía relativa de estos dos procesos y la producción de entropía del proceso hacia adelante. Concretamente, prueban que esta relación se cumple tanto para el caso clásico, como para el cuántico y la estudian para distintas condiciones iniciales.

$$\Delta_p S(t) = k_B D [\rho(t) \parallel \check{\rho}(t)] \quad (11)$$

²Se está identificando el estado separable con el estado inicial, como se ha mencionado con anterioridad.

Esta última descripción de la producción de entropía mide la distinguibilidad de la dirección del tiempo y pretende explicar la irreversibilidad macroscópica a partir de la reversibilidad microscópica. Se realiza una definición que parte de lo microscópico, pero sigue teniendo la necesidad de usar promedios de partículas y realizaciones. Sin embargo, el objetivo de este trabajo es encontrar una definición puramente microscópica de la entropía y, para ello, es necesario introducir la entropía de entrelazamiento.

3.4. Entropía de entrelazamiento

De vuelta al universo con el que se está trabajando, cuando el sistema evoluciona, la suma de entropías del sistema y el baño no coincide con la entropía total del universo. La explicación a este suceso es no haber tenido en cuenta la contribución de la entropía contenida en las correlaciones y el entrelazamiento existente entre ambos [7]. Si añadimos esta contribución, podemos definir la entropía del universo con el que estamos trabajando como:

$$S(t) + S_r(t) + S_c(t) = -k_B \text{tr } \rho(t) \log \rho(t), \quad (12)$$

donde S denota la entropía del sistema, S_r la entropía del baño y, S_c , la de las correlaciones. Como se ha explicado con anterioridad, la entropía del universo se conserva en el tiempo, por lo que si tomamos un estado inicial decorrelacionado ($S_c(0) = 0$) podemos medir la entropía que aparece debida al aumento de correlación entre el sistema y el baño como:

$$S_c(t) = -\Delta S(t) - \Delta S_r(t). \quad (13)$$

El baño no tiene por qué mantenerse en equilibrio en todo momento, por lo que en esta definición el término que refiere el aumento de su entropía es no nulo. No obstante, si se toma el límite termodinámico y se trabaja con un baño lo suficientemente grande, sí se puede decir que este está siempre en equilibrio y, en consecuencia, es posible describir la entropía de correlación únicamente en función de la producción de entropía del sistema:

$$S_c(t) = -\Delta S_p(t). \quad (14)$$

Esta definición que relaciona la entropía escondida en las correlaciones con la producción de entropía, concuerda con la descrita por la ecuación 10: la producción de entropía del sistema mide el aumento de entrelazamiento entre dicho sistema y su entorno.

La producción de entropía siempre aumenta, por lo que la entropía de correlación es siempre una contribución negativa con la excepción de estados completamente decorrelacionados, en cuyo caso es nula, como se ha explicado con anterioridad.

$$S_c(t) \leq 0. \quad (15)$$

La entropía de entrelazamiento del sistema se medirá, por tanto, como la producción de entropía del mismo. Además, tiene un equivalente negativo correspondiente a la entropía propia de las correlaciones entre el sistema y el baño. Esta entropía negativa es la que aparece cuando las entropías del sistema y el baño aumentan, mientras que la entropía del universo se mantiene constante. De hecho, es la responsable de que a pesar de que el entrelazamiento aumente en el universo, este siga manteniendo una entropía macroscópicamente nula.

4. Metodología

Con el fin de ilustrar que las correlaciones cuánticas pueden generar entropía, se ha realizado una simulación en la que se analiza la evolución temporal de un sistema interaccionando con su entorno. Concretamente, en esta simulación el sistema se puede interpretar como un átomo de dos niveles y el entorno con el que interacciona es un baño a temperatura constante de dimensión N ; por lo que la dimensión total del espacio de Hilbert es $d = 2N$.

El Hamiltoniano del universo (sistema + baño) que se estudiará es el siguiente:

$$\mathcal{H} = \sigma_z + H_B + \sigma_x R. \quad (16)$$

En este Hamiltoniano se distinguen tres términos:

- **Hamiltoniano del sistema (σ_z):** representa la distancia entre los dos niveles energéticos del átomo; por lo que σ_z , que es la conocida matriz de Pauli, modeliza la energía del sistema.
- **Hamiltoniano del baño (H_B):** describe la energía de un baño térmico aislado mediante una matriz diagonal $N \times N$ con autovalores equidistantes entre -0.5 y 0.5.
- **Hamiltoniano de interacción ($\sigma_x R$):** reproduce la excitación o desexcitación de un átomo como consecuencia de sus interacciones con el exterior. Esta interacción queda definida por la matriz de Pauli σ_x , que modela las transiciones del estado fundamental al excitado –y del excitado al fundamental– inducidas por la matriz de interacción sistema-baño, R . Dicha matriz representa una interacción muy compleja que se puede modelar como una matriz aleatoria [9] y, por tanto, la definimos como $R = X/\sqrt{8N}$, siendo X una matriz aleatoria del grupo ortogonal gaussiano.

Este modelo de Hamiltoniano es similar al utilizado por Esposito *et al* [7]. A continuación se muestran los pasos seguidos para llevar a cabo la simulación, la cual ha sido realizada en el lenguaje Python y cuyo desarrollo se puede consultar en <https://github.com/carmen-martin/simulacion-entropia-entrelazamiento>.

4.1. Construcción de la base del espacio de Hilbert y del Hamiltoniano

Para construir el Hamiltoniano, primero necesitamos la base del espacio de Hilbert con el que estamos trabajando. Por tanto, elegimos una base para el sistema y otra para el baño que nos permitan construir la base del universo. Por sencillez se ha escogido:

- **Base del sistema:** $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. Con esta elección la actuación de las matrices de Pauli sobre el sistema es simplemente:

$$\sigma_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle, \sigma_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle, \quad (17)$$

$$\sigma_x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \sigma_x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle. \quad (18)$$

- **Base del baño:** Base de dimensión N cuya forma es $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$.

La base del universo la formarán los elementos $|n\rangle = |i\rangle_S \otimes |j\rangle_B$, resultado de la composición de todos los estados del sistema (i) y del baño (j). A partir de esta base, se puede construir cualquier función de ondas del universo como combinación lineal de sus elementos:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} C_{ij} |n\rangle = \sum_{i,j} C_{ij} |i\rangle_S \otimes |j\rangle_B, \quad (19)$$

siendo C_{ij} los coeficientes que determinan la forma de la función de ondas.

Finalmente, se puede construir el Hamiltoniano (16) como una matriz $2N \times 2N$ de la siguiente forma:

$$H_{mn} = \langle m | \mathcal{H} | n \rangle, \quad (20)$$

siendo $|m\rangle$ y $|n\rangle$ elementos de la base del universo. Para construir esta matriz, hay que analizar como actúa el Hamiltoniano sobre cada uno de ellos:

$$\mathcal{H}|n\rangle = \sigma_z |i\rangle_S \otimes |j\rangle_B + |i\rangle_S \otimes H_r |j\rangle_B + \sigma_x |i\rangle_S \otimes R |j\rangle_B. \quad (21)$$

Y, conocida esta actuación, se estudia el producto escalar del resultado nuevamente con cada uno de los elementos de la base:

$$\langle m | \mathcal{H} | n \rangle = {}_S \langle a | \sigma_z | i \rangle_S {}_B \langle b | j \rangle_B + {}_S \langle a | i \rangle_S {}_B \langle b | H_r | j \rangle_B + {}_S \langle a | \sigma_x | i \rangle_S {}_B \langle b | R | j \rangle_B, \quad (22)$$

donde $|m\rangle = |a\rangle_S \otimes |b\rangle_B$ y $|n\rangle = |i\rangle_S \otimes |j\rangle_B$ son dos elementos de la base del universo.

4.2. Evolución temporal de un estado del universo

Una vez construido el Hamiltoniano del universo, se estudia la evolución temporal de un estado del mismo. En particular, y por sencillez, como se explicó en la Sec. 3.2 se ha tomado como estado inicial del universo uno en el que no existe correlación entre el sistema y el baño.

- **Estado inicial del sistema:** $|\chi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$, escogido así por simplicidad.
- **Estado inicial del baño:** $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_i e^{\frac{-\beta E_{r,i}}{2}}$. Esta función de ondas pretende simular la condición de equilibrio termodinámico de un baño térmico a temperatura $1/\beta$, siendo esta modelización una forma habitual [10]. Nótese que se ha escogido el sistema de unidades en el cual $\hbar = k_B = 1$.

Por tanto, el estado inicial del universo quedaría descrito por una función de ondas separable y en la que las entropías del sistema y el baño son nulas:

$$|\Psi(0)\rangle = |\chi(0)\rangle \otimes |\psi(0)\rangle, \quad (23)$$

Para analizar la evolución de este estado se necesita la base de autoestados del Hamiltoniano. Por tanto, el primer paso es hallar dicha base con sus autovalores correspondientes:

$$\mathcal{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle. \quad (24)$$

Una vez tenemos la base de autovectores del Hamiltoniano, $\{|E_1\rangle, \dots, |E_n\rangle\}$, con sus autoenergías correspondientes, $\{E_1, \dots, E_n\}$, se calcula el estado inicial del universo en la misma:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n \langle \Psi_0 | E_n \rangle |E_n\rangle \equiv \sum_n \alpha_n |E_n\rangle. \quad (25)$$

Y la evolución temporal del estado en esta base viene dada por:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \alpha_n e^{-iE_n t/\hbar} |E_n\rangle. \quad (26)$$

Finalmente, se deshace el cambio de base para conocer la evolución del estado en la base original sistema – baño y poder calcular la entropía de entrelazamiento empleando esta última:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{ab} C_{ab}(t) |a\rangle_S \otimes |b\rangle_B. \quad (27)$$

4.3. Matriz densidad del sistema y entropía de entrelazamiento

Tras hallar la evolución temporal del estado, el siguiente paso es analizar la entropía de entrelazamiento del sistema. Para ello, se calcula la matriz de densidad reducida del sistema como una función del tiempo:

$$\rho_s(t) = \text{tr}_B[\rho(t)], \quad (28)$$

donde $\rho(t)$ es la matriz densidad del estado ($\rho(t) \equiv |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$) y tr_B es la traza sobre la base del baño, ignorando así los grados de libertad correspondientes al mismo. Tomando la forma de nuestro estado y calculando con el mismo la matriz densidad, se obtiene:

$$\rho(t) = \sum_{ab,ij} C_{ij}^*(t) C_{ab}(t) |a\rangle_S \langle i|_S \otimes |b\rangle_B \langle j|_B, \quad (29)$$

y, utilizando esta definición, se puede expresar la matriz densidad reducida del sistema de una forma sencilla de calcular:

$$\rho_s(t) = \sum_k {}_B\langle k|\rho(t)|k\rangle_B = \sum_k \sum_{ab,ij} C_{ij}^*(t) C_{ab}(t) |a\rangle_S \langle i|_S \otimes {}_B\langle k|b\rangle_B {}_B\langle j|k\rangle_B \quad (30)$$

$$\Rightarrow \rho_s(t) = \sum_k \sum_{a,i} C_{ik}^*(t) C_{ak}(t) |a\rangle_S \langle i|_S, \quad (31)$$

donde se ha tenido en cuenta que los vectores de la base del baño son ortonormales y, por tanto, ${}_B\langle k|b\rangle_B = \delta_{kb}$ y ${}_B\langle j|k\rangle_B = \delta_{jk}$.

La matriz densidad reducida del sistema (31) resulta ser una matriz 2×2 de la siguiente forma:

$$\rho_s(t) = \begin{pmatrix} \sum_k C_{\uparrow,k}^*(t) C_{\uparrow,k}(t) & \sum_k C_{\uparrow,k}^*(t) C_{\downarrow,k}(t) \\ \sum_k C_{\downarrow,k}^*(t) C_{\uparrow,k}(t) & \sum_k C_{\downarrow,k}^*(t) C_{\downarrow,k}(t) \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Finalmente, la entropía de entrelazamiento queda definida por la entropía de von Neumann como:

$$S = -\text{tr} \rho_s(t) \log(\rho_s(t)), \quad (33)$$

dónde se ha tomado la constante de Boltzmann $k_B = 1$. Diagonalizando la matriz densidad reducida del sistema, se calcula fácilmente esta entropía en función de los autovalores de la misma:

$$S = -\sum_i \lambda_i \log[\lambda_i]. \quad (34)$$

La suma es sobre todos los autovalores, λ_i , de $\rho_s(t)$. Además, para evitar singularidades asumimos $0 \cdot \log(0) = 0$.

4.4. Estudio de los efectos de la aleatoriedad de la interacción

Una vez seguidos estos pasos se observa que dado que la matriz de interacción está basada en una matriz aleatoria, los resultados varían en función del valor de la misma. En consecuencia, surge la necesidad de estudiar si es simplemente un efecto que produce mayor o menor entrelazamiento entre el sistema y el baño o si afecta a la forma en la que este entrelazamiento y, por tanto, la entropía se comportan.

Para analizar los resultados de forma correcta se introduce en la simulación un bucle que nos permite comparar las entropías de entrelazamiento para distintos valores aleatorios del Hamiltoniano de interacción. Nótese que para introducir la matriz aleatoria de un grupo ortogonal gaussiano en la simulación se ha utilizado la librería TeNPY [11].

5. Resultados

El principal resultado de la simulación es la evolución temporal de la entropía de entrelazamiento del sistema. Específicamente, se ha estudiado el caso en el que la dimensión del baño es $N = 250$ y, su temperatura, $T = 0.5$ (nótese que no estamos trabajando con un problema físico real y podemos tomar este valor por simplicidad).

Comencemos analizando cómo evoluciona el sistema en un primer momento, tras la primera interacción con el baño partiendo de un estado decorrelacionado. Anteriormente, se ha explicado la aleatoriedad del Hamiltoniano de interacción, por lo que no solo estudiaremos como evoluciona el sistema, sino como lo hace en función de la interacción existente con el baño térmico.

En la Fig. 1 se ha representado la entropía de entrelazamiento como función del tiempo en los primeros instantes tras la interacción. Este resultado se ha obtenido para 6 matrices de interacción aleatorias diferentes y se puede ver como, independientemente de esta matriz, la entropía siempre es creciente. Por tanto, los resultados confirman que el entrelazamiento entre el sistema y el baño que lo rodea aumenta, evolucionando hacia un estado de equilibrio. De hecho, se observa claramente como en estos primeros momentos de interacción el crecimiento es continuo y rápido hasta alcanzar un punto en el que comienza a ralentizarse, y que varía dependiendo del Hamiltoniano. Este punto, como se analizará más adelante, corresponde a la llegada próxima al valor máximo de entropía de entrelazamiento, marcando una tendencia hacia el estado de equilibrio.

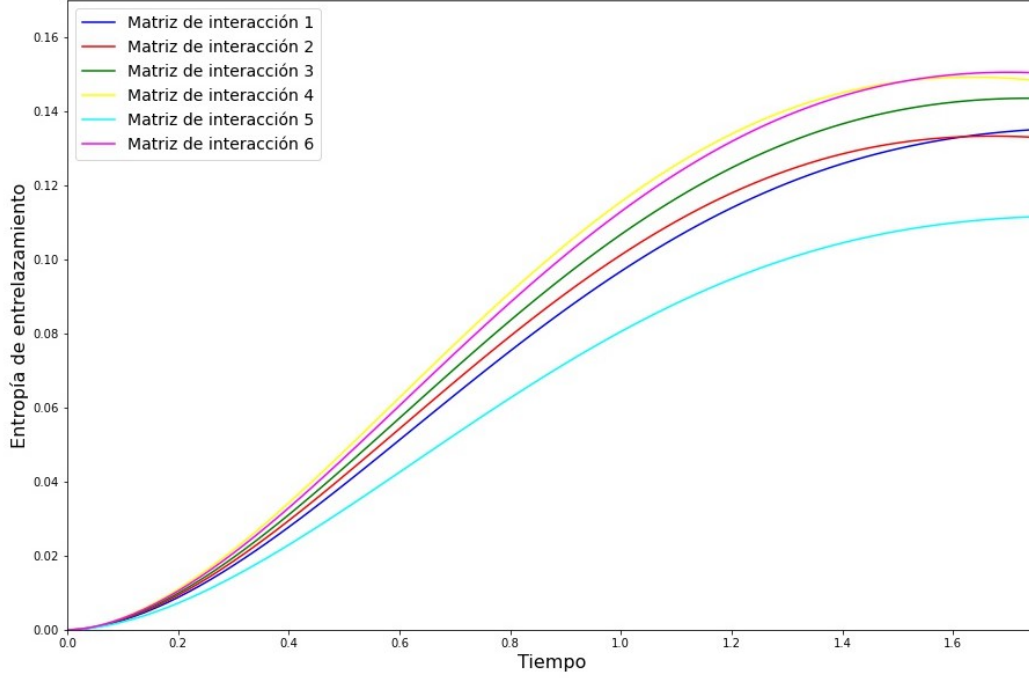


Figura 1: Aumento de la entropía de entrelazamiento y por tanto, de las correlaciones, para 6 matrices de interacción sistema - baño distintas durante los primeros instantes de la evolución temporal. Se parte de un sistema con entropía nula y se observa un crecimiento rápido y continuo de la misma en todos los casos. Finalmente, entorno a $t = 1,6u$ el crecimiento empieza a ser más lento con la llegada a la saturación. Nótese que las unidades son arbitrarias debido a que el modelo no representa un sistema físico real.

Por otro lado, se estudia la evolución de las correlaciones entre sistema y baño a tiempos más grandes. En la Fig. 2 se ha representado de nuevo la evolución temporal de la entropía de entrelazamiento para las mismas 6 matrices de interacción aleatorias utilizadas con anterioridad, pero esta vez para un rango de tiempos más amplio. En este caso, se observa que la función tiene una forma similar independientemente de la matriz de interacción. Concretamente, la evolución temporal de la entropía de entrelazamiento en los 6 casos estudiados difiere únicamente en el valor máximo que alcanzan y las oscilaciones que se dan entorno al estado de equilibrio, de las cuáles hablaremos más adelante. Para poder estudiar la evolución de las correlaciones con mayor precisión, se ha realizado un promedio de los resultados con los distintos Hamiltonianos y se ha representado en la Fig. 3.

Una vez se tiene la representación gráfica del resultado, se puede analizar con detalle la evolución de la entropía de entrelazamiento y el significado de la forma que sigue esta función. En el instante inicial, la entropía de entrelazamiento es nula dado que partimos de un estado completamente separable. Como se ha explicado anteriormente, se ha fijado como condición inicial del sistema $|\chi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$ y, efectivamente, se observa que en $t = 0$ la entropía es nula. A continuación, se deja evolucionar al universo objeto de estudio y aparece un crecimiento rápido y continuo hasta alcanzar un valor máximo a partir del cuál la función comienza a oscilar creciendo lentamente y tendiendo hacia un mismo valor. Este valor es el de la entropía máxima y se alcanza para el estado de equilibrio.

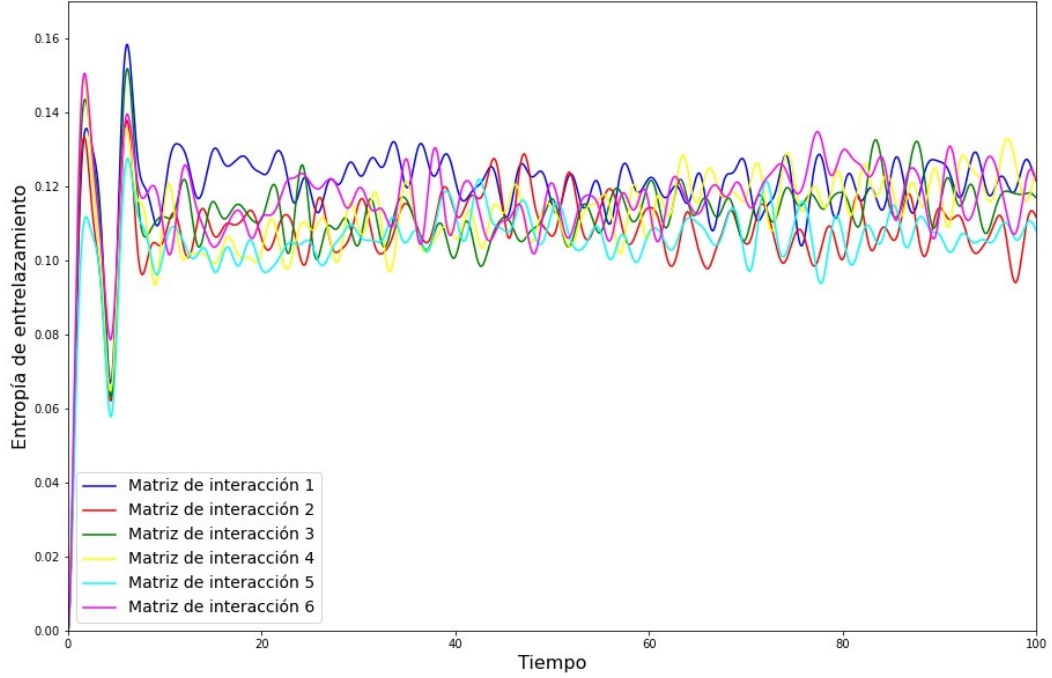


Figura 2: Evolución temporal de la entropía de entrelazamiento del sistema para 6 matrices de interacción sistema - baño distintas. El comportamiento de la evolución temporal de la entropía de entrelazamiento es el mismo para todas las interacciones. Se observa un claro crecimiento en los primeros instantes de la interacción, mientras que a tiempos mayores la función tiende al estado de máxima entropía, existiendo oscilaciones entorno a ese valor. Las unidades de los ejes son arbitrarias ya que no estamos trabajando con un sistema físico real.

La producción de entropía es positiva, pero los resultados muestran como este crecimiento no es monótono. De hecho, una vez se alcanza el valor máximo de la entropía aparecen oscilaciones que implican decrecimientos en la función. Estos decrecimientos se pueden interpretar como la reaparición de la entropía negativa S_c descrita en la Sec. 3.4, cuando momentáneamente el universo vuelve a acercarse a un estado en el que sistema y baño están menos entrelazados. En mecánica cuántica, estas oscilaciones del estado se conocen como recurrencias, y el tiempo de recurrencia mide el tiempo que tarda un sistema en pasar arbitrariamente cerca del estado inicial; lo que en este caso se visualizaría como el regreso a una entropía prácticamente nula. Este tiempo se va haciendo cada vez más largo, de forma muy rápida, a medida que aumenta el número de partículas. Por este motivo, en el límite termodinámico, donde el baño térmico es infinitamente grande, cabe esperar que estas recurrencias sean cada vez menos probables y que la función temporal de la entropía de entrelazamiento converja a una función creciente monótona. En la Fig. 2 se observa un primer máximo, seguido de un mínimo y otro máximo, que se dan aproximadamente en el mismo instante de tiempo independientemente del Hamiltoniano de interacción. Se puede interpretar este mínimo como una recurrencia del estado observada a través de la entropía del sistema y asumimos que es consecuencia de un efecto de tamaño finito y, por tanto, que desaparecerá en el límite termodinámico. Evitar este efecto está fuera del alcance de cualquier simulación.

Finalmente, se observa como independientemente de la matriz de interacción existente entre el sistema y el baño, los estados oscilan aparentemente tendiendo hacia un mismo valor máximo de

la entropía. Este resultado concuerda con lo esperado en la teoría: el estado reducido del sistema siempre será aproximadamente igual a aquel para el cuál el sistema esté máximamente entrelazado, Ω_s (Sec. 3.1).

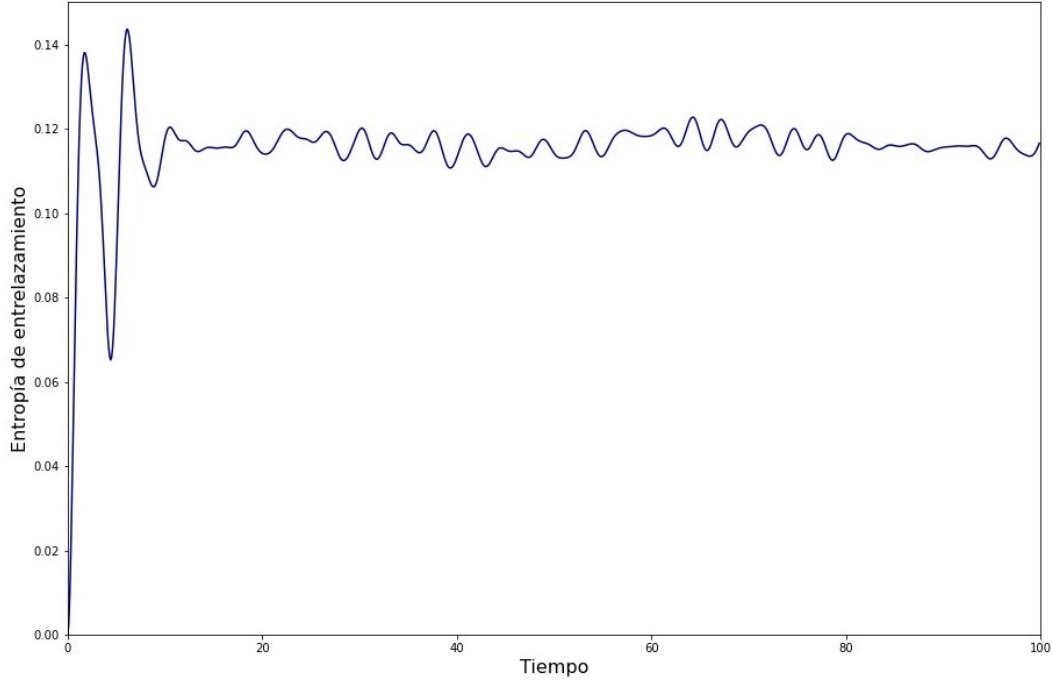


Figura 3: Promedio de la evolución temporal de la entropía de entrelazamiento. La función de la evolución tiene una forma clara y que concuerda con la teoría. Crece nada más comenzar a interaccionar de forma rápida, para posteriormente alcanzar un valor de saturación tendiendo hacia el equilibrio. En términos de entrelazamiento, tiende hacia el estado máximamente entrelazado partiendo de uno separable. Las oscilaciones que se observan son un efecto de tamaño finito, y desaparecerían en el límite termodinámico. Las unidades de los ejes son arbitrarias ya que no se está trabajando con un sistema físico real.

6. Conclusiones

En este trabajo se ha identificado el aumento de la producción de entropía en un sistema con el aumento de las correlaciones existentes entre dicho sistema y su entorno. De hecho, la simulación llevada a cabo ha permitido visualizar de forma directa esta identificación. Se ha ilustrado el crecimiento de la entropía de entrelazamiento a partir de un estado del universo en el que el sistema inicialmente no tenía correlación con su entorno, y se ha llegado a un estado final de equilibrio en el que sistema y entorno estaban máximamente entrelazados y la entropía era mayor. La simulación ha permitido observar gráficamente cuál es la entropía de este estado de equilibrio para el universo que se ha estudiado, aunque su cálculo numérico queda fuera de los objetivos de este trabajo.

Por tanto, se ha realizado un *toy model* que propone interpretar la producción de entropía como la distancia entre un estado y el estado separable (Ec. 10). Al mismo tiempo, este modelo ha ilustrado la descripción de una entropía negativa escondida en las correlaciones entre un sistema y

su entorno (Ec. 13), proporcionando una explicación plausible de por qué la entropía total de un universo se mantiene constante mientras que la de sus subsistemas aumenta y resolviendo así el conflicto planteado en la introducción. Además, se ha propuesto una descripción de la irreversibilidad de sistemas abiertos, donde la producción de entropía juega un papel central, a diferencia del intento de estudio a través de la entropía total del conjunto. Tenemos por tanto una interpretación microscópica de la segunda ley de la termodinámica: la irreversibilidad aparece como consecuencia de la omisión de las correlaciones existentes entre los subsistemas. Este modelo, que no pretende simular un sistema físico real aunque sí capturar sus propiedades más fundamentales, abre la puerta a investigaciones tanto teóricas como experimentales.

La interpretación que se ha propuesto en este trabajo permite definir una entropía creciente sin la necesidad de incluir elementos aleatorios ni hacer promedios sobre colectividades: la entropía es consecuencia de la propia evolución unitaria. Además, esta propuesta solo requiere una hipótesis, la cual tiene mucho sentido físico: no podemos observar el universo como un todo; si lo hiciéramos veríamos que es un estado puro y, por tanto, sin entropía.

Finalmente, este formalismo nos permite hacer una interpretación del funcionamiento de la entropía en el *universo*, entendiendo esta vez *universo* como conjunto de todo lo existente. Supongamos que existe una función de ondas que lo describe y, en consecuencia, el *universo* evoluciona unitariamente y no tiene entropía. Gracias al entrelazamiento cuántico, la entropía de cualquier parte del mismo crece con el tiempo y, como resultado, cualquier observador experimenta un aumento de entropía, ya que solamente accede a una parte del *universo* que se va entrelazando cada vez más con todo lo demás.

Referencias

- [1] J. Gemmer, M. Michel, and G. Mahler. *Quantum Thermodynamics: Emergence of Thermodynamic Behavior Within Composite Quantum Systems*. Lecture Notes in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [2] J. W. Gibbs. *Elementary Principles in Statistical Mechanics: Developed with Especial Reference to the Rational Foundations of Thermodynamics*. C. Scribner's sons, 1902.
- [3] Sheldon Goldstein, Joel L. Lebowitz, Roderich Tumulka, and Nino Zanghi. Gibbs and Boltzmann Entropy in Classical and Quantum Mechanics. In: V. Allori (ed.), *Statistical Mechanics and Scientific Explanation: Determinism, Indeterminism and Laws of Nature*. Singapore: World Scientific (2020), page 1903.11870, March 2019.
- [4] Sandu Popescu, Anthony J. Short, and Andreas Winter. Entanglement and the foundations of statistical mechanics. *Nature Physics*, 2(11):754–758, November 2006.
- [5] E.G. Rieffel and W.H. Polak. *Quantum Computing: A Gentle Introduction*. Scientific and Engineering Computation. MIT Press, 2011.
- [6] Thomas M. Cover and Joy A. Thomas. *Elements of Information Theory (Wiley Series in Telecommunications and Signal Processing)*. Wiley-Interscience, USA, 2006.
- [7] Massimiliano Esposito, Katja Lindenberg, and Christian Van den Broeck. Entropy production as correlation between system and reservoir. *New Journal of Physics*, 12(1):013013, jan 2010.

- [8] J M R Parrondo, C Van den Broeck, and R Kawai. Entropy production and the arrow of time. *New Journal of Physics*, 11(7):073008, jul 2009.
- [9] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Physical Review Letters*, 52:1–4, Jan 1984.
- [10] Sho Sugiura and Akira Shimizu. Canonical thermal pure quantum state. *Physical Review Letters*, 111:010401, Jul 2013.
- [11] Johannes Hauschild and Frank Pollmann. Efficient numerical simulations with Tensor Networks: Tensor Network Python (TeNPy). *SciPost Phys. Lect. Notes*, page 5, 2018. Code available from <https://github.com/tenpy/tenpy>.