Demostracion de relacion directa de la entropia con el operador hamiltoneano y la densidad de probabilidad de un sistema cuantico perturbado en forma de commutacion

Enrique Casanova Giovanny Paulino

May 2024

1 Introduccion

Imaginemos un sistema fisico de una particula libre con un hamiltoneano H, el cual los efectors cuanticos se toman en consideracion. Podemos pasarnos a el formalismo de operadores cuanticos, y por tanto tener su operador hamiltoneano correspondiente $\hat{H}$. Esta particula entonces, puede tener una variedad de estados ϕ_i, y por tanto puede ser definible bajo un operador densidad de probabilidad $\hat{\rho}$ del sistema, que nos indica como debe comportarse el sistema.

La entropia se puede definir como:

$$S = -k_B \operatorname{Tr}\{\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\} \tag{1}$$

Y dada la ecuacion de Von Neumann se describe la evolucion temporal del operador densidad en el tiempo:

$$ih \frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}\right] \tag{2}$$

Derivando la ecuacion (1) con respecto al tiempo, queda:

$$\frac{dS}{dt} = -k_B \operatorname{Tr}\left\{\frac{d\hat{\rho}}{dt} \ln \hat{\rho} + \frac{d\hat{\rho}}{dt}\right\} \tag{3}$$

Usando la propiedad de las trazas con respecto a la suma:

$$\operatorname{Tr}\{A + B\} = \operatorname{Tr}\{A\} + \operatorname{Tr}\{B\} \tag{4}$$

Y utilizando tambien:

$$\operatorname{Tr}\{kA\} = k \operatorname{Tr}\{A\} \tag{5}$$

La ecuacion (3) se redefine como:

$$\frac{dS}{dt} = -k_B \beta \operatorname{Tr}\left\{\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right] \ln \hat{\rho}\right\} + \beta \operatorname{Tr}\left\{\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]\right\} \tag{6}$$

Hemos utilizado, $\beta = 1/ih$ y por definicion la traza de la commutacion de dos operadores es nulo:

$$\mathrm{Tr}\Big\{\Big[\hat{A}, \hat{B}\Big]\Big\} = 0 \tag{7}$$

Finalmente simplificando (6), se deriva:

$$\frac{dS}{dt} = \alpha\,\mathrm{Tr}\Big\{\Big[\hat{H}, \hat{\rho}\Big]\ln\hat{\rho}\Big\} \tag{8}$$

Con $\alpha = -k_B\beta$

2 Desarrollo de la commutacion

Tomando el operador $\hat{H}$ como la ecuacion de Schrodinger modificada en una dimension y dependiente del tiempo, para un conjunto de funciones de onda ϕ_i de $\Phi(x,t) = \sum_i A_i\phi_i$, como:

$$\hat{H} = a\partial_x^2 - ih\partial_t \tag{9}$$

Nuestro fin es encontrar una expresion para $\hat{\rho}$ para luego introducir en la ecuacion (8). Esto nos dara una expresion para el cambio de la entropia del sistema.

2.1 Primera perturbacion del operador densidad

Asumimos que el operador densidad puede ser escrito como una serie de perturbaciones, y tomaremos el caso cuando $\epsilon^2 = 0$, entonces:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \epsilon\hat{\rho}_1 \tag{10}$$

El $\hat{\rho}_0$ debe cumplir la simetria y commutacion con $\hat{H}$:

$$\Big[\hat{H}, \hat{\rho}_0\Big] = 0 \tag{11}$$

De esta forma solucionando la ecuacion perturbada:

$$\Big[\hat{H}, \hat{\rho}\Big] = \epsilon\frac{d\hat{\rho}}{dt} \tag{12}$$

Y cuando se introduce la ecuacion (10) en (12), deriva la interesante relacion:

$$\Big[\hat{H}, \hat{\rho}_1\Big] = \frac{d\hat{\rho}_0}{dt} \tag{13}$$

Para poder econtrar la perturbacion del operador densidad de probabiliadad, hay que realizar la conmutacion del operador densidad perturbado con el Hamiltoneano y luego igualarlo con el operador densidad sin perturbar pero derivado con respecto al tiempo. Cuando asumimos a ρ como un operador diferencial de primer orden, (como por ejemplo en la ecuacion continuidad) la commutacion con el operador hamiltoneano es realizable bajo una funcion de prueba, escribimos a $\hat{\rho}$ como:

$$\hat{\rho} = A(x,t)\partial_x + B(x,t)\partial_t + C(x,t) \tag{14}$$

Entonces por esta defincion se deriva las formas de $\hat{\rho}_0$ y $\hat{\rho}_1$:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_0 &= A_0(x,t)\partial_x + B_0(x,t)\partial_t + C_0(x,t) \\ \hat{\rho}_1 &= A_1(x,t)\partial_x + B_1(x,t)\partial_t + C_1(x,t) \end{aligned} \tag{15}$$

2.2 Commutaciones

Luego de la commutacion con $\hat{\rho}_0$ y el hamiltoneano $\hat{H}$, este nos deriva la expresion general, tomando a $h = 1$:

$$\hat{\rho}_0 = d_1(x - at\partial_x) - id_2\partial_x + id_3\partial_t + d_4 \tag{16}$$

Utilizando luego la expresion de la perturbacion de (13), podemos encontrar a $\hat{\rho}_1$, parecida a la anterior, pero extendidad con un grupo mas amplio de constantes d_i, entonces:

$$\hat{\rho}_1 = d_1^*(it\partial_x + \frac{1}{2a}x) + d_2^* - d_3^*(i\partial_x) + d_4^* i\partial_t + d_5^*(it\partial_x - atx) + d_6^*(-ix\partial_t)d_7^*(i\partial_t) \tag{17}$$

Es posible ver que $\hat{\rho}_1$ es mas general que $\hat{\rho}_0$, y que incluso lo contiene dentro de la sumatoria. Luego de esto introducimos la perturbacion a la ecuacion del cambio de la entropia con respectro al tiempo (ec. 8).

$$\frac{dS}{dt} = \alpha \operatorname{Tr}\Big\{ \Big[\hat{H}, \hat{\rho}\Big] \ln \hat{\rho} \Big\} = \alpha \operatorname{Tr}\Big\{ \Big[\hat{H}, \epsilon\hat{\rho}_1\Big] \ln \epsilon\hat{\rho}_1 \Big\} \tag{18}$$

Simplificando por leyes de los logaritmos y agrupando:

$$\frac{dS}{dt} = \alpha \operatorname{Tr}\Big\{ \epsilon \Big[\hat{H}, \hat{\rho}_1\Big] (\ln \hat{\rho}_1 + \ln \epsilon) \Big\} \tag{19}$$

O que es lo mismo que:

$$\frac{dS}{dt} = \alpha \operatorname{Tr}\Big\{ \Big[\hat{H}, \hat{\rho}_1\Big] (\epsilon \ln \hat{\rho}_1 + \epsilon \ln \epsilon) \Big\} \tag{20}$$

Pero $\ln \epsilon \approx 1 - \frac{1}{\epsilon} \rightarrow \epsilon \ln \epsilon = \epsilon - 1 \approx -1$ Finalmente la expresion de la variacion de la entropia con respectro al tiempo es:

$$\frac{dS}{dt} = \alpha \operatorname{Tr}\Big\{ \Big[\hat{H}, \hat{\rho}_1\Big] (\epsilon \ln \hat{\rho}_1 - 1) \Big\} \tag{21}$$

3 Conclusiones

En el caso de que $\epsilon = 0$, la ec. (21) queda dependiente solo de la commutacion:

$$\frac{dS}{dt} = \alpha \operatorname{Tr}\left\{ \left[\hat{H}, \hat{\rho}_1 \right] \right\} \tag{22}$$

Pero por la propiedad (7):

$$\alpha \operatorname{Tr}\left\{ \left[\hat{H}, \hat{\rho}_1 \right] \right\} = 0 \tag{23}$$

Lo cual es un resultado esperado ya que si epsilon es nulo, en la suma de perturbaciones solo tendra influencia el $\hat{\rho}_0$ y este commuta con el hamiltoneano, como fue expresado mas arriba. Este resultado es satisfactorio y no aporta contradiccion a la solucion.

Tambien, lo esperado seria, que cuando operemos la commutacion $\left[\hat{H}, \hat{\rho}_1 \right]$ y tambien $\ln \hat{\rho}_1$ dada un funcion del tiempo y el grado de libertad x. Podamos escribir de manera completa su relacion con el cambio de la entropia esperada de la perturbacion del sistema. Se habia considerado el sistema de esta particula en equilibrio reversible a priori, ya que $\hat{\rho}_0$ commuta con el operador hamiltoneano, asegurando una conservacion de la probabilidad de densidad y la entropia siendo constante por:

$$\frac{dS}{dt} = 0 \rightarrow \left[\hat{H}, \hat{\rho}_0 \right] = 0 \tag{24}$$

Concluimos con la discusion de que esta entropia esta ligada a una sola particula, de donde proviene lo estadistico? Yo personalmente pienso y lo intuyo (mas eso realmente) que esta entropia surge de los estados cuanticos posibles del sistema. Ya que la funcion $\Psi(x, t)$ tiene un numero de estados N puesto en superposicion. Esto crea una matriz densidad de probabilidad de los ψ_i y deriva la entropia de la misma.