

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

Índice general

1. Preliminares	1
1.1. mecánica estadística	1
1.1.1. Teorma de Liouville	2
1.1.2. Ergodicidad	4
1.2. mecánica cuántica	6
2. El entrelazamiento y la mecánica estadística	9
2.0.1. Definiciones	10
2.1. Idea conceptual	11
2.2. formulación matemática	13
2.2.1. Lema de Levy	14
2.2.2. Demostración del principio general canónico	17
2.3. Significado físico	23
3. Evolución hacia el equilibrio	27
3.1. Especificación del equilibrio	28
3.2. Equilibración	30
4. Termalización y los estados de Gibbs	45
5. Microreversibilidad de sistemas clásicos no autónomos	47
6. Conclusiones	49

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 mecánica clásica nos habla de un sistema físico definido que para todos los tiempos está especificado. Este sistema evoluciona de manera determinista dadas las ecuaciones de movimiento. Pero lo que sorprende al tratar con 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 no se ha podido solucionar dado a que han existido varias soluciones pero todas con sus fallas (libro de historia de la termodinámica). Los métodos típicos requieren hablar de promedios de ensemble, promedios temporales, aleatoriedad. Todos estos conceptos siguen siendo muy debatidos y parecería que no solucionará ninguna pregunta seguir con ellos. Por eso se ha estado buscando nuevos fundamentos para la mecánica estadística.

La mecánica estadística tiene como base el postulado de probabilidades iguales este viene dado por la ignorancia subjetiva que el observador del sistema tiene. Aunque la mecánica estadística no tiene problemas al compararse sus resultados teóricos con el experimento, el cimiento filosófico en el que reposa da mucho de que hablar dando así posturas diferentes que desde los inicios de su teoría no han sido unidos. En este capítulo se expondrá cómo Popescu et al. en (Popescu et al. 2006) muestran una posible luz sobre el problema de unificar las perspectivas de la mecánica estadística.

ca. 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, al poner el entrelazamiento cuántico como nueva cimiento ya no se tiene probabilidades subjetivas sino objetivas dadas por la teoría cuántica. Este nuevo enfoque permite evitar problemas con la ignorancia subjetiva pero también esquiva el problema de ergodicidad gracias a esto se puede ver un fundamento más claro y sólido.

Este capítulo solo se enfocará en mostrar cómo la mayoría de los estados del universo están termalizados sin hablar en ningún momento de la evolución de estos estados. Si en general los estados del universo están termalizados se esperaría que cualquier evolución lleve los estados al equilibrio pero en el siguiente capítulo se darán especificaciones de esta conjetura junto con detalles que hacen ver las complicaciones de formalizar las ideas intuitivas que se tienen sobre el equilibrio.

2.0.1. Definiciones

Antes de seguir sería preciso dar la notación que se usará a lo largo de este capítulo y el siguiente. Cuando se tenga un sistema cuántico grande descrito por un espacio de Hilbert \mathcal{H} este se llamará el universo. Este universo será descompuesto en dos subsistemas. El primero se llamará el sistema S y el segundo se le dará el nombre de ambiente E , en ocasiones S se le dirá subsistema y E se le podrá llamar baño estos nombres son equivalentes a los anteriores. Esto lleva a descomponer \mathcal{H} como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$, con dimensiones d_S y d_E respectivamente, se supone que la dimensión del ambiente es mucho mayor que la del sistema. Para evitar espacios de dimensión infinita se introduce un tope para altas energías y 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 (Excepto las proporciones de sus dimensiones) esto permite decir que 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 estado global puro del universo se escribirá como $|\phi(t)\rangle$ en un tiempo t y su matriz de densidad se escribirá $\rho(t) = |\phi(t)\rangle \langle \phi(t)|$. El estado del sistema

se encontrará al hacer una traza parcial del ambiente sobre el estado del universo $\rho_S = \text{Tr}_B \rho(t)$; similarmente el estado del ambiente está dado por $\rho_B = \text{Tr}_S \rho(t)$. El promedio temporal del universo es:

$$\omega = \langle \rho(t) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \rho(t) dt \quad (2.1)$$

de manera análoga ω_S y ω_B son el promedio temporal para el sistema y el ambiente respectivamente. También se tiene el promedio $\langle . \rangle_\phi$ que es sobre todos los estados $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_R$ de acuerdo a la medida estándar (unitariamente invariante). Esta medida se usa para hallar volúmenes de conjuntos de estados.

2.1. Idea conceptual

Este nuevo tratamiento de los fundamentos de la mecánica estadística se tiene un universo. 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. Se plantea que el sistema alcanza el equilibrio térmico por medio de la interacción mutua (termalización) es producto del entrelazamiento del sistema y el ambiente (Popescu et al, 2006). Lo que se presentará más adelante es una definición más rigurosa que ayudará a dar cotas para la expresión “ambiente suficientemente grande”. Esta idea permite formular un principio canónico general: el sistema estará termalizado para casi todos los estados puros del universo. esto es soportado por 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 (Kardar, 2009).

Ya poniendo lo dicho en un contexto un poco más matemático, supone tener un universo asilado y bastante grande. Este tiene dos partes el sistema S y el ambiente E . La dimensión del ambiente es mucho más grande que la del sistema. Además se le impone una restricción global al universo llamada R . Desde la mecánica cuántica esto puede ponerse como restricciones en el espacio de Hilbert, restricción de los estados posibles:

$$\mathcal{H}_R \subseteq \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E, \quad (2.2)$$

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:

$$\mathcal{E}_R = \frac{1}{d_R} \mathbb{1}_R, \quad (2.3)$$

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 del ambiente al universo da como resultado el estado canónico:

$$\Omega_S = \text{Tr}_E \mathcal{E}_R. \quad (2.4)$$

Para lo que sigue 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}_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 pese a que el estado del universo es puro el estado reducido del sistema

$$\rho_S = \text{Tr}_E |\phi\rangle \langle \phi|, \quad (2.5)$$

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

$$\rho_S \approx \Omega_S. \quad (2.6)$$

Por consiguiente para casi todos los estados puros del universo $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_R$ el sistema se comporta como si el universo estuviese en el estado mixto equiprobable \mathcal{E}_R . Este es el principio general canónico. Clarificando lo esbozado, el estado canónico del sistema Ω_S es el estado del sistema cuando el universo se encuentra en el estado equiprobable \mathcal{E}_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}_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 el estado canónico usual, puede ser el gran canónico o cualquier otro que sea acorde con la restricción impuesta. Este principio puede ser de utilidad cuando la interacción entre el ambiente y el sistema no es débil o cuando las interacciones son complicadas el principio general canónico también aplica.

2.2. formulación matemática

Hasta ahora no se han entrado en los detalles ni en qué significa bastante pequeño o bastante grandes, ni tampoco se ha demostrado el principio general canónico. En esta sección se orientará en los detalles matemáticos, las herramientas usadas y la demostración de los teoremas. En la siguiente sección se dará una perspectiva más física a lo hecho aquí.

Para empezar se debe 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:

$$D(\rho_S, \Omega_S) = \frac{1}{2} \text{Tr} |\rho_S - \Omega_S| = \frac{1}{2} \text{Tr} \sqrt{(\rho_S - \Omega_S)^\dagger (\rho_S - \Omega_S)}. \quad (2.7)$$

Esta distancia de traza se relaciona con la distancia de norma de manera sencilla

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

Teniendo ya una forma de darle sentido al concepto de que dos estados son cercanos entonces se puede plantear el teorema central de este capítulo:

Teorema 2.2.1. *Para un estado escogido de manera aleatoria $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_R \subseteq \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ y un $\epsilon > 0$ arbitrario, la distancia entre la matriz densidad reducida del sistema $\rho_S = \text{Tr}_E(|\phi\rangle\langle\phi|)$ y el estado canónico $\Omega_S = \text{Tr}_E(\mathcal{E}_R)$ esta dado probabilísticamente por*

$$\text{Pr}_\phi\{\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \geq \eta\} \leq \eta', \quad (2.9)$$

Donde

$$\eta = \epsilon + \sqrt{\frac{d_S}{d_E^{eff}}}, \quad (2.10)$$

$$\eta' = 2 \exp(-Cd_R\epsilon^2). \quad (2.11)$$

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

$$d_E^{eff} = \frac{1}{\text{Tr} \Omega_E^2} \geq \frac{d_R}{d_S}. \quad (2.12)$$

Donde $\Omega_E = \text{Tr}_S \mathcal{E}_R$. 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 $\epsilon = d_R^{-\frac{1}{3}}$.

2.2.1. Lema de Levy

Para poder demostrar el teorema 2.2.1 se usará el lema de Levy. Este dice que al seleccionar un punto ϕ aleatoriamente de una hipersfera de dimensión alta y que $f(\phi)$ no cambie muy rápido, entonces $f(\phi) \approx \langle f \rangle$ con alta probabilidad, Más exactamente:

Lema 2.2.2. *Dada una función $f : \mathbb{S}^d \rightarrow \mathbb{R}$ definida en la hipersfera d -dimensional \mathbb{S}^d , y un punto $\phi \in \mathbb{S}^d$ es escogido de manera uniformemente aleatoria,*

$$Pr_{\phi}\{|f(\phi) - \langle f \rangle| \geq \epsilon\} \leq 2 \exp\left(-\frac{2C(d+1)\epsilon^2}{\eta^2}\right) \quad (2.13)$$

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

Los conceptos manejados por el teorema 2.2.2 son conocidos generalmente excepción de la llamada constante de Lipschitz. Para poder entender qué es la constante de Lipschitz se debe ver primero qué significa que una función sea Lipschitz continua.

La definición de continuidad dada en el cálculo básico es:

Definición 2.2.1. *continuidad* 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 si y solo si para todo $\epsilon > 0$ existe un $\delta > 0$ tal que $|x - c| \rightarrow |f(x) - f(c)| < \epsilon$.

La definición anterior es la usada por lo general pero hay sutilezas en este concepto 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 . Para resolver este detalle se motiva la definición de Lipschitz continuo. Se es Lipschitz continuo con constante η si

$$|f(x) - f(y)| \leq \eta|x - y|, \quad (2.14)$$

esto permite decir que $|f(x) - f(y)| < \epsilon$ entonces $\delta < \frac{\epsilon}{\eta}$. Ahora si f es derivable y ∇f es acotado, para x y y dados existe ξ entre ellos tal que:

$$\begin{aligned} &\implies f(x) - f(y) = \nabla f(\xi)(x - y) \\ &\implies |f(x) - f(y)| \leq |\nabla f(\xi)||x - y| \implies |f(x) - f(y)| \leq \sup |\nabla f(\xi)||x - y|, \end{aligned} \quad (2.15)$$

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

Gracias a la normalización, los estados puros en \mathcal{H}_R se pueden representar como puntos sobre la superficie de una hipersfera de dimensión $2d_R - 1$, o sea \mathbb{S}^{2d_R-1} . Luego se puede aplicar 2.2.2 a estado cuánticos ϕ aleatoriamente seleccionados. Para los estados seleccionados aleatoriamente $\phi \in \mathcal{H}_R$, se desea mostrar que $\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \approx 0$ con alta probabilidad. Para poder usar 2.2.2 primero debe encontrarse la constante de Lipschitz ya teniendo una idea de qué es ser Lipschitz continuo se encontrará una cota para la constante η de la función $f(\phi) = \|\rho_S - \Omega_S\|_1$ que es la función que nos interesa para el problema físico. 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 $\rho_2 = \text{Tr}_E(|\phi_2\rangle\langle\phi_2|)$, entonces

$$|f(\phi_1) - f(\phi_2)|^2 = \|\rho_1 - \Omega\|_1 - \|\rho_2 - \Omega\|_1^2. \quad (2.16)$$

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

$$|d(x, z) - d(y, z)| \leq d(x, y), \quad (2.17)$$

Por lo tanto

$$\left| \|\rho_1 - \Omega\|_1 - \|\rho_2 - \Omega\|_1 \right|^2 \leq \|\rho_1 - \rho_2\|_1^2 = \|\text{Tr}_E(|\phi_1\rangle\langle\phi_1| - |\phi_2\rangle\langle\phi_2|)\|_1^2. \quad (2.18)$$

Como existe una cota a la norma de una traza parcial dada por

$$\|\text{Tr}_B(M)\|_p \leq [\dim(\mathcal{H}_B)]^{\frac{p-1}{p}} \|M\|_p, \quad (2.19)$$

entones la cota sobre los estados reducidos queda

$$\|\text{Tr}_E(|\phi_1\rangle\langle\phi_1| - |\phi_2\rangle\langle\phi_2|)\|_1 \leq \| |\phi_1\rangle\langle\phi_1| - |\phi_2\rangle\langle\phi_2| \|_1. \quad (2.20)$$

Por lo tanto se tiene hasta ahora:

$$\|\rho_1 - \rho_2\|_1^2 \leq \| |\phi_1\rangle\langle\phi_1| - |\phi_2\rangle\langle\phi_2| \|_1^2, \quad (2.21)$$

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. Junto con las propiedades de la traza $\text{Tr}(\sqrt{UD^2U^\dagger}) = \text{Tr}(U\sqrt{D^2}U^\dagger) = \text{Tr}(\sqrt{D^2})$ se llega a

$$\| |\phi_1\rangle \langle \phi_1| - |\phi_2\rangle \langle \phi_2| \|_1^2 = 4(1 - |\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle|^2) \quad (2.22)$$

entonces

$$4(1 - |\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle|^2) \leq 4|\phi\rangle - |\phi\rangle|^2. \quad (2.23)$$

Uniendo todos los pasos anteriores

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

o sea

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

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

2.2.2. Demostración del principio general canónico

En esta parte se dará una demostración matemática explícita del principio general canónico usando el lema de Levy se entrará en los detalles matemáticos de usar este lema y las cotas adicionales que se necesitan para poder llegar al teorema 2.2.1. Habiendo dado una cota para η ahora se puede usar por completo el lema 2.2.2 para la función $f(\phi) = \|\rho_S - \Omega_S\|_1$ recordando que se reemplazará d en el lema por $d = 2d_R - 1$. Tomando la parte derecha de la desigualdad de 2.2.2 y sustituyendo la dimensión se tiene:

$$2\exp\left(-\frac{2C(d+1)\epsilon^2}{\eta^2}\right) = 2\exp\left(-\frac{4Cd_R\epsilon^2}{\eta^2}\right) \quad (2.26)$$

como $\eta \leq 2$ entonces

$$2\exp(-Cd_R\epsilon^2) \geq 2\exp\left(-\frac{4Cd_R\epsilon^2}{\eta^2}\right) \geq \text{Pr}_\phi[|f(\phi) - \langle f \rangle| \geq \epsilon]. \quad (2.27)$$

Mirando más atentamente $|f(\phi) - \langle f \rangle| \geq \epsilon$, como la norma de traza es un distancia se tiene que $\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \geq 0$ entonces

$$\|\rho_S - \Omega_S\|_1 - \langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle_\phi \geq \epsilon. \quad (2.28)$$

Nombrando a $\mu = \epsilon + \langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle_\phi$ y $\mu' = 2 \exp(-C d_R \epsilon^2)$ esto permite organizar el lema de Levy así:

$$Pr_\phi[\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \geq \mu] \leq \mu'. \quad (2.29)$$

Debido a que $d_R \gg 1$ Se asegura que ϵ y μ' son cantidades pequeñas al escoger $\epsilon = d_R^{-1/3}$. Para llegar a 2.2.1 falta acotar μ con las dimensiones de los espacios conocidos, se impondrá una cota a $\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle_\phi$; lo primero para lograr esta empresa es acotar este promedio con trazas del estado del sistema y luego se calcularán estas trazas para poder dejar la cota en términos de las dimensiones del sistema y la dimensión efectiva del ambiente. Se procede 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 ya que la norma de Hilbert-Schmidt ($\|\cdot\|_2$) es más sencilla para trabajar que la norma de traza y luego se procederá con los planeado.

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

$$\text{Tr } M = \sum_i \lambda_i \quad (2.30)$$

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

$$\|M\|_1^2 = (\text{Tr } |M|)^2 = n^2 \left(\frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i| \right)^2. \quad (2.31)$$

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

$$f(a_1 x_1 + \dots + a_n x_n) \leq a_1 f(x_1) + \dots + a_n f(x_n), \quad (2.32)$$

con esto se puede decir que

$$\left(\frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i| \right)^2 \leq \frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i|^2. \quad (2.33)$$

Pero se sabe que

$$\sum_i |\lambda_i|^2 = \text{Tr}(|M|^2) = \|M\|_2^2 \quad (2.34)$$

se llega entonces a la conclusión que

$$\|M\|_1^2 = n^2 \left(\frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i| \right)^2 \leq n^2 \frac{1}{n} \sum_i |\lambda_i|^2 = n \|M\|_2^2 \quad (2.35)$$

Gracias a lo anterior la relación entre normas es:

$$\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \leq \sqrt{d_S} \|\rho_S - \Omega_S\|_2 \quad (2.36)$$

Esta relación se usará un poco más adelante.

Volviendo al cálculo de $\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle_\phi$ se acotará la norma de Hilbert-Schmidt y con la relación entre normas se dará la desigualdad que limite el promedio de la norma de traza. Para empezar 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

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_2 \rangle \leq \sqrt{\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_2^2 \rangle} \quad (2.37)$$

acordándose que este promedio es tomado a los estados $|\phi\rangle$, se omitirá por ahora el subíndice indicando este promedio, esto hace que Ω_S se tome constante. Por hermiticidad de $\rho_S - \Omega_S$

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

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

porque $\langle \rho_S \rangle = \Omega_S$. Luego se llega a

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_2 \rangle \leq \sqrt{\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_2^2 \rangle} = \sqrt{\langle \text{Tr}(\rho_S)^2 \rangle - \text{Tr}(\Omega_S^2)}. \quad (2.40)$$

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

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle \leq \sqrt{d_S(\langle \text{Tr}(\rho_S)^2 \rangle - \text{Tr}(\Omega_S^2))}. \quad (2.41)$$

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

$$\langle \text{Tr} \rho_S^2 \rangle \leq \text{Tr} \langle \rho_S \rangle^2 + \text{Tr} \langle \rho_E \rangle^2, \quad (2.42)$$

recordando que el promedio es tomado con respecto a los estados $|\phi\rangle$, los métodos usados para encontrar esta desigualdad son usados también en destilación de entrelazamiento aleatoria y codificación de canal cuántico aleatorio. Para poder hacer este cálculo se introduce una segunda copia del espacio de Hilbert. Ahora el problema se trabaja en $\mathcal{H}_R \otimes \mathcal{H}_{R'}$, donde $\mathcal{H}_{R'} \subseteq \mathcal{H}_{S'} \otimes \mathcal{H}_{E'}$. Percatándose de lo siguiente

$$\text{Tr}_S(\rho_S)^2 = \sum_k (\rho_{kk})^2 = \sum_{k,l,k',l'} (\rho_{kl})(\rho_{k'l'}) \langle kk'|ll' \rangle \langle l'l'|kk' \rangle. \quad (2.43)$$

Sea $F_{SS'}$ la operación "flip" $S \longleftrightarrow S'$ definida de esta manera:

$$F_{SS'} = \sum_{S,S'} |s'\rangle \langle s|_S \otimes |s\rangle \langle s'|_{S'} \quad (2.44)$$

Entonces

$$\begin{aligned} \sum_{k,l,k',l'} (\rho_{kl})(\rho_{k'l'}) \langle kk'|ll' \rangle \langle l'l'|kk' \rangle &= \text{Tr}_{SS'}((\rho_S \otimes \rho_{S'}) F_{SS'}) \\ &= \text{Tr}_{RR'}((|\phi\rangle \langle \phi| \otimes |\phi\rangle \langle \phi|)_{RR'} (F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'})) \end{aligned} \quad (2.45)$$

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

$$V = \alpha \Pi_{RR'}^{sim} + \beta \Pi_{RR'}^{anti}, \quad (2.46)$$

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

$$(|\phi\rangle \langle \phi| \otimes |\phi\rangle \langle \phi|) \frac{1}{\sqrt{2}}(|ab\rangle - |ba\rangle) = 0 \quad \forall a, b, \phi \quad (2.47)$$

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

$$V = \langle |\phi\rangle \langle \phi| \otimes |\phi\rangle \langle \phi| \rangle = \frac{2}{d_R(d_R+1)} \Pi_{RR'}^{sim}. \quad (2.48)$$

luego se puede escribir 2.45 como

$$\langle \text{Tr}(\rho)^2 \rangle = \text{Tr}_{RR'} \left(\left(\frac{2}{d_R(d_R+1)} \Pi_{RR'}^{sim} \right) (F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'}) \right) \quad (2.49)$$

Al ser $\Pi_{RR'}^{sim}$ un proyector simétrico se escribe

$$\Pi_{RR'}^{sim} = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_{RR'} + (F_{RR'})) \quad (2.50)$$

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

reuniendo todo lo anterior

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

Distribuyendo y sabiendo que al hacer dos veces la operación "flip" no afecta nada se sigue lo siguiente

$$\text{Tr}_{RR'} \left(\frac{\mathbb{1}_{RR'}}{d_R(d_R+1)} F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'} + \frac{\mathbb{1}_{RR'}}{d_R(d_R+1)} (\mathbb{1}_{SS'} \otimes F_{EE'}) \right). \quad (2.52)$$

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:

$$\begin{aligned}
 \langle \text{Tr}_S \rho_S^2 \rangle &= \text{Tr}_{RR'} \left(\left(\frac{\mathbb{1}_{RR'}}{d_R(d_R+1)} \right) (F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'}) \right) \\
 &\quad + \text{Tr}_{RR'} \left(\left(\frac{\mathbb{1}_{RR'}}{d_R(d_R+1)} \right) (\mathbb{1}_{SS'} \otimes F_{EE'}) \right) \\
 &\leq \text{Tr}_{RR'} \left(\left(\frac{\mathbb{1}_R}{d_R} \otimes \frac{\mathbb{1}_{R'}}{d_R} \right) (F_{SS'} \otimes \mathbb{1}_{EE'}) \right) \\
 &\quad + \text{Tr}_{RR'} \left(\left(\frac{\mathbb{1}_R}{d_R} \otimes \frac{\mathbb{1}_{R'}}{d_R} \right) (\mathbb{1}_{SS'} \otimes F_{EE'}) \right) \quad (2.53)
 \end{aligned}$$

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 2.45 se llega a lo que se quería:

$$\langle \text{Tr}_S \rho_S^2 \rangle \leq \text{Tr}_S \Omega_S^2 + \text{Tr}_E \Omega_E^2, \quad (2.54)$$

y esto es lo mismo que

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

Gracias al resultado 2.36 se obtiene

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle \leq \sqrt{d_S \langle \text{Tr}_E \langle \rho_E \rangle^2 \rangle}. \quad (2.56)$$

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

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle \leq \sqrt{\frac{d_S}{d_E^{eff}}} \quad (2.57)$$

Ya con esto se tiene el teorema 2.2.1. Cuando el ambiente es mucho más grande que el sistema μ y μ' de la ecuación 2.29 serán pequeñas ($d_E^{eff} \gg d_S$) implicando $\|\rho_S - \Omega_S\|_1 \approx 0$ con alta probabilidad. Aunque ya se llegó a la desigualdad que se quería se puede notar lo siguiente, sean los valores propios de Ω_E iguales a λ_E^k con su máximo valor propio λ_E^{max} se ve que

$$\begin{aligned} \text{Tr}_E \Omega_E^2 &= \sum_k (\lambda_E^k) \leq \lambda_E^{max} \sum_k \lambda_E^k \\ &= \max_{|\phi_E\rangle} \langle \phi_E | \text{Tr}_S \left(\frac{\mathbb{1}_R}{d_R} \right) | \phi_E \rangle \\ &= \max_{|\phi_E\rangle} \sum_s \langle s \phi_E | \frac{\mathbb{1}_R}{d_R} | s \phi_E \rangle \leq \frac{d_S}{d_E} \end{aligned} \quad (2.58)$$

en conclusión $d_E^{eff} \geq d_R/d_S$ entonces se obtiene

$$\langle \|\rho_S - \Omega_S\|_1 \rangle \leq \sqrt{\frac{d_S}{d_E^{eff}}} \leq \sqrt{\frac{d_S^2}{d_R}}. \quad (2.59)$$

Con esto se finaliza la demostración del teorema 2.2.1 en la siguiente sección se hablará de sus consecuencias físicas.

2.3. Significado físico

El teorema anterior ya permite hablar del concepto importante que se sigue del artículo de Popescu et al. la idea general de la física es poder dar una relación uno a uno entre las propiedades de un objeto físico y su representación matemática con esta correspondencia se puede decir que la teoría está completa cuando todas las propiedades que son posibles de medir tienen su semejante en la teoría. Por ejemplo en la física clásica a las cantidades como velocidad y distancia se le asigna los símbolos matemáticos v y x , el cuerpo puede ser especificado dando estas dos cantidades en un tiempo determinado. La mecánica clásica nos da un ejemplo sencillo pero cuando se pasa a la mecánica estadística se encuentran perspectivas diferentes que entran en conflicto con esta sencilla idea. En los inicios de la mecánica estadística hubo muchas controversias dado a que ahora la

idea determinista que Newton y otros habían mostrado como ciertas (Se podía describir la naturaleza de manera predecible) ahora se introducía la probabilidad a sistemas que según Newton eran deterministas. En este punto se debe hacer claro que la necesidad de la probabilidad era por la falta de conocimiento pero no por un indeterminismo intrínseco como en la mecánica cuántica. Dos propuestas importantes surgieron en busca de una base conceptual sobre estas probabilidades, la visión de Gibbs y la de Boltzmann. Gibbs propuso la idea del ensamble, esta es una idea que hasta el día de hoy se sigue usando porque da los resultados correctos para las propiedades de sistemas termodinámicos.

La idea de Gibbs es la siguiente: Se tiene un sistema macroscópico con ciertos parámetros que se pueden medir. Este sistema está compuesto por varias partículas que tienen posiciones y momentos, pero estas propiedades están restringidas por los parámetros macroscópicos. Entonces como no se puede conocer el microestado del sistema, no se puede medir cada posición y momento de cada partícula, se tiene una libertad sobre cuál es el microestado dado el macroestado. El ensamble es el conjunto de microestados que cumplen con el macroestado, mientras el microestado cumpla con los parámetros macroscópicos hará parte del ensamble así el sistema no se encuentre en ese microestado. En teoría no hay limitación sobre el número de microestados que pertenezcan a un ensamble, este puede tener infinitos microestados. Esta idea de base para la función de densidad en el espacio de fase, cada punto en este espacio es un microestado estos microestados no interactúan entre ellos, con esto se puede construir la mecánica estadística que se conoce.

Por el contrario Boltzmann da una concepción de la mecánica estadística más intuitiva; él propone N partículas que interactúan entre ellas y cumplen los parámetros macroscópicos. Las partículas no son imaginarias como en el caso de los ensambles de Gibbs, ellas son las partículas que están en el sistema que se está estudiando. Se esperaría que la solución de Boltzmann fuera la que diera los resultados correctos dada la sencillez de su propuesta pero es la formulación de Gibbs la que da la termodinámica correcta. E.T Jaynes en () muestra las diferencias matemáticas de cada perspectiva y llega a la conclusión que la formulación de Gibbs da la entropía correcta sin importar cual sea el tipo de interacción que tenga el sistema, además encuentra que la entropía que sale de la formulación Boltzmanniana no es

la misma entropía dada por la termodinámica, la entropía de Boltzmann es correcta cuando no hay interacción entre las partículas.

Ya con la comprobación experimental se debería aceptar la perspectiva de Gibbs como la correcta y dejar a un lado la de Boltzmann pero esto deja a la mecánica estadística en un contexto filosófico poco fuerte, aunque la física busque una correspondencia entre experimento y teoría no se puede aceptar cualquier teoría solo por tener congruencia con el experimento, la física debe buscar una estabilidad conceptual en sus teorías. ¿Por qué la perspectiva de Gibbs tiene un fundamento congruente? lo que propone Gibbs aunque matemáticamente aceptable se basa en todos los microestados en los que el macroestado no se encuentra es decir, que para poder determinar la propiedades de estado el cual se está estudiando se debe estudiar todos los estados en los que el sistema no se encuentra pero podría estar, pero por qué para analizar un sistema que se encuentra en un estado definido y exacto debería examinar los posibles infinitos estados en donde no se encuentra si se hace un promedio sobre estos microestados ¿cuál es el significado de este promedio?. Este problema ontológico deja la perspectiva de Gibbs en duda, mientras la de Boltzmann habla del sistema que se examina sin ningún problema de este estilo.

La lucha entre las perspectivas ha sido una de aún no se resuelve lo que se ha mostrado hasta ahora ha sido la matemática de la tentativa de unir ambas perspectivas por Popescu et al. pero ¿por qué estos resultados matemáticos intentan dar una luz a la resolución de estas perspectivas? se puede ver fácilmente que cuando se habla de del estado $\Omega_S = \text{Tr}_B \mathcal{E}_R$ este condensa la perspectiva de Gibbs mientras que $\rho_S = \text{Tr}_E |\phi\rangle \langle\phi|$ habla de un subsistema específico bajo una restricción esta es la perspectiva de Boltzmann por lo tanto el resultado mostrado acá dice: a menos que se tenga un estado bastante especial se puede asegurar que el subsistema de un universo muy grande, dado por un estado puro, se comporta de la misma manera que si el universo se encontrara en un estado máximamente mezclado. Esto corresponde a decir que para la mayoría de los estados en un espacio de Hilbert se puede reconciliar ambas perspectivas.

Hay otro punto que da más mérito a la perspectiva mostrada acá y es que el estado Ω_S es la forma de mostrar la ignorancia subjetiva que se tiene del sistema. Se sabe que este es el punto de partida para la mecánica estadística pero esto también es un fundamento que generalmente es muy cuestionado

gracias al teorema 2.2.1 se cambia esa probabilidad subjetiva por una objetividad debido al entrelazamiento. Por este cambio a un fundamento más sólido no se debe entrar en el problema de ergodicidad ya que en general la solución del problema de esa probabilidad se dice que el sistema pasa por todos los estados, y eso solo complica la pregunta dado que hay sistemas que no pasan por todos los estados pero aún así son descritos por un estado canónico. Ya no debe entrarse en la pregunta sobre la ergodicidad del sistema dado que esta perspectiva muestra que los promedios no son necesarios en el momento de darle un fundamento a la mecánica estadística.

Capítulo 3

Evolución hacia el equilibrio

En el capítulo anterior se expuso la idea de Popescu et al.(referencia) para poder reconciliar las ideas fundamentales de la mecánica estadística. Se mostró que para estados genéricos de un universo se tiene que el estado del sistema va a estar muy cercano del estado canónico. Ya con esta idea la siguiente pregunta que se puede hacer es sobre la termalización, ¿ Este fenómeno cómo ocurre? ¿ se puede deducir se las ecuaciones básicas(Schrödinger, Newton , etc)?. Este capítulo mostrará lo que Linden et al. (referencia) proponen para poder responder estas preguntas siguiendo las ideas ya dadas en el capítulo anterior. La generalidad que se ha dado a los fundamentos gracias Popescu et al. permite una flexibilidad al momento de manejar nuevos problemas por eso se ve que además de tener una buena base filosófica las matemáticas dan un buen esqueleto para sostener las bases y seguir construyendo con ellas. Ahora se quiere tratar el caso en que el estado no se encuentra en un tiempo específico sino ya en un tiempo general. Entonces se deberá apuntar la maquinaria que ya se tiene para poder redondear el problema; esto será lo primero a precisar. Luego se mostrará que por lo general los estados del sistema llegan al equilibrio y duran allí gran parte de su tiempo, todo esto bajo las especificaciones dadas al comienzo. Se seguirá dando un teorema que muestra como para la gran mayoría de casos de estados genéricos se llegará al equilibrio, aquí también se dará un argumento sobre cómo los estados lejanos al equilibrio llegan a equilibrarse. Además se mostrará la independencia del estado inicial y problemas que no se han llegado a solucionar desde la perspectiva de

(referencia).

3.1. Especificación del equilibrio

Las preguntas planteadas anteriormente quieren enfocarse en el equilibrio pero para poder seguir viendo qué ocurre con este fenómeno se deberá establecer lo que significa, basados en conceptos fenomenológicos se dará la definición del equilibrio y qué se espera de este estado.

La manera más intuitiva que se tiene sobre el equilibrio es que el sistema, que se está analizando, se mantiene en el mismo estado durante un largo periodo de tiempo con las mismas características; entonces 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. Aún no se dice nada sobre las dependencias que pueda tener, o sea se puede tener una condición de dependencia laxa esto permite decir que el estado de equilibrio depende o no del estado inicial del subsistema y/o del estado inicial del ambiente de forma arbitraria. Dado esto no es importante cuál sea el estado de equilibrio este puede ser la distribución de Boltzmann o cualquier otra. El concepto de equilibrio dicho aquí es una forma general de hablar sobre este fenómeno porque se da mucha libertad al estado y sus dependencias sobre el ambiente por eso se seguirá puliendo para no dejarlo tan general.

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 cuando se llega al equilibrio el estado dependa de la de estos parámetros, ya se restringe 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 estos establecen el equilibrio. El estado exacto del baño no debería jugar un papel tan importante porque para los mismos parámetros macroscópicos pueden haber varios estados del baño que concuerden con ellos, 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 con los mismos parámetros macroscópicos haber sido iniciados en un estado A y el otro en el estado B llegarán al mismo estado

de equilibrio sin importar en cual de los dos hayan empezado. Esto motiva lo siguiente: 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 conocidos se impone una última restricción. 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 dada por la mecánica estadística.

Haber podido dividir el problema de la termalización de esta forma permite analizar 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 o decir que el baño es uno típico (Dado una temperatura o rango de energía). Pueden tomarse situaciones en los que el sistema no llegue a equilibrio.

Lo siguiente es que se mostrará con suposiciones no muy fuertes los primeros dos supuestos, la idea de que un sistema llegará al equilibrio y que el estado no depende del ambiente, son propiedades de sistemas cuánticos. La evolución del sistema tiene implicado al Hamiltoniano por eso se estudiará el siguiente:

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

donde $|E_k\rangle$ es el estado propio con energía E_k . Al Hamiltoniano anterior se le dará la única restricción de que tenga brechas de energías no degeneradas. Esto quiere decir que para una diferencia de energías dada, solo existe un par posible de estados con esa diferencia. El ejemplo puesto por (Linden et al.) es: 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 comprende que no importa como se divida el subsistema y el baño siempre van a estar interactuando, esto excluye los Hamiltonianos no interactuantes ($H = H_S + H_E$) estos Hamiltonianos tienen muchas brechas de energía degeneradas. Véase que si no hay interacción en el Hamiltoniano la energía es $E = E_S + E_B$ y 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. Gracias a esta restricción se pueden incluir interacciones complejas que por lo general no son analizadas en la literatura como interacciones de larga distancia o interacciones entre todas las partículas esto hace que la energía no llegue a ser una cantidad extensiva.

3.2. Equilibración

La perspectiva principal que se quiere dar a entender siguiendo a (Linden et al.) 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 pequeño subsistema 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, por ejemplo 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 este estado no evolucionará a otro y se diría que ya se encuentra en equilibrio. Los resultados que se quieren mostrar toman estados fuera del equilibrio. En este punto se usan las otras suposiciones hechas anteriormente para que el subsistema no dependa del estado inicial el subsistema debe perder esta información; si el subsistema empieza lejano al equilibrio este pasará por muchos estados en su camino al equilibrio lo cual implica que el universo también evolucione en muchos estados. El hecho de que el subsistema haya llegado al equilibrio no signifi-

ca que el universo deje de evolucionar, debido a la unitaridad, debe seguir evolucionando con la misma proporción que 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.

Otra forma de saber qué pasa con el universo es observar qué ocurre con el ambiente. Por unitaridad el universo 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. También se muestra que cuando el estado del universo pasa por muchos estados diferentes cualquier estado pequeño subsistema alcanza el equilibrio. Estas dos ideas exponen que la equilibración ocurre en estados productos iniciales entre el subsistema y el baño, para casi todos los estados iniciales del baño.

Para poder empezar a construir estos conceptos matemáticamente se puede empezar con la concepción matemática de evolucionar por muchos estados diferentes, esta se comprime en la dimensión efectiva del estado promediado temporalmente $d^{eff}(\omega)$ donde $\omega = \langle \rho(t) \rangle_t$. Esta medida de evolución por muchos estados se puede relacionar con los estados propios de energía así:

Se toma el estado del universo

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} |E_k\rangle \quad (3.2)$$

cuyo operador de densidad es

$$\rho(t) = \sum_{k,l} c_k c_l^* e^{\frac{-i(E_k - E_l)t}{\hbar}} |E_k\rangle \langle E_l|, \quad (3.3)$$

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

$$\omega = \sum_k |c_k|^2 |E_k\rangle \langle E_k| \quad (3.4)$$

y dando la relación se calcula la dimensión efectiva resultando

$$d^{eff}(\omega) = \frac{1}{Tr(\omega^2)} = \frac{1}{\sum_k |c_k|^4}. \quad (3.5)$$

Similarmente el hecho de que el baño pase por muchos estados diferentes viene dado por $d^{eff}(\omega_B)$ con $\omega_B = \langle \rho(t) \rangle_t$. Debido a que el baño al evolucionar pase por muchos más estados dado que el universo debe seguir evolucionando y el subsistema quede en un espacio de estados más pequeño se preve que d_S es mucho más pequeño que $d^{eff}(\omega_B)$. 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 3.2.1. *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:*

$$\langle D(\rho_S(t), \omega_S) \rangle_t \leq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_S}{d^{eff}(\omega_B)}} \leq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_S^2}{d^{eff}(\omega)}}. \quad (3.6)$$

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

$$\|M\|_1 \leq \sqrt{n} \|M\|_2, \quad (3.7)$$

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

$$\frac{1}{2} \text{Tr}_S \sqrt{(\rho_1 - \rho_2)^2} \leq \frac{1}{2} \sqrt{d_S \text{Tr}_S (\rho_1 - \rho_2)^2}, \quad (3.8)$$

por la concavidad de la función raíz cuadrada se obtiene

$$\langle D(\rho_S(t), \omega_S) \rangle_t \leq \sqrt{d_S \left\langle \text{Tr}_S (\rho_S(t) - \omega_S)^2 \right\rangle_t}. \quad (3.9)$$

Usando las expansiones para ρ_S y ω_S

$$\rho_S(t) = \sum_{k,l} c_k c_l^* e^{\frac{-i(E_k - E_l)t}{\hbar}} \text{Tr}_B(|E_k\rangle \langle E_l|), \quad (3.10)$$

$$\omega_S = \sum |c_k|^2 \text{Tr}_B(|E_k\rangle \langle E_k|), \quad (3.11)$$

se puede escribir $\langle \text{Tr}_S(\rho_S(t) - \omega_S)^2 \rangle_t$ como

$$\langle \text{Tr}_S(\rho_S(t) - \omega_S)^2 \rangle_t = \sum_{k \neq l} \sum_{m \neq n} \mathcal{T}_{klmn} \text{Tr}_S[\text{Tr}_B |E_k\rangle \langle E_l| \text{Tr}_B |E_k\rangle \langle E_l|] \quad (3.12)$$

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

$$\mathcal{T}_{klmn} = c_k c_l^* c_m c_n^* \left\langle e^{\frac{-i(E_k - E_l + E_m - E_n)t}{\hbar}} \right\rangle_t. \quad (3.13)$$

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 $l = m$,

entonces

$$\begin{aligned} \langle \text{Tr}_S(\rho_S(t) - \omega_S)^2 \rangle_t &= \sum_{k \neq l} |c_k|^2 |c_l|^2 \text{Tr}_S[\text{Tr}_B(|E_k\rangle \langle E_l|) \text{Tr}_B(|E_k\rangle \langle E_l|)] \\ &= \sum_{k \neq l} |c_k|^2 |c_l|^2 \sum_{ss'bb'} \langle sb|E_k\rangle \langle E_l|s'b\rangle \langle s'b'|E_l\rangle \langle E_k|sb'\rangle \\ &= \sum_{k \neq l} |c_k|^2 |c_l|^2 \sum_{ss'bb'} \langle sb|E_k\rangle \langle E_k|sb'\rangle \langle s'b'|E_l\rangle \langle E_l|s'b\rangle \\ &= \sum_{k \neq l} |c_k|^2 |c_l|^2 \text{Tr}_B[\text{Tr}_S(|E_k\rangle \langle E_k|) \text{Tr}_S(|E_l\rangle \langle E_l|)] \\ &= \sum_{k \neq l} \text{Tr}_B[\text{Tr}_S(|c_k|^2 |E_k\rangle \langle E_k|) \text{Tr}_S(|c_l|^2 |E_l\rangle \langle E_l|)] \\ &= \text{Tr}_B \omega_B^2 - \sum_k |c_k|^4 \text{Tr}_S[\text{Tr}_B(|E_k\rangle \langle E_k|)]^2 \leq \text{Tr}_B(\omega_B^2). \quad (3.14) \end{aligned}$$

La última igualdad se encuentra recordando la definición de ω_B y observando la segunda igualdad. Por la subaditividad débil de la entropía de Rényi:

$$\text{Tr}(\omega^2) \geq \frac{\text{Tr}_B(\omega_B^2)}{\text{rank}(\rho_S)} \geq \frac{\text{Tr}_B(\omega_B^2)}{d_S}. \quad (3.15)$$

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

$$\langle D(\rho_S(t), \omega_S) \rangle_t \leq \frac{1}{2} \sqrt{d_S \text{Tr}_B(\omega_B^2)} \leq \frac{1}{2} \sqrt{d_S^2 \text{Tr}(\omega^2)} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_S^2}{d^{eff}(\omega)}}. \quad (3.16)$$

Este resultado da base para hablar de la termalización de una forma matemática, 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 quieren recodar. 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 universo, no se ha especificado nada del baño ni del subsistema. El baño no está necesariamente en equilibrio no se le ha dado ninguna interpretación con respecto a la termodinámica usual 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 universo (subsistema y baño) no es importante, solo es importante para el teorema 3.2.1 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.

El teorema 3.2.1 puso una cota a la fluctuación de $\rho_S(t)$ alrededor de ω_S esto ya es un inicio pero aunque esta cota exista no se ha hablado de cuales sistemas tendrán fluctuaciones suficientemente pequeñas para poder decir que se encuentra en equilibrio. Ahora se explorará cuáles son los estados que se equilibrarán, el siguiente teorema dirá cuales estados tienen fluctuaciones muy pequeñas.

Teorema 3.2.2. *1. 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*

$$\langle d^{eff}(\omega) \rangle_\psi \geq \frac{d_R}{2}. \quad (3.17)$$

2. 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 exponencialmente pequeña:

$$\Pr_\psi\{d^{eff}(\omega) < \frac{d_R}{4}\} \leq 2 \exp\{-C\sqrt{d_R}\}, \quad (3.18)$$

con constante $c = \frac{(\ln 2)^2}{72\pi^3} \approx 10^{-4}$.

Demostración

1. Primero se prueba la cota de la pureza esperada de ω . Para esta prueba se usarán varios resultados ya empleados en el capítulo anterior como: la operación "flip" F y la identidad $\langle |\psi\rangle \langle \psi| \otimes |\psi\rangle \langle \psi| \rangle_\psi = \frac{\Pi_{RR}(\mathbb{1}+F)}{d_R(d_R+1)}$. Además se usará la notación de $|E_k\rangle \equiv |k\rangle$ y $|E_k\rangle \otimes |E_l\rangle \equiv |kl\rangle$. Se introduce el mapeo de desfase como $\$[\rho] \equiv \sum_k |k\rangle \langle k| \rho |k\rangle \langle k|$, implica que $\omega = \langle |\psi\rangle \langle \psi| \rangle_t = \$[|\psi\rangle \langle \psi|]$. Entonces usando la operación "flip" se escribe $\langle \text{Tr}(\omega)^2 \rangle_\psi$ como

$$\begin{aligned}
\langle \text{Tr}(\omega)^2 \rangle_\psi &= \langle \text{Tr}(\omega \otimes \omega) F \rangle_\psi \\
&= \text{Tr}(\$ \otimes \$ [|\psi\rangle \langle \psi| \otimes |\psi\rangle \langle \psi|]_\psi F) \\
&= \text{Tr} \left(\$ \otimes \$ \left[\frac{\Pi_{RR}(\mathbb{1} + F)}{d_R(d_R + 1)} \right] F \right) \\
&= \sum_{kl} \text{Tr} \left(|kl\rangle \langle kl| \left(\frac{\Pi_{RR}(\mathbb{1} + F)}{d_R(d_R + 1)} \right) |kl\rangle \langle kl| F \right) \\
&= \sum_{kl} \text{Tr}(|kl\rangle \langle lk|) \left(\frac{\langle kl| \Pi_{RR}(|kl\rangle + |lk\rangle)}{d_R(d_R + 1)} \right) \\
&= \sum_k \frac{2 \langle kk| \Pi_{RR} |kk\rangle}{d_R(d_R + 1)} \\
&\leq \sum_k \frac{2 \langle k| \Pi_R |k\rangle}{d_R(d_R + 1)} < \frac{2}{d_R} \quad (3.19)
\end{aligned}$$

se sigue directamente que

$$\langle d^{eff}(\omega) \rangle_\psi = \left\langle \frac{1}{\text{Tr}(\omega)^2} \right\rangle_\psi \geq \frac{1}{\langle \text{Tr}(\omega)^2 \rangle_\psi} > \frac{d_R}{2} \quad (3.20)$$

concluyendo la prueba.

2. Para demostrar la segunda parte se usará el lema de levy pero no directamente sino sobre la función

$$f(\psi) \equiv f(\vec{x}(\psi)) = \ln \left(\text{Tr} \left(\tilde{\$} [|\psi\rangle \langle \psi|]^2 \right) \right) \quad (3.21)$$

Donde el operador $\tilde{\$}$ actúa sobre el subespacio $\mathcal{H}_T \subseteq \mathcal{H}$ generado por los estados de energía con proyección diferente de cero sobre \mathcal{H}_R (estados que satisfagan $\langle k| \Pi_R |k\rangle \neq 0$). El subespacio \mathcal{H}_T contiene todos los estados que pueden aparecer durante la evolución temporal

del estado inicial en \mathcal{H}_R , y $\tilde{\$}$ mapea estos estados de regreso a \mathcal{H}_R de acuerdo a

$$\tilde{\$}[\rho] = \sum_k |\tilde{k}\rangle \langle k| \rho |k\rangle \langle \tilde{k}| \quad y \quad |\tilde{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle k| \Pi_R |k\rangle}} \Pi_R |k\rangle. \quad (3.22)$$

nótese que cuando el Hamiltoniano conmuta con Π_R , $\tilde{\$}$ es idéntico al $\$$ en \mathcal{H}_T . Calculando el promedio de la función se encuentra

$$\begin{aligned} & \left\langle \ln \left(\text{Tr} \left(\tilde{\$} [|\psi\rangle \langle \psi|^2] \right) \right) \right\rangle_\psi \\ & \leq \ln \left\langle \text{Tr} \left(\tilde{\$} [|\psi\rangle \langle \psi|^2] \right) \right\rangle_\psi \\ & = \ln \text{Tr} \left(\tilde{\$} \otimes \tilde{\$} [|\psi\rangle \langle \psi| \otimes |\psi\rangle \langle \psi|]_\psi F \right) \\ & = \ln \left(\text{Tr} \left(\tilde{\$} \otimes \tilde{\$} \left[\frac{\Pi_{RR}(\mathbb{1} + F)}{d_R(d_R + 1)} F \right] \right) \right) \\ & = \ln \left(\sum_{kl} \text{Tr} \left(|\tilde{k}l\rangle \langle kl| \left(\frac{\Pi_{RR}(\mathbb{1} + F)}{d_R(d_R + 1)} \right) |kl\rangle \langle \tilde{k}l| \right) \right) \\ & = \ln \left(\sum_{kl} \langle \tilde{k}l | |kl\rangle \left(\frac{\langle kl | \Pi_{RR}(|kl\rangle + |lk\rangle)}{d_R(d_R + 1)} \right) \right) \\ & \leq \ln \left(\frac{2}{d_R(d_R + 1)} \sum_{kl} \langle lk | \Pi_{RR} |kl\rangle \right) \\ & = \ln \left(\frac{2}{d_R(d_R + 1)} \sum_k \langle k | \Pi_R |k\rangle \right) < \ln \left(\frac{2}{d_R} \right). \quad (3.23) \end{aligned}$$

Para acotar la constante de Lipchitz de la función $f(\psi)$ se usará otra función

$$g(\psi) = \ln \text{Tr} \left[\left(\sum_n |\hat{n}\rangle \langle \hat{n}| \tilde{\$} [|\psi\rangle \langle \psi|] |\hat{n}\rangle \langle \hat{n}| \right)^2 \right] \quad (3.24)$$

donde $|\hat{n}\rangle$ es una base ortonormal de \mathcal{H}_R . Escribiendo

$$t_{nk0} = \text{Re}[\langle \hat{n} | |\tilde{k}\rangle \langle k | \psi \rangle] \quad y \quad t_{nk1} = \text{Im}[\langle \hat{n} | |\tilde{k}\rangle \langle k | \psi \rangle] \quad (3.25)$$

se sigue que

$$g(\psi) = \ln \text{Tr} \left[\left(\sum_{nkz} t_{nkz}^2 |\hat{n}\rangle \langle \hat{n}| \right)^2 \right] = \ln \sum_n \left(\sum_{kz} t_{nkz}^2 \right)^2. \quad (3.26)$$

Para encontrar la constante de Lipschitz de g es suficiente con encontrar una cota superior al gradiente

$$\frac{\partial g}{\partial t_{nkz}} = \frac{1}{\sum_{n'} (\sum_{k'z'} t_{n'k'z'}^2)^2} 2 \cdot 2 \cdot t_{nkz} \sum_{k'z'} t_{nk'z'}^2. \quad (3.27)$$

Introduciendo la notación $p_n = \sum_{kz} t_{nkz}^2$, y notando que $\sum_n p_n = 1$, se encuentra

$$\begin{aligned} |\nabla g|^2 &= \sum_{nkz} \left(\frac{\partial g}{\partial t_{nkz}} \right)^2 = \frac{16 \sum_n p_n^3}{(\sum_n p_n^2)^2} \\ &\leq \frac{16 (\sum_n p_n^2)^{3/2}}{(\sum_n p_n^2)^2} \\ &= \frac{16}{(\sum_n p_n^2)^{1/2}} \\ &\leq 16 \sqrt{d_R}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

Por lo tanto la constante de Lipschitz de g llega hasta $4\sqrt[4]{d_R}$. Para obtener la constante de Lipschitz de f se nota que $g(\psi) \geq f(\psi)$ la igualdad se da si $\{|\hat{n}\rangle\}$ es una base propia de $\text{Tr}_B |\psi\rangle \langle \psi|$. Ahora para dos vectores cuales quiera, sin perdida de generalidad asumir $f(\psi_1) \leq f(\psi_2)$, y tomar $\{|\hat{n}\rangle\}$ como la base propia de $\text{Tr}_B |\psi\rangle \langle \psi|$. Entonces,

$$f(\psi_1) - f(\psi_2) \leq g(\psi_1) - g(\psi_2) \leq 4\sqrt[4]{d_R} \|\psi_1 - \psi_2\|_2, \quad (3.29)$$

entonces la constante de Lipschitz para f está acotada por $4\sqrt[4]{d_R}$. Aplicando el lema de Levy a $f(\psi)$ y observando que $\Pr\{x > a\} \leq b$ y $x \geq y$ implica $\Pr\{y > a\} \leq b$ sustituyendo la cota en $\langle f(\psi) \rangle_\psi$ obtenida arriba entonces

$$\ln \left(\text{Tr} \left(\tilde{\$} [|\psi\rangle \langle \psi|]^2 \right) \right) \geq \ln \left(\text{Tr} (\$ [|\psi\rangle \langle \psi|]^2) \right) \quad (3.30)$$

esto da

$$\Pr_{\psi} \left\{ \ln \left(\text{Tr} (\$ [|\psi\rangle \langle \psi|]^2) \right) > \ln \frac{2e^{\epsilon}}{d_R} \right\} \leq 2 \exp \left(-\frac{\epsilon^2 \sqrt{d_R}}{72\pi^3} \right) \quad (3.31)$$

Tomando la desigualdad que está dentro de los corchetes multiplicándola por menos y tomando su exponencial se llega

$$\Pr_{\psi} \left\{ d^{eff}(\omega) < \frac{d_R}{2e^{\epsilon}} \right\} \leq 2 \exp \left(-\frac{\epsilon^2 \sqrt{d_R}}{72\pi^3} \right). \quad (3.32)$$

y haciendo que $\epsilon = \ln 2$ se llega al resultado esperado.

La primera parte del teorema 3.2.2 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 $d^{eff}(\omega)$ grande esto 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.

Usando en teorema 3.2.2 se puede ver qué ocurre con un estado escogido de forma aleatoria del espacio total \mathcal{H} , un estado genérico. El análisis se sigue simplemente poniendo $d_R = d$ gracias a esto se comprende que $d^{eff}(\omega) \sim d$ ya que hay una probabilidad exponencialmente baja para que se dé el caso en que $d^{eff} < \frac{d}{4}$, como $d = d_S d_B$ la cota para las fluctuaciones queda $\sqrt{\frac{d_S}{d_B}}$. 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.

Se podría suponer que con los teoremas presentados hasta el momento el problema de termalización se ha resuelto mayoritariamente pero qué ocurre con los sistemas que están lejos del equilibrio. Con lo dicho arriba sobre los estados genéricos se pensaría que cualquier sistema debe llegar al equilibrio pero esto no es cierto debido a que 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 común, 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 $|\phi\rangle_B \in \mathcal{H}_B^R \subseteq \mathcal{H}_B$. Esta restricción mantiene la generalidad de seguir en cualquier espacio de Hilbert restringido. 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 3.2.2 para $\mathcal{H}_R = |\psi\rangle_S \otimes \mathcal{H}_B^R$ entonces $d_R = d_B^R$ esto da como resultado que para casi todos los estados iniciales del baño y cualquier estado del subsistema este se equilibrará para estas condiciones, mientras que $d_B^R \gg d_S^2$. El mecanismo en que el subsistema se equilibra puede ser bastante complicado ya que el baño pasa por muchos estados diferentes y no llega al equilibrio. Aunque el baño no llegue al equilibrio y se salga del subespacio \mathcal{H}_B^R 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 $\text{rank}(\rho_B(t)) = \text{rank}(\rho_S(t)) \geq d_S$ como la dimensión efectiva de un estado es siempre menor a su rango se obtiene

$$d^{eff}(\rho_B(t)) \leq d_S \quad (3.33)$$

pero

$$d^{eff}(\omega_B) \geq \frac{d_{eff}(\omega)}{d_S} \quad (3.34)$$

Pero para un estado genérico la segunda parte del teorema 3.2.2 dice $d^{eff}(\omega) > \frac{d_R}{4}$ se tiene

$$d^{eff}(\omega_B) \geq \frac{d^R}{4d_S} = \frac{d_B^R}{4d_S} \gg d_S \geq d^{eff}(\rho_B(t)). \quad (3.35)$$

Lo trabajado anteriormente muestra cómo subsistemas de dimensión pequeña en comparación con el ambiente se equilibrarán. Ahora se verá 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 3.2.3. *1. Casi todos los estados iniciales de un subespacio restringido bastante grande llevan al mismo estado de equilibrio de un subsistema pequeño. En particular, con $\langle \cdot \rangle_\psi$ siendo el promedio sobre estados puros aleatoriamente uniformes $|\psi(0)\rangle \in \mathcal{H}_R \subset \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ y $\Omega_S = \langle \omega_S^\psi \rangle_\psi$:*

$$\langle D(\omega_S^\psi, \Omega_S) \rangle_\psi \leq \sqrt{\frac{d_S \delta}{4d_R}} \leq \sqrt{\frac{d_S}{4d_R}}. \quad (3.36)$$

La primera desigualdad es más estricta pero más complicada

$$\delta = \sum_k \langle E_k | \frac{\Pi_R}{d_R} | E_k \rangle \text{Tr}_S(\text{Tr}_B(|E_k\rangle \langle E_k|))^2 \leq 1, \quad (3.37)$$

donde Π_k es el proyector sobre \mathcal{H}_R .

2. 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 $\epsilon^2 d_R$:

$$\Pr_{\psi} \left\{ D(\omega_S^\psi, \Omega_S) > \frac{1}{2}\sqrt{\frac{d_S\delta}{d_R}} + \epsilon \right\} \leq 2\exp(-C'\epsilon^2 d_R), \quad (3.38)$$

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

Demostración

1. Se usa la relación ya establecida entre la distancia de traza y la distancia de Hilbert-Schmidt

$$\begin{aligned} \langle D(\omega_S, \langle \omega_S \rangle_\psi) \rangle_\psi &\leq \left\langle \frac{1}{2} \sqrt{d_S \operatorname{Tr}(\omega_S, \langle \omega_S \rangle_\psi)^2} \right\rangle_\psi \\ &\leq \frac{1}{2} \sqrt{d_S \left\langle \operatorname{Tr}(\omega_S - \langle \omega_S \rangle_\psi)^2 \right\rangle_\psi}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Ahora se miran las cotas del término que es promediado

$$\begin{aligned}
& \left\langle \text{Tr} \left(\omega_S, \langle \omega_S \rangle_\psi \right)_\psi^2 \right\rangle_\psi \\
&= \left\langle \text{Tr}(\omega_S^2)_\psi \right\rangle - \text{Tr}_S(\langle \omega_S^2 \rangle_\psi) \\
&= \text{Tr}((\langle \omega_S \otimes \omega_S \rangle_\psi - \langle \omega_S \rangle_\psi \otimes \langle \omega_S \rangle_\psi) F) \\
&= \text{Tr}_{SS} \left(\text{Tr}_{BB} \left(\$ \otimes \$ \left[\langle |\psi\rangle \langle \psi| \otimes |\psi\rangle \langle \psi| \rangle_\psi - \frac{\Pi_R}{d_R} \otimes \frac{\Pi_R}{d_R} \right] \right) F \right) \\
&= \text{Tr}_{SS} \left(\text{Tr}_{BB} \left(\$ \otimes \$ \left[\frac{\Pi_{RR}(\mathbb{1} + F)}{d_R(d_R + 1)} - \frac{\Pi_{RR}}{d_R^2} \right] \right) F \right) \\
&\leq \text{Tr}_{SS} \left(\text{Tr}_{BB} \left(\$ \otimes \$ \left[\frac{\Pi_{RR} F}{d_R^2} \right] \right) F \right) \\
&= \sum_{kl} \text{Tr}_{SS} \left(\text{Tr}_{BB} \left(|kl\rangle \langle kl| \frac{\Pi_{RR}}{d_R^2} |lk\rangle \langle kl| \right) F \right) \\
&= \sum_{kl} \frac{\langle kl | \Pi_{RR} | lk \rangle}{d_R^2} \text{Tr}_S(\text{Tr}_B(|k\rangle \langle k|) \text{Tr}_B(|l\rangle \langle l|)) \\
&\leq \sum_{kl} \frac{\langle k | \Pi_R | l \rangle \langle l | \Pi_R | k \rangle}{d_R^2} \text{Tr}_S \left(\frac{(\text{Tr}_B(|k\rangle \langle k|))^2 + (\text{Tr}_B(|l\rangle \langle l|))^2}{2} \right) \\
&= \frac{1}{d_R} \sum_k \langle k | \frac{\Pi_R}{d_R} | k \rangle \text{Tr}_S \left((\text{Tr}_B |k\rangle \langle k|)^2 \right) \\
&\leq \frac{1}{d_R} \sum_k \langle k | \frac{\Pi_R}{d_R} | k \rangle = \frac{1}{d_R} \quad (3.40)
\end{aligned}$$

en la segunda desigualdad se usó el hecho que $\text{Tr}_S(\text{Tr}_B |k\rangle \langle k| - \text{Tr}_B |l\rangle \langle l|)^2 \geq 0$ es la traza de un operador positivo. Ahora insertando la tercera línea contando desde el final y la última línea a 3.39 se demuestra el resultado.

2. Para demostrar la segunda parte que todos los estados $|\psi\rangle$ llevan al mismo estado de equilibrio, se usa el ya conocido lema de Levy. Se aplica este lema directamente a la función $f(\psi) \equiv D(\omega_S^\psi, \Omega_S)$ en la hipersfera de dimensión $2d_R - 1$ de estados cuánticos. Para hallar la constante de Lipschitz se sigue de la misma manera que en el capítulo

anterior

$$\begin{aligned}
|D(\omega_S^{\psi_1}, \Omega_S) - D(\omega_S^{\psi_2}, \Omega_S)| &\leq D(\omega_S^{\psi_1}, \omega_S^{\psi_2}) \\
&\leq D(\omega^{\psi_1}, \omega^{\psi_2}) \\
&= \sqrt{1 - |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2} \\
&\leq ||\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle|_2. \quad (3.41)
\end{aligned}$$

entonces la constante de Lipschitz satisface $\eta \leq 1$. Sustituyendo en el lema de Levy junto con el valor promedio encontrado en la primera parte de esta demostración se llega al resultado deseado.

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 $\mathcal{H}_R = |\psi\rangle \otimes \mathcal{H}_R^B$ 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.

Capítulo 4

Termalización y los estados de Gibbs

Capítulo 5

Microreversibilidad de sistemas clásicos no autónomos

Capítulo 6

Conclusiones

