

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES



**Revisión de los fundamentos
termodinámicos desde la
perspectiva de la teoría de la
información cuántica**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

FÍSICO

PRESENTA

GERMÁN EDUARDO OSORIO LEIVA

ASESOR: ALONSO BOTERO MEJÍA

BOGOTÁ, D.C.

2017

AUTOR

FECHA

FIRMA

Capítulo 1

Preliminares

Para el trabajo que se presentará en preciso poder dar una base que más adelante será útil en su momento para poder expandir sobre estas ideas en el momento. Con estos preliminares se espera poder poner a los lectores en un mismo contexto. Dado los temas que se trataran se debe dar una explicación sobre la mecánica estadística y un poco de la visión de la mecánica cuántica que es usada en la teoría cuántica de la información. se repasarán algunos puntos importantes para la exposición y se verán algunos problemas que tienen los fundamentos de la mecánica estadística. Por la parte de la cuántica se dará la versión de operadores de densidad que por lo general no se explica mucho, anexo se hablara de conceptos como el entrelazamiento y un poco la idea de decoherencia.

1.1. mecánica estadística

La mecánica clásica ha tenido desde sus inicio varios puntos fuertes, ha ganado el puesto como una teoría bastante buena. Pero como ya se sabe esta teoría tiene bastantes limitaciones en el régimen microscópico no llega a ser la teoría que funciona. Ahora para otras propiedades físicas no se puede extender la mecánica clásica de manera sencilla la termodinámica fue una nueva área que surgió y la mecánica como se conocía desde Newton no fue tan sencilla ni obvia de aplicar. La termodinámica toma sistemas de muchas partículas ...

1.1.1. Teorma de Liouville

Este teorema es de alta importancia en la mecánica estadística para ver sus consecuencias en esta área primero se verá qué declara este teorema para luego ver sus consecuencias. La siguiente demostración del teorema sigue los pasos dados por (pathria,1996).

Se considera un volumen Γ que encierra una región que se quiere estudiar en el espacio de fase, este volumen tiene una superficie σ . El cambio número de puntos (el punto $6 - N$ -dimensional que da la posición y momento de cada partícula en el sistema) dentro de este volumen está dado por

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Gamma} \rho d\Gamma \quad (1.1)$$

donde ρ es la densidad en el espacio de fase, esta función es tal que el número de puntos representativos en el espacio de fase en cierto volumen ($d^{3N}q d^{3N}p$) al rededor de un punto (q, p) viene dado por $\rho(q, p; t) d^{3N}q d^{3N}p$. En la ecuación anterior $d^{3N}q d^{3N}p = d\Gamma$. El cambio neto de puntos que salen de Γ por la superficie σ es

$$\int_{\sigma} \rho \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} d\sigma; \quad (1.2)$$

donde \mathbf{v} es el vector de velocidad del punto representativo en la región de superficie $d\sigma$ y $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector perpendicular a esta superficie con dirección de salida. Por el teorema de la divergencia se tiene:

$$\int_{\Gamma} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) d\Gamma = \int_{\Gamma} \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial}{\partial q_i} (\rho \dot{q}_i) + \frac{\partial}{\partial p_i} (\rho \dot{p}_i) \right) d\Gamma \quad (1.3)$$

Debido a que las cantidad de puntos se conserva en el espacio de fase esto quiere decir que el ensamble que se considera no agrega nuevos miembros ni elimina los que ya se encuentran en este, esto permite concluir:

$$\int_{\Gamma} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) d\Gamma = 0 \quad (1.4)$$

La condición para que esta integral sea cierta para cualquier ω es que el integrando sea cero. Esto nos da la ecuación de continuidad para el espacio de fase.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1.5)$$

usando la forma explícita de la divergencia en 1,5,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \rho \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = 0 \quad (1.6)$$

Por las ecuaciones de Hamilton el último término se cancela. Como ρ depende de p, q y t con los dos primeros términos se pueden organizar para que la ecuación quede de la siguiente forma:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + [\rho, H] = 0 \quad (1.7)$$

la ecuación 1.7 es el teorema de Liouville. Esto lo que dice es que la densidad "local" de puntos vista desde un observador que se mueve con el punto, se mantiene constante en el tiempo. Luego los puntos en el espacio de fase se mueven de la misma manera que un fluido incompresible en el espacio físico.

Esta conclusión es la más clara al obtener el teorema de Liouville pero también hay consecuencias profundas dadas por este. Para ver las consecuencias que brinda el teorema seguiremos a (kardar,2010)

Consecuencias del teorema de Liouville: La primera consecuencia es que al hacer una inversión temporal el corchete de poisson $[\rho, H]$ cambia de signo y esto predice que la densidad revierte su evolución. Es decir que al hacer la transformación $(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) \rightarrow (-\mathbf{p}, \mathbf{q}, -t)$ el teorema de Liouville implica $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = \rho(-\mathbf{p}, \mathbf{q}, -t)$. La segunda es sobre la evolución del promedio de ensamble en el tiempo.

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \int d\Gamma \frac{\partial \rho(p, q, t)}{\partial t} f(p, q) = \sum_{i=1}^{3N} \int d\Gamma f(p, q) \left(\frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} - \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \quad (1.8)$$

En la ecuación anterior se usó el teorema de Liouville poniendo explícitamente el corchete de Poisson. Integrando por partes y recordando que ρ tiende a cero en los límites de la integración se llega a:

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \langle [f, H] \rangle. \quad (1.9)$$

Con esta relación sobre los promedios se puede ver qué condiciones son necesarias para que el ensamble se encuentre en el estado de equilibrio. Dados unos parámetros macroscópicos se sabe que si el ensamble corresponde a uno en el equilibrio los promedios de ensamble deben ser independientes del tiempo. Esto puede lograrse por

$$[\rho_{eq}, H] = 0. \quad (1.10)$$

Una posible solución a la ecuación anterior es que $\rho_{eq}(p, q) = \rho(H(p, q))$ esto es una solución ya que $[\rho(H), H] = \rho'(H)[H, H] = 0$. Esto muestra el supuesto básico de la mecánica estadística, ρ es constante en la superficie de energías constantes H . El supuesto de la mecánica estadística dictamina que el macroestado está dado por una densidad uniforme de microestados. Esto es lo mismo que cambiar la medida de objetiva de probabilidad de la de $\rho(p, q, t)d\Gamma$ a una medida subjetiva. La consecuencia anterior respondería la pregunta de cómo definir equilibrio para partículas en movimiento. Pero para saber si todos los sistemas evolucionan naturalmente al equilibrio y justificar el supuesto básico de la mecánica estadística se debe mostrar que densidades no estacionarias se van acercando a densidades estacionarias ρ_{eq} . Pero esto entra en un problema con la primera consecuencia (inversión temporal), dado una densidad $\rho(t)$ que se acerque a ρ_{eq} habrá otra dada la inversión temporal que se estará alejando de esta densidad de equilibrio. Lo que se ha propuesto normalmente es mostrar que $\rho(t)$ se encontrará en el intervalo cercano a ρ_{eq} una gran parte del tiempo, esto significa que los promedios temporales están dominados por la solución estacionaria. Esta pregunta nos lleva al problema de ergodicidad, ¿es válido igualar el promedio temporal con el promedio de ensamble?.

1.1.2. Ergodicidad

En esta sección se hablará un poco sobre el problema de ergodicidad, se planteará las dificultades y se verán algunas soluciones que se han dado para este problema. Se toca este tema para luego poder ver las soluciones dadas por (Popescu et al. 20..) cómo vuelven inexistente este problema y los problemas que llegan a saltarse sin realmente tener que resolverlos. La mecánica estadística tiene como base el principio de probabilidades iguales generalmente en la literatura siempre se empieza hablando de cómo se

acepta el principio desde una vista de la teoría de probabilidad. Pero hay un concepto que no es profundizado en los textos y es el por qué se debe introducir la probabilidad en estos casos. Libros como (Landau, Lifshitz) empiezan explicando cómo se manejaría un problema de muchas partículas desde la forma clásica, la idea que muestra es que poder describir avogadro número de partículas es complicado porque aunque se tenga las ecuaciones y se pueda de alguna forma (numérica o computacional) de resolver todas las ecuaciones que salen sería imposible llegar a darle condiciones iniciales al problema. Entonces Landau explica que para resolver el problema se tiene en cuenta que la complejidad de la interacciones que hay entre el sistema que se estudia y el ambiente, hace que el sistema se encuentre en muchos estado varias veces, esto da un comportamiento probabilístico al sistema que puede llegar a comportarse como uno aislado. Con esto Landau introduce las probabilidades al sistema sin tener que entrar en un conflicto con la mecánica clásica, nótese que dada esa explicación Landau sigue a formalizar lo dicho y construye la mecánica estadística que se conoce generalmente. Pero hay otra forma de introducir las probabilidades a estos sistemas de muchos grados de libertad y es por hipótesis, en el libro de Khinchin sigue esta filosofía. La hipótesis de ergodicidad postula que el promedio temporal de una cantidad física de un sistema aislado es igual al promedio del ensamble.

Dada una teoría que explique algún fenómeno que nos interese que querrá probar que tan buenos resultados se obtienen de ella. Para esto se comparará con el experimento pero las cantidades físicas en un teoría aparecen como funciones de las variables dinámicas. Pero ya se ve un problema claro en este procedimiento cómo se puede comprar los datos medidos en el laboratorio con las funciones de la teoría; las funciones de las variables dinámicas toman valores diferentes para varios estados del sistema pero para poder comparar los resultados experimentales se debería saber cuál es el estado del sistema o sea dar todas las variables dinámicas para poder así estar seguros que se está comparando los datos con el estado específico. Pero en el caso de un gas sería imposible poder saber todas las posiciones y momentos. Pero hay un punto en este caso y es que al medir una cantidad física esta no se observa de manera instantánea, se demora algún tiempo τ para poder observarla. En el caso de una cantidad termodinámica como

la temperatura el tiempo en que se demora midiendo va desde τ_0 que es el tiempo necesario para que no hayan correlaciones del movimiento molecular y τ_m que es el tiempo máximo en el que la propiedad macroscópica que se mide no cambia. Por ejemplo la temperatura al medirla se necesita esperar un tiempo τ_0 para que se establezca el sistema y el termómetro y la medición se puede tomar hasta τ_m cuando el sistema se vuelva a perturbar. Cualquier cantidad que se mida durante este intervalo se supone que no debe depender de τ en algunos sistemas que llegan al equilibrio τ_m puede extenderse al infinito.

1.2. mecánica cuántica

La mecánica cuántica que por lo general se enseña es la que se empieza con la ecuación de Schrödinger en esta perspectiva los efectos cuánticos salen por probabilidades, pero estas probabilidades son habladas sobre un "ensamble" de sistemas físicos exactamente preparados. O sea las probabilidades que generalmente son usadas en la cuántica son habladas desde la perspectiva de repetir el experimento de una misma manera varias veces siendo este preparado exactamente todas las veces. Pero la mecánica cuántica en estas situaciones habla de que se puede describir todos los miembros del mismo estado por un $|\phi\rangle$ qué pasa si se tiene ensambles de sistemas físicos que son descritos con varios estados, que 30 % del ensamble se describan por $|\phi\rangle$ y el 70 % se describa por $|\Phi\rangle$. Para poner un ejemplo se habla del experimento de Stern-Gerlach. se tiene un horno con átomos de plata que salen por un agujero en el horno y luego son filtrados por un imán que tiene un campo magnético en una dirección específica. Se supone que los átomos pueden tener orientaciones aleatorias del espín, ¿La forma de describir un sistema cuántico dada por la superposición puede describir este ensamble de átomos?. No puede porque los estados descritos por un $|\Phi\rangle$ solo hablan de una dirección específica. Luego para poder hablar de este ensamble se parte otra vez desde el hecho que no se conoce nada de las direcciones de los espines entonces se dirá que habrá 50 % de átomos en el ensamble que tengan $|0\rangle$ y otro 50 % que se encuentren $|1\rangle$. con estos pesos de probabilidad ya se tiene la primera pieza para poder seguir con la formulación del operador densidad. Cabe aclarar que estas probabilidades no son las mismas que las amplitudes de probabilidad que son dadas a la

superposición de estados como:

$$|\Phi\rangle = c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle \quad (1.11)$$

done en este caso c_1 y c_2 dan información sobre el estado dadas las relaciones de fase que tienen, en cambio al hablar de los pesos de probabilidades dados al ensamble estos son las probabilidades que generalmente se tratan en la vida cotidiana. Antes de que el imán afecte los átomos se habla de un ensamble completamente aleatorio. Luego de que los átomos pasen por el aparato de Stern-Gerlachse habla de un ensamble puro, todos los miembros del ensamble pueden ser especificados por el mismo ket.

La formulación matemática de estos ensambles está dada por lo siguiente cada peso probabilístico debe satisfacer la condición de normalización su suma debe ser igual a uno.

Capítulo 2

El entrelazamiento y la mecánica estadística

La idea principal que se quiere mostrar es cómo se puede reemplazar el postulado de probabilidades iguales por un principio canónico general basado en el entrelazamiento cuántico, basado en el entrelazamiento del sistema y el ambiente.

La mecánica clásica nos habla de un sistema físico definido que para todos los tiempos está especificado. Este sistema evoluciona de manera determinista. Pero lo que sorprende al tratar sistemas termodinámicos es que aunque se hable de un sistema clásico este puede mostrar propiedades que dependen de promedios estadísticos. La conexión que hay entre el determinismo y estas probabilidades es una discusión que lleva desde los inicios de la termodinámica. Aunque el planteamiento que se mostrará no necesita de los métodos típicos de la mecánica estadística como por ejemplo: aleatoriedad subjetiva, promedio sobre el ensamble o promedio temporal; Esto le da una fuerza a estas ideas ya que no debe entrar en problemas de ergodicidad.

Este nuevo enfoque se tiene un universo que está compuesto por el sistema y el ambiente. Dando como condición que el ambiente sea lo suficientemente grande. Este universo está descrito por un estado cuántico puro (se conoce el estado de manera exacta) que obedece una restricción global, que el sistema alcance el equilibrio térmico por medio de la interacción mutua (termalización) es un producto del entrelazamiento del

sistema y el ambiente (Popescu et al,2006). Más adelante se le dará una definición más rigurosa que ayudará a dar cotas para la expresión “ambiente suficientemente grande”. Con este enfoque se quiere formular un principio canónico general el sistema estará termalizado para casi todos los estados puros del universo, dando límites cuantitativos. La restricción que se impone no es una específica esto generaliza los resultados tradicionales dados en la literatura donde se toma por restricción la energía. Estos resultados no miran la evolución del sistema pero debido a que la mayoría de los estados del universo están termalizados se preve que no importa el estado inicial cualquier evolución llevará al estado a uno en el equilibrio.

Ya poniendo las ideas más explícitas se supone tener un sistema cuántico aislado y grande que se llamará el universo, que se descompone en dos partes el sistema S y el ambiente E . La dimensión del ambiente es mucho más grande que la del sistema S . Además se le impone una restricción global al universo llamada R . Desde la mecánica cuántica estas condiciones se pueden poner como restricciones en el espacio de Hilbert, restricción de los estados posibles:

$$\mathcal{H}_R \subseteq \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E, \quad (2.1)$$

Donde \mathcal{H}_S y \mathcal{H}_E son los espacios de Hilbert del sistema y el ambiente con dimension d_S y d_E respectivamente. Es bueno recalcar que R es una restricción arbitraria generalmente se toma como la energía del universo. Ahora se define el estado equiprobable del universo bajo R como

$$\mathcal{E}_R = \frac{1}{d_R} \mathbb{1}_R, \quad (2.2)$$

Donde $\mathbb{1}_R$ es el operador identidad (proyección) sobre el espacio de Hilbert \mathcal{H}_R que tiene dimensión d_R . Esto se relaciona con el principio de probabilidades iguales porque este es el estado máximamente mezclado en \mathcal{H}_R por ser así todos los estados bajo la restricción de R tienen la misma probabilidad de salir.

Definimos Ω_S como el estado canónico que está restringido por R cuando el universo se encuentra en el estado \mathcal{E}_R . Esto significa que si se hace una traza parcial al universo sobre el ambiente da como resultado el estado canónico:

$$\Omega_S = Tr_E \mathcal{E}_R. \quad (2.3)$$

Aquí se hace un supuesto importante y es que el universo está en un estado puro $|\phi\rangle$ y no en un estado mixto $\mathcal{E}_{\mathcal{R}}$, esto quiere decir que se conoce todo lo que es permitido por la mecánica cuántica del universo si estuviese en un estado mixto significaría que nosotros no tenemos toda la información que se pudiese tener. Ahora lo que se quiere ver es que aun que el estado del universo sea puro el estado reducido del sistema,

$$\rho_S = \text{Tr}_E |\phi\rangle \langle\phi| \quad (2.4)$$

se acerca al estado canónico para la gran mayoría de los casos

$$\rho_S \approx \Omega_S. \quad (2.5)$$

O sea que para casi todos los estados puros $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{R}}$ del universo el sistema se comporta como si el universo estuviese en el estado mixto equiprobable $\mathcal{E}_{\mathcal{R}}$. Siendo este el principio general canónico.

Clarificando la idea, el estado canónico Ω_S del sistema es el estado del sistema cuando el universo se encuentra en el estado equiprobable $\mathcal{E}_{\mathcal{R}}$. Se puede interpretar el principio general canónico como un principio que estipula que las probabilidades iguales del sistema son aparentes. Porque para casi cualquier estado del universo que sea puro, un subsistema de este universo que cumpla con ser lo suficientemente pequeño se comporta como si el universo estuviese en el estado equiprobable $\mathcal{E}_{\mathcal{R}}$. Cabe recordar que aún no se ha especificado la restricción R entonces todo este análisis es general, la restricción no necesariamente debe ser la energía u otras cantidades que se conserven. Esto hace que Ω_S no deba ser obligatoriamente es el estado canónico usual, puede ser el gran canónico o cualquier otro que sea acorde con la restricción. Este principio puede ser de utilidad cuando la interacción entre el ambiente y el sistema no es débil como siempre se toma.

2.1. formulación matemática

Ahora se procederá a especificar lo dicho anteriormente en un contexto matemático. Lo primordial es decir cuál será la distancia que usaremos para darle un sentido de cercanía a los estados ρ_S y Ω_S . La distancia a usar es una bastante conocida en la teoría cuántica de la información, la

distancia de traza. Esta se define como:

$$D(\rho_S, \Omega_S) = \frac{1}{2} \text{Tr} |\rho_S - \Omega_S| = \frac{1}{2} \text{Tr} \sqrt{(\rho_S - \Omega_S)^\dagger (\rho_S - \Omega_S)}. \quad (2.6)$$

Esta medida cuantifica que tan difícil es diferenciar ρ_S y Ω_S por mediciones cuánticas. Un poco de notación $\langle . \rangle$ es el promedio sobre todos los estados $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{R}}$ de acuerdo a la medida estandar (unitariamente invariante). Esta medida se usa para hallar volúmenes de conjuntos de estados. Luego por esto se sabe que $\Omega_S = \langle \rho_S \rangle$.

Entonces el teorema central de este capítulo es:

Teorema 1: Para un estado escogido de manera aleatoria $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{R}} \subseteq \mathcal{H}_{\mathcal{S}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{E}}$ y un $\epsilon > 0$ arbitrario, la distancia entre la matriz densidad reducida del sistema $\rho_S = \text{Tr}(|\phi\rangle \langle \phi|)$ y el estado canónico $\Omega_S = \text{Tr} \mathcal{E}_{\mathcal{R}}$ esta dado probabilísticamente por

$$\text{Prob}[\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \geq \eta] \leq \eta', \quad (2.7)$$

Donde

$$\|\rho_S - \Omega_S\|_1 = 2D(\rho_S, \Omega_S) \quad (2.8)$$

$$\eta = \epsilon + \sqrt{\frac{d_S}{d_E^{eff}}}, \quad (2.9)$$

$$\eta' = 2 \exp(-C d_R \epsilon^2). \quad (2.10)$$

y las constantes son: $C = (18\pi^3)^{-1}$, $d_R = \dim \mathcal{H}_{\mathcal{R}}$, $d_S = \dim \mathcal{H}_{\mathcal{S}}$. d_E^{eff} es la medida efectiva del tamaño del ambiente,

$$d_E^{eff} = \frac{1}{\text{Tr} \Omega_E^2} \geq \frac{d_R}{d_S}. \quad (2.11)$$

Donde $\Omega_E = \text{Tr}_{\mathcal{S}} \mathcal{E}_{\mathcal{R}}$. Ambas cantidades η y η' serán pequeñas esto implica que el estado estará cercano al estado canónico con alta probabilidad cuando la dimensión efectiva del ambiente sea mucho más grande que la del sistema (es decir $d_E^{eff} \gg d_S$) y $d_R \epsilon^2 \gg 1 \gg \epsilon$. Esta última condición se puede asegurar cuando el espacio accesible total es grande (es decir

$d_R \gg 1$), escogiendo $\epsilon = d_r^{-\frac{1}{3}}$.

Ya con esto se le da un significado cuantitativo de lo que se ha ido explicando hasta ahora. Además también se dan unas cotas explícitas a cuando se habla de la "mayoría" de los estados. Se tiene una cota exponencialmente pequeña sobre la probabilidad de encontrar un estado lejano del canónico.

2.2. Lema de Levy

El teorema anterior tiene como base principal el lema de Levy (referencias). Este dice que al seleccionar un punto ϕ aleatoriamente de una hiperesfera de dimensión alta y que $f(\phi)$ no cambie muy rápido, entonces $f(\phi) \approx \langle f \rangle$ con alta probabilidad, Más exactamente:

Lema de Levy: Dada una función $f : \mathbb{S}^d \rightarrow \mathbb{R}$ definida en la hiperesfera \mathbb{S}^d , y un punto $\phi \in \mathbb{S}^d$ es escogido de manera aleatoria uniforme,

$$Prob[|f(\phi) - \langle f \rangle| \geq \epsilon] \leq 2\exp\left(-\frac{2C(d+1)\epsilon^2}{\eta^2}\right) \quad (2.12)$$

donde η es la constante de Lipschitz de f , dado por $\eta = \sup |\nabla f|$ y $C = (18\pi^3)^{-1}$.

Gracias a la normalización, los estados puros en $\mathcal{H}_{\mathcal{R}}$ se pueden representar como puntos sobre la superficie de una hiperesfera de dimensión $2d_R - 1$, o sea \mathbb{S}^{2d_R-1} . Luego e puede aplicar este lema a estado cuánticos ϕ aleatoriamente seleccionados. Para los estados seleccionados aleatoriamente $\phi \in \mathcal{H}_{\mathcal{R}}$, se desea mostrar que $\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \approx 0$ con alta probabilidad.

2.3. Demostración del teorema 1

Ya con el teorema de Levy como herramienta se usará este para poder demostrar el teorema 1. Para usar el teorema de Levy para el problema actual se dice que $f(\phi) = \|\rho_S - \Omega_S\|_1$. Antes de seguir con la demostración

se quiere dar la idea de qué habla la constante de Lipschitz que fue nombrada anteriormente. Para esto se debe ver qué significa que una función sea Lipschitz continua.

La definición general de continuidad es: Sea $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ donde I puede ser un intervalo abierto (a, b) o uno cerrado $[a, b]$, además $C \in I$. Se dice que f es continua en $C \iff \forall \epsilon > 0 \exists \delta > 0$ tal que $|x - c| \rightarrow |f(x) - f(c)| < \epsilon$. Esta es la definición que en general se maneja pero hay sutilezas en esta definición que no siempre son mostradas como por ejemplo que δ depende de donde se ponga el punto C , esto se ve claramente en la siguiente función: $f : (0, 1) \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{x}$ al C estar más lejos del 0 permite un δ más grande pero al acercarse al 0 el δ debe ser más pequeño. La continuidad de Lipschitz permite que se defina un δ constante sin importar donde se encuentre el C . Se es Lipschitz continuo si

$$|f(x) - f(y)| \leq \eta |x - y|, \quad (2.13)$$

con η constante esto permite poner $|f(x) - f(y)| < \epsilon \rightarrow \delta < \frac{\epsilon}{\eta}$. Ahora si f es derivable y ∇f es acotado, x y y dados existe ξ entre x, y tal que:

$$f(x) - f(y) = \nabla f(\xi)(x - y) \quad (2.14)$$

$$\rightarrow |f(x) - f(y)| \leq |\nabla f(\xi)| |x - y| \quad (2.15)$$

$$\rightarrow |f(x) - f(y)| \leq \sup |\nabla f(\xi)| |x - y| \quad (2.16)$$

Como ∇f es acotado se tiene que $\sup |\nabla f(\xi)| = \eta$.

Dado esta introducción a la continuidad de Lipschitz va encontrará una cota para la constante η de la función $f(\phi) = \|\rho_S - \Omega_S\|_1$. Entonces para poder lograr esto se procederá de la siguiente forma se definen dos estados reducidos $\rho_1 = \text{Tr}_E(|\phi_1\rangle \langle \phi_1|)$ y $\rho_2 = \text{Tr}_E(|\phi_2\rangle \langle \phi_2|)$, Ahora se tiene

$$|f(\phi_1) - f(\phi_2)|^2 = \|\rho_1 - \Omega\|_1 - \|\rho_2 - \Omega\|_1^2. \quad (2.17)$$

como $\|M\|_1$ es una distancia (esto es $d(\rho_1, \Omega) = \|\rho_1 - \Omega\|_1$) es cierto para un espacio métrico

$$|d(x, z) - d(y, z)| \leq d(x, y) \quad (2.18)$$

Por lo tanto

$$\| \rho_1 - \Omega \|_1 - \| \rho_2 - \Omega \|_1 \leq \| \rho_1 - \rho_2 \|_1^2 = \| \text{Tr}_E(|\phi_1\rangle \langle \phi_1| - |\phi_2\rangle \langle \phi_2|) \|_1^2. \quad (2.19)$$

Como hay una cota a la norma de una traza parcial,

$$\| \text{Tr}_B(M) \|_p \leq [\dim(\mathcal{H}_B)]^{\frac{p-1}{p}} \| M \|_p. \quad (2.20)$$

entonces por la cota anterior

$$\| \text{Tr}_E(|\phi_1\rangle \langle \phi_1| - |\phi_2\rangle \langle \phi_2|) \|_1 \leq \| |\phi_1\rangle \langle \phi_1| - |\phi_2\rangle \langle \phi_2| \|_1. \quad (2.21)$$

Se tiene que :

$$\| \rho_1 - \rho_2 \|_1^2 \leq \| |\phi_1\rangle \langle \phi_1| - |\phi_2\rangle \langle \phi_2| \|_1^2 \quad (2.22)$$

Usando la hermiticidad de ρ y el teorema espectral se puede descomponer $\rho = UDU^\dagger$ donde U es un operador unitario y D es diagonal. Además por las propiedades de la traza $\text{Tr}(\sqrt{UD^2U^\dagger}) = \text{Tr}(U\sqrt{D^2U^\dagger}) = \text{Tr}(\sqrt{D^2})$ se llega a

$$\| |\phi_1\rangle \langle \phi_1| - |\phi_2\rangle \langle \phi_2| \|_1^2 = 4(1 - |\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle|^2) \quad (2.23)$$

también

$$4(1 - |\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle|^2) \leq 4|\phi\rangle - |\phi\rangle|^2. \quad (2.24)$$

Uniendo todo los pasos anteriores

$$|f(\phi_1) - f(\phi_2)|^2 \leq 4|\phi\rangle - |\phi\rangle|^2 \quad (2.25)$$

o sea

$$|f(\phi_1) - f(\phi_2)| \leq 2|\phi\rangle - |\phi\rangle|, \quad (2.26)$$

Con esto se muestra que $\eta \leq 2$.

Habiendo dado una cota para η ahora se usará el lema de Levy para la función $f(\phi) = \|\rho_S - \Omega_S\|_1$ recordando que se reemplazará d en el lema por $d = 2d_R - 1$. sustituyendo en el teorema se tiene:

$$2\exp(-\frac{2C(d+1)\epsilon^2}{\eta^2}) = 2\exp(-\frac{4Cd_R\epsilon^2}{\eta^2}) \quad (2.27)$$

como $\eta \leq 2$

$$2\exp(-Cd_R\epsilon^2) \geq 2\exp(-\frac{4Cd_R\epsilon^2}{\eta^2}) \geq \text{Prob}[|f(\phi) - \langle f \rangle| \geq \epsilon] \quad (2.28)$$

mirando más atentamente $|f(\phi) - \langle f \rangle| \geq \epsilon$, por ser una distancia $\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \geq 0$ entonces

$$\|\rho_S - \Omega_S\|_1 - \langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle \geq \epsilon. \quad (2.29)$$

Nombrando a $\mu = \epsilon + \langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle$ y $\mu' = 2\exp(-Cd_R\epsilon^2)$ esto permite organizar lo anterior así:

$$\text{Prob}[\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \geq \mu] \leq \mu'. \quad (2.30)$$

Ahora para poder obtener el resultado se debe acotar μ . Se asegura que ϵ y μ' son cantidades pequeñas al escoger $\epsilon = d_R^{-1/3}$ porque $d_R \gg 1$. Se quiere ahora ponerle un cota a $\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle$ para esto primero se acotará dando los límites por las trazas y luego se calcularán estas para poder dejar la cota en terminos de las dimensiones del sistema. Primero se procederá a encontrar la relación entre $\|\rho_S - \Omega_S\|_1$ y $\|\rho_S - \Omega_S\|_2$ esto se hará para tener una facilidad de manejo mayor ya que la segunda norma (Hilbert-Schmidt) permite un mejor tratamiento.

La relación entre estas dos normas se puede ver desde el manejo de amtrices. Sea M una matriz $n \times n$ se sabe que si M tiene λ_i valores propios entonces:

$$\text{Tr} M = \sum_i \lambda_i \quad (2.31)$$

con esto se puede escribir de manera explícita la norma de traza

$$\|M\|_1^2 = (\text{Tr}|M|)^2 = n^2 \left(\frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i| \right)^2. \quad (2.32)$$

Como la función x^2 es convexa se puede usar la desigualdad de Jensen que dice: sean $a_1, a_2, \dots, a_n \leq 0$ constantes y $a_1 + \dots + a_n = 1$ sea $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ donde I es un intervalo, $x_1, \dots, x_n \in I$ entonces

$$f(a_1x_1 + \dots + a_nx_n) \leq a_1f(x_1) + \dots + a_nf(x_n), \quad (2.33)$$

con esto se puede decir que

$$\left(\frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i|\right)^2 \leq \frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i|^2. \quad (2.34)$$

Pero se sabe que

$$\sum_i |\lambda_i|^2 = \text{Tr}(|M|^2) = \|M\|_2^2 \quad (2.35)$$

se llega a la conclusión que

$$\|M\|_1^2 = n^2 \left(\frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i|\right)^2 \leq n^2 \frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i|^2 = n \|M\|_2^2 \quad (2.36)$$

Gracias a lo anterior se tiene que

$$\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \leq \sqrt{d_S} \|\rho_S - \Omega_S\|_2 \quad (2.37)$$

Esta relación se usará un poco más adelante.

Volviendo al cálculo de $\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle$ se recuerda que $\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 \geq 0$ donde $\langle f \rangle = \int_{\mathcal{M}} f(x)p(x)dx$. Tomando a f como $f = \|\rho_S - \Omega_S\|_2$ entonces

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_2 \rangle \leq \sqrt{\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_2^2 \rangle} \quad (2.38)$$

acordándose que este promedio es tomado a los estados $|\phi\rangle$, Ω_S es constante. Por hermiticidad de $\rho_S - \Omega_S$

$$\sqrt{\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_2^2 \rangle} = \sqrt{\langle \text{Tr}(\rho_S - \Omega_S)^2 \rangle} \quad (2.39)$$

$$\sqrt{\langle \text{Tr}(\rho_S - \Omega_S)^2 \rangle} = \sqrt{\langle \text{Tr}(\rho_S^2) \rangle - 2\text{Tr}(\langle \rho_S \rangle \Omega_S) + \text{Tr}(\Omega_S^2)} \quad (2.40)$$

ya que $\langle \rho_S \rangle = \Omega_S$

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_2 \rangle \leq \sqrt{\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_2^2 \rangle} = \sqrt{\langle Tr(\rho_S)^2 \rangle - Tr(\Omega_S^2)} \quad (2.41)$$

Por la relación entre la norma de traza y la norma de Hilbert-Schmidt se concluye lo que se quería

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle \leq \sqrt{d_S(\langle Tr(\rho_S)^2 \rangle - Tr(\Omega_S^2))}. \quad (2.42)$$

Aunque ya se ha acotado $\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle$ se quiere relacionar esta cota con las dimensiones del sistema para esto se procederá a demostrar la desigualdad

$$\langle Tr\rho_S^2 \rangle \leq Tr\langle \rho_S \rangle^2 + Tr\langle \rho_E \rangle^2 \quad (2.43)$$

Para poder hacer este cálculo se introduce una segunda copia del espacio de Hilbert. Ahora el problema se trabaja en $\mathcal{H}_{\mathcal{R}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{R}'}$, donde $\mathcal{H}_{\mathcal{R}'} \subseteq \mathcal{H}_{\mathcal{S}'} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{E}'}$. Percatándose de lo siguiente

$$Tr_S(\rho_S)^2 = \sum_k (\rho_{kk})^2 = \sum_{k,l,k',l'} (\rho_{kl})(\rho_{k'l'}) \langle kk'|ll' \rangle \langle l'l'|kk' \rangle. \quad (2.44)$$

Sea $F_{SS'}$ la operación "flip" $S \longleftrightarrow S'$:

$$F_{SS'} = \sum_{S,S'} |s'\rangle \langle s|_S \otimes |s\rangle \langle s'|_{S'} \quad (2.45)$$

Entonces

$$\sum_{k,l,k',l'} (\rho_{kl})(\rho_{k'l'}) \langle kk'|ll' \rangle \langle l'l'|kk' \rangle = Tr_{SS'}((\rho_S \otimes \rho_{S'})F_{SS'}) \quad (2.46)$$

$$Tr_{SS'}((\rho_S \otimes \rho_{S'})F_{SS'}) = Tr_{RR'}((|\phi\rangle \langle \phi| \otimes |\phi\rangle \langle \phi|)_{RR'}(F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'})) \quad (2.47)$$

Pero como se quiere $\langle Tr(\rho)^2 \rangle = \int Tr(\rho)^2 d\phi$. Entonces para resolver esto se requiere saber $V = \int (|\phi\rangle \langle \phi| \otimes |\phi\rangle \langle \phi|) d\phi$. V puede representarse como:

$$V = \alpha \Pi_{RR'}^{sim} + \beta \Pi_{RR'}^{anti}, \quad (2.48)$$

α y β son constantes donde $\Pi_{RR'}^{sim/anti}$ son proyectores en el subespacio simétrico y antisimétrico de $\mathcal{H}_{\mathcal{R}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{R}'}$. Esto es posible por la invarianza unitaria de V . Debido a que

$$(|\phi\rangle \langle \phi| \otimes |\phi\rangle \langle \phi|) \frac{1}{\sqrt{2}}(|ab\rangle - |ba\rangle) = 0 \forall a, b, \phi \quad (2.49)$$

la parte antisimétrica siempre debe ser 0 entonces $\beta = 0$. Por la normalización de V , $\alpha = \frac{1}{\dim(RR'_{sim})}$ la dimensión está dada por el álgebra lineal $\dim(RR'_{sim}) = \frac{d_R(d_R+1)}{2}$. Entonces

$$V = \langle |\phi\rangle \langle \phi| \otimes |\phi\rangle \langle \phi| \rangle = \frac{2}{d_R(d_R+1)} \Pi_{RR'}^{sim}. \quad (2.50)$$

luego

$$\langle Tr(\rho)^2 \rangle = Tr_{RR'} \left(\left(\frac{2}{d_R(d_R+1)} \Pi_{RR'}^{sim} \right) (F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'}) \right) \quad (2.51)$$

Al ser $\Pi_{RR'}^{sim}$ un proyector simétrico se puede cambiar por

$$\Pi_{RR'}^{sim} = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_{RR'} + (F_{RR'})) \quad (2.52)$$

donde $F_{RR'}$ es el operador "flip" $R \longleftrightarrow R'$. Como $F_{RR'}$ es el operador que actúa sobre RR' este puede escribirse como $F_{RR'} = \mathbb{1}_{RR'}(F_{SS'} \otimes F_{EE'})$.

Compilando lo anterior

$$\langle Tr \rho^2 \rangle = Tr_{RR'} \left(\frac{1}{d_R(d_R+1)} (\mathbb{1}_{RR'} + \mathbb{1}_{RR'}(F_{SS'} \otimes F_{EE'})) (F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'}) \right) \quad (2.53)$$

Distribuyendo y sabiendo que al hacer dos veces la operación "flip" es lo mismo que no haber hecho nada se sigue

$$Tr_{RR'} \left(\frac{\mathbb{1}_{RR'}}{d_R(d_R+1)} F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'} + \frac{\mathbb{1}_{RR'}}{d_R(d_R+1)} (\mathbb{1}_{SS'} \otimes F_{EE'}) \right). \quad (2.54)$$

Por las propiedades aditivas de la traza junto con $\mathbb{1}_R \otimes \mathbb{1}_{R'}$ y $\frac{1}{d_R(d_R+1)} \leq \frac{1}{d_R^2}$ se llega a:

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{RR'} \left(\frac{\mathbb{1}_{RR'}}{d_R(d_R+1)} (F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'}) \right) + \text{Tr}_{RR'} \left(\frac{\mathbb{1}_{RR'}}{d_R(d_R+1)} (\mathbb{1}_{SS'} \otimes F_{EE'}) \right) \\ & \leq \text{Tr}_{RR'} \left(\frac{\mathbb{1}_R}{d_R} \otimes \frac{\mathbb{1}_{R'}}{d_R} (F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'}) \right) + \text{Tr}_{RR'} \left(\frac{\mathbb{1}_R}{d_R} \otimes \frac{\mathbb{1}_{R'}}{d_R} (\mathbb{1}_{SS'} \otimes F_{EE'}) \right) \end{aligned}$$

Recordando que $\frac{\mathbb{1}_R}{d_R} = \mathcal{E}_R$ y $\Omega_S = \text{Tr}_E(\mathcal{E}_R)$ se tiene que:

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{RR'} \left(\frac{\mathbb{1}_R}{d_R} \otimes \frac{\mathbb{1}_{R'}}{d_R} (F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'}) \right) + \text{Tr}_{RR'} \left(\frac{\mathbb{1}_R}{d_R} \otimes \frac{\mathbb{1}_{R'}}{d_R} (\mathbb{1}_{SS'} \otimes F_{EE'}) \right) \\ & = \text{Tr}_{SS'}((\Omega_S \otimes \Omega_S) F_{SS'}) + \text{Tr}_{EE'}((\Omega_E \otimes \Omega_E) F_{EE'}) \end{aligned}$$

Por la ecuación 2.46 se tiene lo que se quería

$$\langle \text{Tr}_S \rho_S^2 \rangle \leq \text{Tr}_S \Omega_S^2 + \text{Tr}_E \Omega_E^2 \quad (2.55)$$

y esto es lo mismo que

$$\langle \text{Tr}_S \rho_S^2 \rangle \leq \text{Tr}_S \langle \rho_S \rangle^2 + \text{Tr}_E \langle \rho_E \rangle^2 \quad (2.56)$$

con el resultado 2.37 se obtiene

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle \leq \sqrt{d_S (\text{Tr}_E \langle \rho_E \rangle^2)} \quad (2.57)$$

Sea $d_E^{eff} \equiv \frac{1}{\text{Tr}_E \Omega_E^2}$ la cual es la dimensión efectiva del ambiente en el estado canónico este mide la dimensión del espacio en el que el ambiente es más probable de estar, como $\langle \rho_E \rangle = \Omega_E$ se concluye que

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle \leq \sqrt{\frac{d_S}{d_E^{eff}}} \quad (2.58)$$

Cuando el ambiente es mucho más grande que el sistema μ y μ' serán pequeñas ($d_E^{eff} \gg d_S$) implicando $\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \approx 0$ con alta probabilidad.

Capítulo 3

Evolución hacia el equilibrio

Ya después de haber dado una explicación más sólida a los principios de la mecánica estadística la siguiente pregunta que debe responderse es, ¿cómo ocurre la termalización?. ¿ Esta termalización puede deducirse de las ecuaciones básicas ?. Este será la pregunta que Linden et al. quisieron atacar se procederá a mostrar sus resultados del artículo (Linden et al. ,2008). Una de tantas dificultades en la mecánica estadística es que sus principios se formulan desde la ignorancia subjetiva y los promedios de ensamble. Estos son principios físicos bastantes discutible. Recientemente se ha dado cuenta que los promedio de ensamble y la ignorancia subjetiva no son necesarios, Porque sistemas cuánticos individuales pueden mostrar características estadísticas. Esto es debido al entrelazamiento lo cual es un efecto cuántico, esto hace que la falta de conocimiento ya no sea subjetiva sino objetiva. Por la teoría cuántica se sabe que aunque se tenga todo el sistema descrito por la función de onda, la cual da un conocimiento completo del sistema, los subsistemas de este pueden seguir en un estado desconocido. De forma más específica el sistema puede estar en un estado puro mientras que un subsistema puede estar en un estado mixto. En este caso no se puede conocer el subsistema ya que este se comporta como una densidad de probabilidad. La comparación con la contraparte clásica es sorprendente porque tener un conocimiento completo del sistema clásico es saber cualquier subsistema. Luego si se aplica una teoría clásica las probabilidades aparecen como falta del conocimiento posible de obtener, si se llega a conocer todo no habrían probabilidades. Ya con resultados del capítulo anterior sobre: la

mayoría de los estados puros de un sistema los subsistemas (suficientemente pequeños) están en un estado canónico. Este resultado aunque bastante general queda limitado por hablarse de un tiempo específico y habla de estados genéricos. Ahora se quiere ver su evolución temporal y en cuales circunstancias los sistemas llegan al equilibrio y fluctúan cerca a este. Los estados lejanos al equilibrio son no genéricos y serán tratados aquí. Para saber cómo moverse en este tema se va a determinar qué significa que un sistema esté termalizado. Para esto se darán las siguientes ideas:

Equilibrio: Se dice que un sistema se equilibra si este evoluciona a un estado específico (puede ser puro pero en general es mixto) y se mantiene allí por casi todo el tiempo. Dado esto no es importante cuál sea el estado de equilibrio este puede ser la distribución de Boltzmann o no. Además se puede relajar las condiciones de independencia del estado inicial, o sea puede depender del estado inicial del subsistema y/o del estado inicial del ambiente de forma arbitraria. Esta definición de equilibrio es la parte más intuitiva a lo que se refiere sobre termalización. El hecho de que un estado se mantenga por un largo periodo de tiempo con las mismas características es lo que se piensa al pensar en equilibrio. Aunque esto sería una forma general de hablar sobre equilibrio porque se da mucha libertad al estado y sus dependencias sobre el ambiente. Para seguir una idea más rigurosa de equilibrio se especifica lo siguiente.

Independencia del ambiente: El estado de equilibrio del sistema no debería depender exactamente del estado inicial del baño. Esto quiere decir que el baño debe tener unos parámetros macroscópicos (como la temperatura) tales que al final llegan al equilibrio el estado dependa de la temperatura del baño. Con esto se puede restringir un poco más a lo que se llamará equilibrio. Esta idea también es proveniente de lo que normalmente se espera del equilibrio porque los parámetros macroscópicos son los que en general se tienen completamente especificados y se ve que para los mismos se tiene un mismo equilibrio. El estado exacto del baño no debería jugar un papel tan importante ya que para los mismos parámetros macroscópicos pueden haber varios estados del baño que concuerden con ellos. Como se supone que con ciertos parámetros macroscópicos dados un subsistema llegará al equilibrio sin importar cual ha sido su estado inicial. Pueden dos subsistemas preparados idénticamente haber sido iniciados en un estado A y el otro en el estado B, el equilibrio se obtendrá así hayan empezado de

maneras diferentes. Esto motiva lo siguiente

Independencia del estado del subsistema: Si el subsistema es pequeño en comparación con el ambiente el estado de equilibrio del subsistema debería ser independiente de su estado inicial.

Pero para poder corroborar y unir estas ideas con los resultados ya bien conocidos se impone una última restricción

Forma Boltzmanniana del estado de equilibrio: Bajo condiciones del estado inicial y el hamiltoniano, el estado de equilibrio del subsistema puede ser escrito como $\rho_S = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{H_S}{k_B T}\right)$ la forma familiar ya conocida. Descomponiendo el problema de la termalización de esa forma permite ver cada uno de los aspectos por separado además de darle una generalidad a todo el tratamiento sin tener que restringirse a situaciones que usualmente se le asocian a la termalización. Por ejemplo no se debe quedar en el régimen de corta o débil interacción entre el sistema y el baño; decir que el baño es uno típico (Dado una temperatura o rango de energía), la energía puede llegar a ser una cantidad extensiva. Pueden tomarse situaciones en las que el sistema no llegue a equilibrio. Se mostrará con suposiciones no muy fuertes que los primeros dos supuestos (Equilibrio e independencia del ambiente) son propiedades de sistemas cuánticos.

3.0.1. contexto y definiciones

Nociones que se usarán

EL sistema: Se tiene un sistema cuántico grande descrito por un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Se toma un subsistema pequeño S y lo demás será el ambiente E . Esto lleva a descomponer \mathcal{H} como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$, con dimensiones d_S y d_E respectivamente. Para evitar espacios de dimensión infinita se introduce un tope para las altas energías así mantener la dimensión finita. Además se eliminarían términos de interacción del hamiltoniano que lo lleven a subespacios no permitidos. Aún no se ha especificado nada sobre el subsistema o el ambiente. Cualquier descomposición del espacio de Hilbert especifica un subsistema y un baño. El subsistema S puede ser cualquier cosa desde una partícula hasta el conjunto de partículas distribuidas por todo el baño.

El Hamiltoniano: la evolución de todo el sistema viene dado por

$$H = \sum_k E_k |E_k\rangle \langle E_k|, \quad (3.1)$$

$|E_k\rangle$ es el estado propio con energía E_k . Al Hamiltoniano anterior se le dará la siguiente y única restricción: Que tenga brechas de energías no degeneradas. Esta restricción quiere decir que un hamiltoniano tiene brechas de energía no degeneradas si para cualquier diferencia de energías propias que sea diferente acero determina los valores de energía involucrados. Por ejemplo si se tiene 4 valores propios de energía E_k, E_l, E_m, E_n entonces $E_k - E_l = E_m - E_n$ implica $k = l$ y $m = n$, o $k = m$ y $l = n$. Esto implica que los niveles de energía no son iguales para diferentes estados (no son degenerados). Esta restricción del Hamiltoniano implica que el subsistema y el baño no importa como se divida siempre van a estar interactuando. Esto excluye los hamiltonianos no interactuantes ($H = H_S + H_E$). Este tipo de hamiltonianos tienen muchas brechas de energía degeneradas. véase que si no hay interacción en el hamiltoniano la energía es $E = E_S + E_E$ sean E_1, E_2, E_3, E_4 tales que se satisfaga $E_i = E_i^S + E_i^E$ $i = 1, 2, 3, 4$. Esto lleva a una brecha degenerada. Este supuesto no es tan fuerte como pueda llegar a parecer porque cualquier perturbación que se le haga al Hamiltoniano romperá las degeneraciones sin importar lo pequeña que sea la perturbación. Aunque estos cambios se tardan en hacer efecto sobre la evolución del sistema las escalas temporales no son importantes en este momento. Con este supuesto se puede hablar de interacciones complejas que por lo general no son muy tratados como interacciones de larga distancia o interacciones entre todas las partículas esto hace que la energía no llegue a ser una cantidad extensiva. **Notaciones** El estado global puro del sistema se escribirá como $|\phi(t)\rangle$ en un tiempo t . Su matriz de densidad se escribirá $\rho(t) = |\phi(t)\rangle \langle \phi(t)|$. El estado del subsistema se encontrará al sacarle la traza $\rho_S = \text{Tr}_B \rho(t)$ de manera similar el estado del ambiente está dado por $\rho_B = \text{Tr}_S \rho(t)$. El promedio temporal del sistema está dado por

$$\omega = \langle \rho(t) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \rho(t) dt \quad (3.2)$$

de la misma forma se define ω_S y ω_B como el promedio temporal respectivamente para el sistema y el baño.

3.0.2. Equilibración

El punto principal que se quiere dar a entender viene en forma del siguiente resultado: Para cada estado puro de un sistema cuántico que se compone por un número grande de estados de energía propios y el cual evoluciona bajo un Hamiltoniano que tiene brechas de energías no degeneradas y por lo demás arbitrario, es tal que cada subsistema pequeño llegará al equilibrio. Esto quiere decir que todos los subsistemas pequeños cumplirán con las ideas anteriores sobre equilibrio exactamente que el sistema evolucionará a un estado particular y se quedará cercano a él o en este durante la mayoría del tiempo. Hay en este resultado un requerimiento que anteriormente no fue nombrado, el requerimiento de una cantidad grande de estados propios de energía. La necesidad de que el sistema tenga muchos estados propios de energía es equivalente a decir que el estado variará bastante durante su evolución temporal. viendo el caso trivial de un solo estado propio de energía es claro que este no cambiará para nada. Este caso tan particular no llega a ser de mucho interés porque en el sentido anterior de equilibrio no cambia para nada y se diría que este se encuentra ya en equilibrio. Los resultados que se quieren mostrar tomarán estados lejanos de equilibrio sistemas que no se encuentre en el pero aquí llegan las otras suposiciones hechas anteriormente para que el subsistema no dependa del estado inicial este debe perder la información entonces si el subsistema empieza lejano al equilibrio este pasará por muchos estados en su camino al equilibrio lo cual implica que todo el sistema también evolucione en muchos estados. El hecho de que el subsistema haya llegado al equilibrio no significa que el sistema deje de evolucionar debido a la unitariedad este debe seguir evolucionando con la misma proporción de antes. Para que los estados en los que el subsistema se encuentre en no equilibrio ocurran poco, los estados del universo en los que el subsistema se encuentre en esas condiciones deben ser una fracción muy pequeña del total de estados por donde pasa el universo. Por esto el universo debe pasar por muchos estados y el requerimiento de que tenga muchos estados propios de energía se valida. También se muestra que lo siguiente es suficiente: Cuando el estado de todo el sistema pasa por muchos estados diferentes cualquier estado pequeño del subsistema alcanza el equilibrio. Otra forma de saber qué pasa con el sistema es observar qué ocurre con el ambiente.

por unitaridad el sistema debe seguir evolucionando aunque el subsistema y se encuentre en equilibrio y no cambie. Esta Evolución puede darse por el cambio de correlaciones entre el subsistema y el baño o por cambios en el estado del baño. Lo que se muestra es: cuando el estado del baño pasa por muchos estados diferentes, cualquier subsistema alcanza el equilibrio. Con estas dos ideas se muestra que la equilibración ocurre en estados productos iniciales entre el subsistema y el baño, para casi todos los estados iniciales del baño. La noción de evolución por muchos estados diferentes se puede escribir matemáticamente por la dimensión efectiva del estados promediado temporalmente $d^{eff}(\omega)$ donde $\omega = \langle \rho(t) \rangle_t$. La relación que se puede ver con los estados propios de energía es

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} |E_k\rangle \quad (3.3)$$

luego el operador de densidad es

$$\rho(t) = \sum_{k,l} c_k c_l^* e^{\frac{-i(E_k - E_l)t}{\hbar}} |E_k\rangle \langle E_l| \quad (3.4)$$

entonces su promedio temporal es, recordando la condición de no degeneración de los niveles de energía

$$\omega = \sum_k |c_k|^2 |E_k\rangle \langle E_k| \quad (3.5)$$

entonces la dimensión efectiva es

$$d^{eff}(\omega) = \frac{1}{Tr(\omega^2)} = \frac{1}{\sum_k |c_k|^4} \quad (3.6)$$

De la misma manera el hecho de que el baño pase por muchos estados diferentes viene dado por $d^{eff}(\omega_B)$ por $\omega_B = \langle \rho(t) \rangle_t$. Como se espera que el baño al evolucionar pase por muchos más estados dado que el subsistema debe seguir evolucionando y el subsistema quede en un espacio de estados más pequeños se preve que $d^{eff}(\omega_B)$ sea mucho más grande que d_S . Para formular ya el primer teorema se quiere ver la distancia entre $\rho_S(t)$ y su promedio temporal $\omega_S = \langle \rho_S(t) \rangle_t$. Como se espera que $\rho_S(t)$ vaya

fluctuando alrededor de ω_S se analizará el promedio temporal de su distancia $\langle D(\rho_S(t), \omega_S) \rangle_t$ cuando este sea muy pequeño el subsistema debe pasar gran parte del tiempo muy cerca a ω_S . Esto quiere decir que el subsistema se equilibrará (según la definición anterior) a ω_S .

Teorema 1: Considere cualquier estado $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ evolucionando bajo un Hamiltoniano con brechas de energía no-degeneradas. Luego la distancia promedio entre $\rho_S(t)$ y su promedio temporal ω_S está acotado por:

$$\langle D(\rho_S(t), \omega_S) \rangle_t \leq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_S}{d^{eff}(\omega - B)}} \leq \sqrt{\frac{d_S^2}{d^{eff}(\omega)}}. \quad (3.7)$$

Demostración: Por la relación ya conocida entre la distancia de traza y la norma de Hilbert-Schmidt que se usó en el capítulo anterior

$$\|M\|_1 \leq \sqrt{n} \|M\|_2 \quad (3.8)$$

se usa para la el operador $D(\rho_1, \rho_2)$:

$$\frac{1}{2} Tr_S \sqrt{(\rho_1 - \rho_2)^2} \leq \frac{1}{2} \sqrt{d_S Tr_S (\rho_1 - \rho_2)^2} \quad (3.9)$$

Por la concavidad de la función raíz cuadrada

$$\langle D(\rho_S(t), \omega_S) \rangle_t \leq \sqrt{d_S \langle Tr_S (\rho_S(t) - \omega_S)^2 \rangle_t} \quad (3.10)$$

usando las expansiones para ρ_S y ω_S

$$\rho_S(t) = \sum_{k,l} c_k c_l^* e^{\frac{-i(E_k - E_l)t}{\hbar}} Tr_B(|E_k\rangle \langle E_l|), \quad (3.11)$$

$$\omega_S = \sum |c_k|^2 Tr_B(|E_k\rangle \langle E_k|), \quad (3.12)$$

se puede escribir $\langle Tr_S (\rho_S(t) - \omega_S)^2 \rangle_t$ como

$$\langle Tr_S (\rho_S(t) - \omega_S)^2 \rangle_t = \sum_{k \neq l} \sum_{m \neq n} \mathcal{T}_{klmn} Tr_S [Tr_B(|E_k\rangle \langle E_l|) Tr_B(|E_k\rangle \langle E_l|)] \quad (3.13)$$

donde \mathcal{T}_{klmn} es :

$$\mathcal{T}_{klmn} = c_k c_l^* c_m c_n^* \left\langle e^{\frac{-i(E_k - E_l + E_m - E_n)t}{\hbar}} \right\rangle_t \quad (3.14)$$

debido a la restricción impuesta al Hamiltoniano de brechas de energías no degeneradas y como solo se toman elementos $k \neq l$ y $m \neq n$ los terminos que son diferentes de 0 son $k = n$ y $l = m$.

Luego

$$\begin{aligned} & \langle Tr_S(\rho_S(t) - \omega_S)^2 \rangle_t \\ &= \sum_{k \neq l} |c_k|^2 |c_l|^2 Tr_S[Tr_B(|E_k\rangle \langle E_l|) Tr_B(|E_k\rangle \langle E_l|)] \\ &= \sum_{k \neq l} |c_k|^2 |c_l|^2 \sum_{ss'bb'} \langle sb|E_k\rangle \langle E_l|s'b\rangle \langle s'b'|E_l\rangle \langle E_k|sb'\rangle \\ &= \sum_{k \neq l} |c_k|^2 |c_l|^2 \sum_{ss'bb'} \langle sb|E_k\rangle \langle E_k|sb'\rangle \langle s'b'|E_l\rangle \langle E_l|s'b\rangle \\ &= \sum_{k \neq l} |c_k|^2 |c_l|^2 Tr_B[Tr_S(|E_k\rangle \langle E_k|) Tr_S(|E_l\rangle \langle E_l|)] \\ &= \sum_{k \neq l} Tr_B[Tr_S(|c_k|^2 |E_k\rangle \langle E_k|) Tr_S(|c_l|^2 |E_l\rangle \langle E_l|)] \quad (3.15) \end{aligned}$$

recordando la definición de ω_B y observando la segunda línea de la ecuación anterior

$$Tr_B \omega_B^2 - \sum_k |c_k|^2 Tr_S[Tr_B(|E_k\rangle \langle E_k|)]^2 \leq Tr_B(\omega_B^2). \quad (3.16)$$

Por la subaditividad débil de la entropía de Rényi:

$$Tr(\omega^2) \geq \frac{Tr_B(\omega_B^2)}{Rank(\rho_S)} \geq \frac{Tr_B(\omega_B^2)}{d_S} \quad (3.17)$$

uniendo todos los resultados con la desigualdad inicial del promedio de la distancia

$$\langle D(\rho_S(t), \omega_S) \rangle_t \leq \frac{1}{2} \sqrt{d_S \text{Tr}_B(\omega_B^2)} \leq \frac{1}{2} \sqrt{d_S^2 \text{Tr}(\omega^2)} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_S^2}{d^{eff}(\omega)}}. \quad (3.18)$$

Con este resultado se puede hablar de la termalización de una forma matemática consto se ve que el subsistema se equilibra cuando la dimensión de $d^{eff}(\omega)$ sea mucho mayor que la dimensión de dos copias del subsistema (d_S^2) o cuando la dimensión efectiva explorada por el baño $d^{eff}(\omega_B)$ sea mucho más grande que la dimensión del subsistema. EL resultado anterior tiene varias generalidades que se quiere recordar. La restricción impuesta sobre el Hamiltoniano es una que no excluye muchos Hamiltonianos. Además de que esta ha sido la única restricción sobre todo el sistema , no se ha especificado nada del baño ni del subsistema. El baño no está necesariamente en equilibrio no se le ha dado ninguna interpretación térmica a ningún objeto tratado hasta ahora. no se ha hablado tampoco de ninguna forma en la que el subsistema llega al equilibrio ni que esta en algún estado específico. Los valores propios de energía tampoco son importantes en las cotas dadas anteriormente, en el teorema al ser demostrado fue encontrado algunos valores propios de energía que al ser promediados dan 0. La energía es importante al buscar las formas exactas en las que evoluciona el sistema pero aquí se demostró que para la equilibración en intervalos de tiempo muy grandes no son muy importantes , las cotas son independientes del tiempo . La forma en que se dividió el sistema(subsistema y baño) solo es importante para el teorema 1 la dimensión del subsistema y no la especificación de la forma o un subsistema particular. Esto permite decir que cualquier subsistema con dimensión d_S estará en equilibrio, los varios subsistemas bastante pequeños de dimensión d_S también estarán en equilibrio. **Equilibrio de conjuntos típicos** Aunque se puso una cota a la fluctuación de $\rho_S(t)$ alrededor de ω_S se quiere ver cuales casos esta fluctuación es tan pequeña que el subsistema se equilibrará para esto se mostrará el siguiente teorema

Terorema2: i)El promedio de la dimensión efectiva $\langle d^{eff}(\omega) \rangle_\psi$, donde el promedio es sobre estados puros aleatorios uniformemente distribuidos $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_R \subset \mathcal{H}$. Es tal que

$$\langle d^{eff}(\omega) \rangle_\psi \geq \frac{d_R}{2} \quad (3.19)$$

ii) Para un estado aleatorio $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_R \subset \mathcal{H}$, la probabilidad $Pr_\psi\{d^{eff}(\omega) < \frac{d_R}{4}\}$ de que $d^{eff}(\omega)$ es más pequeña que $\frac{d_R}{4}$ es:

$$Pr_\psi\{d^{eff}(\omega) < \frac{d_R}{4}\} \leq 2 \exp\{-C\sqrt{d_R}\} \quad (3.20)$$

con constante $c = \frac{(\ln 2)^2}{72\pi^3} \approx 10^{-4}$. La primera parte del teorema 2 nos habla de cómo el promedio de la dimensión efectiva es más grande que la dimensión del subespacio de Hilbert esto significa que si se tiene estados de un subespacio bastante grande se puede asegurar un $d^{eff}(\omega)$ grane que implica un $\langle D(\rho_S(t), \omega_S) \rangle_t$ pequeño. La segunda parte solo confirma de manera más estricta el hecho de encontrar un $d^{eff}(\omega)$ pequeño, mostrando que la probabilidad de encontrar una dimensión efectiva menor a $\frac{d_R}{4}$ es exponencialmente pequeña.

equilibrio de estados genéricos: usando el teorema 2 para ver qué ocurre con un estado escogido de forma aleatorio del espacio total \mathcal{H} , un estado genérico. Esto es simplemente poner $d_R = d$ gracias a esto se comprende que $d^{eff}(\omega)$ d ya que hay una probabilidad exponencialmente baja para que se dé el caso en que $d^{eff} < \frac{d}{4}$. Dado que $d = d_S d_B$ la cota para las fluctuaciones queda $\sqrt{\frac{d_S}{d_B}}$ para un sistema de muchas partículas la dimensión del espacio de Hilbert crece de manera exponencial, si el subsistema es una fracción constante del número de partículas del baño esta proporción caerá de manera exponencial con el número total de de partículas luego los subsistemas se equilibrarán.

Equilibración de sistemas lejanos del equilibrio: Qué ocurre con los sistemas que están lejos del equilibrio. Lo dicho arriba ya cualquier se pensaría que cualquier sistema debe llegar al equilibrio pero esto no es cierto debido a que arriba se usó un estado genérico y los estados lejos del equilibrio no son genéricos; los estados lejos del equilibrio no son típicos por el capítulo anterior se sabe que con cotas exponenciales la mayoría de los estados en el espacio de Hilbert son tales que un subsistema pequeño está en un estado canónico. Para poder sacar algo de esta pregunta se planteará la situación normal, hay un baño que consiste de un número muy grande de partículas de las cuales se conoce unos parámetros macroscópicos, dentro de este se pone un subsistema con un estado inicial arbitrario pero descorrelacionado con el ambiente. Ahora la pregunta es ¿

el subsistema se equilibra?, se verá que para cualquier estado inicial del subsistema y para casi todos los estados iniciales del baño el subsistema se equilibra. Esto incluye cuando el subsistema está lejos del equilibrio. El estado inicial del sistema está dado por $|\Psi\rangle_{SB} = |\psi\rangle_S |\psi\rangle_B$. El estado del subsistema es uno arbitrario $|\psi\rangle_S$ en el espacio de Hilbert. Dado unos parámetros macroscópicos el baño debe cumplir con estos luego el estado del baño $|\phi\rangle_B \in \mathcal{H}_B^R \subset \mathcal{H}_B$. Esta restricción mantiene la generalidad de seguir en cualquier espacio de Hilbert restringido. Puede tener o no un sentido termodinámico o macroscópico. Pero la restricción es solo inicial al evolucionar el baño en el tiempo este puede moverse fuera de \mathcal{H}_B^R . Usando el teorema 2 para $\mathcal{H}_R = |\psi\rangle_S \otimes \mathcal{H}_B^R$ luego $d_R = d_B^R$ esto da como resultado que para casi todos los estados iniciales del baño y cualquier estado del subsistema $d^{eff}(\omega) \geq \frac{d_B^R}{4}$ lo cual significa que el subsistema se equilibrará para esas condiciones, mientras que $d_B^R \gg d_S^2$.

El mecanismo en que el subsistema se equilibra puede ser bastante complicada ya que el baño pasa por muchos estados diferentes y no llega el equilibrio. Aunque el baño no llegue a hacerlo y se salga del subespacio \mathcal{H}_B^R y el subsistema puede equilibrarse de todas formas. En principio puede que la evolución del subsistema sea sensible a la forma precisa del baño. Para ver que el baño no se equilibra de manera genérica se verá que $d^{eff}(\omega_S)$ es mucho mayor que $d^{eff}(\rho_B(t))$ lo cual muestra que el baño sigue evolucionando y no se equilibra en ningún estado. Como los dos sistemas están en un estado puro $Rank(\rho_B(t)) = Rank(\rho_S(t)) \geq d_S$ como la dimensión efectiva de un estado es siempre menor a su rango se obtiene

$$d^{eff}(\rho_B(t)) \geq d_S \quad (3.21)$$

pero

$$d^{eff}(\omega_B) \leq \frac{d_{eff}(\omega)}{d_S} \quad (3.22)$$

Pero para un estado genérico el teorema 2 ii dice $d^{eff}(\omega) > \frac{d_B}{4}$ se tiene

$$d^{eff}(\omega_B) \leq \frac{d^R}{4d_S} = \frac{d_B^R}{4d_S} \gg d_S \leq d^{eff}(\rho_B(t)) \quad (3.23)$$

Independencia del estado inicial LO que se ha mostrado hasta ahora ha sido como si el subsistema es pequeño este se equilibrará. Ahora el

enfoque que se quiere mostrar es cual sería la dependencia del estado de equilibrio del subsistema. Hasta ahora el estado inicial podría hacer que el equilibrio sea un estado diferente dependiendo del inicial. Sea el estado de equilibrio del subsistema ω_S^ψ . Como es conocido se desearía que el estado de equilibrio dependa solo de los parámetros macroscópicos y no del estado inicial microscópico. El teorema siguiente prueba que para casi todos los estados en un subsistema restringido llevan al mismo estado de equilibrio.

Teorema 3: i) Casi todos los estados iniciales de un subespacio restringido bastante grande llevan al mismo estado de equilibrio de un subsistema pequeño. En particula, con $\langle \cdot \rangle_\psi$ siendo el promedio sobre estados puros aleatoriamente uniformes $|\psi(0)\rangle \in \mathcal{H}_R \subset \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ u $\Omega_S = \langle \omega_S^\psi \rangle_\psi$:

$$\langle D(\omega_S^\psi, \Omega_S) \rangle_\psi \leq \sqrt{\frac{d_S \delta}{4d_R}} \leq \sqrt{\frac{d_S}{4d_R}} \quad (3.24)$$

La primera desigualdad es más estricta pero más complicada

$$\delta = \sum_k \langle E_k | \frac{\Pi_R}{d_R} | E_k \rangle \text{Tr}_S \left(\text{Tr}_B(|E_k\rangle \langle E_k|) \right)^2 \leq 1 \quad (3.25)$$

Donde Π_k es el proyector sobre \mathcal{H}_R ii) Para un estado aleatorio $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_R \subset \mathcal{H}$, la probabilidad que $D(\omega_S^\psi, \Omega_S) > \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_S \delta}{d_R}} + \epsilon$ caiga exponencialmente con $\epsilon^2 d_R$:

$$\text{Pr}_\psi \{ D(\omega_S^\psi, \Omega_S) > \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_S \delta}{d_R}} + \epsilon \} \leq 2 \exp(-C' \epsilon^2 d_R), \quad (3.26)$$

con $C' = \frac{2}{9\pi^3}$ si se pone $\epsilon = d_R^{-1/3}$ da una distancia promedio pequeña con alta probabilidad cuando $d_R \gg d_S$.

Independencia del estado del ambiente Para un estado inicial que sea el producto del estado del sistema y el del ambiente $|\psi\rangle_{SB} = |\psi\rangle_S |\phi\rangle_B$ en el espacio $\mathcal{H}_R = |\psi\rangle \otimes \mathcal{H}_R^B$, ya se mostró que para estados genéricos el ambiente causa que el subsistema se equilibre aunque el estado de equilibrio ω_S^ψ del subsistema podría depender del estado inicial del baño $|\phi\rangle_B$. Esto no es así y casi todos los estados del baño en \mathcal{H}_B^R llevan al mismo estado de equilibrio del subsistema simplemente usando el resultado anterior a $\mathcal{H}_B = |\psi\rangle \otimes \mathcal{H}_R^B$ y luego $d_R = d_R^B$, si $d_R^B \gg d_S$ para casi todos los estados iniciales del baño llevarán al subsistema al mismo estado de equilibrio ω_S . como se

usó la cota menos estricta este resultado no depende de la forma explícita de los estados de energías propios. **Independencia del estado del sistema:** Como ya se ha dicho el subsistema en contacto con el baño llega al equilibrio sin importar su estado inicial pero sí depende del baño. Este resultado no se pudo resolver pero se da más indicios. Los problemas son que el estado de equilibrio no siempre es independiente del estado inicial del subsistema, a. si el subsistema puede cambiar al ambiente de forma drástica el estado de equilibrio sí dependerá del estado inicial del subsistema. aquí muestra que las dimensiones del espacio de Hilbert del subsistema y el ambiente son importantes pero el valor se le haya dado una restricción al Hamiltoniano (Brechas de energías no degeneradas) esta condición no es estricta como para no permitir cantidades conservadas en el subsistema cuando estas cantidades conservadas existen los estados del subsistema con diferentes constantes (estado inicial es diferente) no podrán llegar al mismo estado de equilibrio.

Capítulo 4

Conclusiones

Concluyo

