

ESTUDIO DE DISTRIBUCIONES DE CUASI-PROBABILIDAD Y FLUCTUACIONES DE
TRABAJO EN SISTEMAS CUÁNTICOS FUERA DEL EQUILIBRIO

Maximiliano Pablo Murgia

Director: Augusto J. Roncaglia

Tesis de Licenciatura
Dept. de Física - FCEyN - UBA

21 de marzo de 2025

Resumen

El concepto de trabajo es uno de los más básicos y fundamentales dentro de la física. Por lo cual, resulta de extrema importancia formular una definición general válida para cualquier sistema cuántico. Sin embargo, esta tarea presenta serias dificultades. Esto se debe, en una primera instancia, a que muchos de los conceptos subyacentes de su definición clásica no se pueden trasladar al mundo cuántico. Es más, puede mostrarse que resulta imposible describir su estadística por medio de una distribución de probabilidad si se pretende que, al mismo tiempo, cumpla con una serie de requisitos que resultan razonables para una definición adecuada del mismo. Esto ha provocado que la comunidad científica buscara enfoques alternativos para dar respuesta a esta problemática, siendo uno de ellos el uso de distribuciones de cuasi-probabilidad.

En esta tesis, se desarrolla en detalle el problema central que presenta dar con una definición de trabajo satisfactoria y cómo esto se resuelve mediante el uso de distribuciones de cuasi-probabilidad. En particular, se analizan las distribuciones de Margenau-Hill, Full-Counting y Kirkwood-Dirac, contrastando sus ventajas y desventajas a la hora de describir procesos que involucran estados con coherencias cuánticas. Además, se realiza el estudio de una distribución de cuasi-probabilidad que fue definida recientemente y que se encuentra basada en la función de Wigner. Se analizan diversos procesos que ocurren fuera del equilibrio para un sistema de dos niveles, hasta en aquellos que incluyen ataques adiabáticos.

Luego, se busca extender la identidad de Jarzynski conocida de la termodinámica estadística clásica a estados que no necesariamente son térmicos o, inclusive, presentan coherencias en el inicio de la dinámica. Para ello, se obtienen distintas extensiones basadas en las distribuciones de cuasi-probabilidad desarrolladas.

Se concluye que la definición de trabajo obtenida con el formalismo de cuasi-probabilidades resulta una propuesta superadora frente a los enfoques desarrollados mediante distribuciones de probabilidad. La aparición de valores por fuera de los reales positivos (valores de no-clasicalidad) brindados por las diferentes distribuciones de cuasi-probabilidad demuestra la presencia de coherencias cuánticas al inicio de la evolución. Por otra parte, se obtuvieron extensiones a la identidad de Jarzynski para cada una de las distribuciones de cuasi-probabilidad estudiadas, las cuales corroboran, bajo las hipótesis y límites apropiados, el resultado conocido de la termodinámica estadística clásica.

Agradecimientos

A lo largo de estos años, muchas personas han contribuido para que yo pudiera llegar hasta aquí. Nada de esto habría sido posible sin su apoyo y colaboración.

En primer lugar, quiero expresar mi más profundo agradecimiento a Augusto Roncaglia, mi director de tesis, por su dedicación, orientación y, sobre todo, por confiar en mí. Ha sido un verdadero placer trabajar con él, y me llena de alegría poder seguir compartiendo este camino durante mi doctorado.

También quiero agradecer a los amigos con quienes compartí mi carrera universitaria. Cada uno de ellos me ayudó enormemente y convirtió este recorrido en una experiencia mucho más enriquecedora y placentera. En especial, quiero mencionar a Lautaro, Nicolás y Lionel.

A mi hermana, Megan, quien ha sido un pilar fundamental en mi vida. No sé dónde estaría hoy sin su apoyo incondicional. Saber que está dispuesta a escucharme y acompañarme en cada paso que doy es un enorme consuelo.

Por último, quiero reconocer a todas las personas que me han educado a lo largo de mi vida: en la universidad, en la escuela secundaria, primaria, inicial y, por supuesto, fuera del ámbito académico. En particular, quiero agradecer a la educación pública, que ha sido la base de mi formación y ha moldeado en gran medida a la persona en la que me he convertido.

Índice general

Introducción	13
1. Trabajo y teoremas de fluctuación en sistemas cuánticos	17
1.1. La problemática de definir el trabajo en mecánica cuántica	17
1.1.1. Operador de trabajo	19
1.1.2. Protocolo TPM	21
1.2. Teoremas de fluctuación	25
1.2.1. Fluctuaciones en el protocolo TPM	27
1.3. Teorema adiabático	30
1.3.1. Un atajo adiabático	32
1.3.2. Comportamiento adiabático en el protocolo TPM	32
2. Medición del trabajo cuántico	35
2.1. Mediciones de un sistema cuántico	35
2.2. Medición generalizada del trabajo	36
2.2.1. Protocolo TPM	36
2.2.2. Protocolo SM	38
2.3. Inexistencia de la distribución de probabilidad general de trabajo	46
3. Distribuciones de cuasi-probabilidad de trabajo	51
3.1. Cuasi-probabilidades	52
3.1.1. Definición y propiedades	52
3.1.2. Distribución “q-class” de trabajo	55
3.2. Distribución MHQ de trabajo	61
3.3. Distribución FCQ de trabajo	65
3.4. Distribución KDQ de trabajo	67
3.5. Función de Wigner	75
4. Distribución WSM de trabajo	79
4.1. Distribución de cuasi-probabilidad WSM	79
4.1.1. Propiedades generales	85
4.1.2. Comportamiento adiabático	90
4.1.3. Distribución WSM de trabajo en <i>time-reversal</i>	91
4.2. Dinámica de la distribución WSM en un sistema de dos niveles	93
4.2.1. Caracterización del sistema	94

4.2.2. Uso de un protocolo lineal	100
4.2.3. Evolución de la distribución WSM	105
4.2.4. Régimen adiabático de la distribución WSM	113
4.2.5. Comportamiento de la distribución WSM en <i>time-reversal</i>	126
5. Extensiones de la identidad de Jarzynski	131
5.1. Primera extensión de la identidad de Jarzynski	131
5.2. Segunda extensión de la identidad de Jarzynski	133
5.2.1. Distribución MHQ	134
5.2.2. Distribución FCQ	134
5.2.3. Distribución KDQ	135
5.2.4. Distribución WSM de trabajo	136
Conclusiones	139
A. Teorema de Crooks	141
B. Límite adiabático	143
C. Atajo adiabático	147
D. Mediciones en mecánica cuántica	151
E. Formalismo para cuasi-probabilidades reales	157
F. Reconstrucción de la estadística “q-class” de trabajo	163
G. Función de no-clasicalidad	167
Bibliografía	169

Índice de figuras

2.1. Esquema de una medición generalizada para medir el trabajo. El sistema \mathcal{S} se acopla con la <i>ancilla</i> \mathcal{A} mediante una interacción (con operadores unitarios y proyectando como rige el teorema de Neumark) tal que, a la salida, el sistema auxiliar se encuentre en el estado $ w\rangle$. Al registrar el resultado w , el sistema \mathcal{S} se encuentra en un estado ρ_w que depende de los detalles de la interacción.	39
2.2. Esquema de la implementación del POVM propuesto para medir trabajo. La diferencia de energía del sistema \mathcal{S} antes y después de la evolución \mathcal{U} se codifica en la <i>ancilla</i> \mathcal{A} mediante dos operaciones entrelazantes (interacciones) $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2$. A la salida, el sistema auxiliar se encuentre en el estado $ w = \tilde{E}_m - E_n\rangle$ mientras que el sistema \mathcal{S} se encuentra en un estado ρ_w	41
4.1. Valores de $w(t)$ en función del protocolo $\lambda(t)$. La recta vertical de trazo corto indica el valor $\lambda = 2/5$. Puede verse que los valores de $w_{++}(t)$ y $w_{--}(t)$ son los únicos que logran cruzarse y lo hacen cuando el protocolo toma valores $\lambda = 0$ y $\lambda = 2/5$. Para graficar, se consideró $E = 1$	100
4.2. Valores de $E_{\pm}(t)$ en función del protocolo $\lambda(t)$. La recta vertical de trazo corto indica el valor $\lambda = 1/5$. Puede verse que el <i>gap</i> mínimo entre los niveles de energía ocurre cuando $\lambda = 1/5$ y coincide cuando E_{\pm} consigue su valor mínimo/máximo. Para graficar, se consideró $E = 1$	101
4.3. Coeficientes β_{+-}, β_{-+} en función de t/T para distintos T elegidos. Puede verse que $\beta_{+-}(t) > 0$ y $\beta_{-+}(t) < 0$, siendo además $\beta_{-+}(t) = -\beta_{+-}(t)$	102
4.4. Coeficiente β_{+-} en función de t/T para distintos T elegidos. Puede verse que los máximos de las curvas son alcanzados en $t = t_{min}$ (recta vertical de trazo corto), y sus valores máximos coinciden con la cota correspondiente a cada curva (rectas horizontales de trazo corto).	102
4.5. Probabilidades de transición $\text{Prob}(e\rangle \rightarrow -(t)\rangle)$ en función del tiempo normalizado t/T para distintas duraciones del protocolo T . La línea de trazo corto representa lo esperado en el límite adiabático, siendo $T = 10$ y $T = 100$ los que mejor cumplen dicha aproximación.	104
4.6. Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado $\rho_{\mathcal{S}_1}$ con $T = 1$ y $\sigma = 0,5$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{2}T$; (c) $t = T$	105

4.7. Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_1} . Estos tres valores coinciden entre sí debido a la ausencia de coherencias cuánticas en el estado inicial. Se tomó como ejemplo $T = 1$ y $\sigma = 0,5$	106
4.8. Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_2} con $T = 1$ y $\sigma = 0,5$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{5}T$; (c) $t = \frac{2}{5}T$; (d) $t = \frac{3}{5}T$; (e) $t = \frac{4}{5}T$; (f) $t = T$	107
4.9. Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_2} . Estos tres valores coinciden entre sí debido a la ausencia de coherencias cuánticas en el estado inicial. Se tomó como ejemplo $T = 1$ y $\sigma = 0,5$	108
4.10. Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_3} con $T = 1$ y $\sigma = 0,5$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{5}T$; (c) $t = \frac{2}{5}T$; (d) $t = \frac{3}{5}T$; (e) $t = \frac{4}{5}T$; (f) $t = T$	109
4.11. Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_3} . Estos tres valores no coinciden entre sí debido a la presencia de coherencias cuánticas en el estado inicial. Se tomó como ejemplo $T = 1$ y $\sigma = 1,0$	110
4.12. Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_3} con parámetros $T = 1$ y $\sigma = 0,1$. Debido a que se cumple el límite $8\sigma^2 \ll (E_n - E_{n'})^2 \forall n \neq n'$, los valores medios de trabajo del protocolo TPM y de la distribución $P_W(w)$ coinciden bastante bien. Sin embargo, el valor medio de la diferencia de energía queda distante de estos dos.	111
4.13. Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_3} con parámetros $T = 1$ y $\sigma = 2,0$. Debido a que se cumple el límite $8\sigma^2 \gg (E_n - E_{n'})^2 \forall n \neq n'$, los valores medios de trabajo de la distribución $P_W(w)$ y la variación media de energía coinciden bastante bien. Sin embargo, el valor medio de trabajo del protocolo TPM queda distante de estos dos.	111
4.14. Estado final de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para los estados: (a) ρ_{S_2} (sin coherencias); (b) ρ_{S_3} (con coherencias). Los parámetros utilizados son $T = 1$ y $\sigma = 0,1$	112
4.15. Relación $\sqrt{\frac{\pi}{2}} \langle w \rangle_{\tau=0}$ vs. σ cuya pendiente está relacionada con la variación media de energía del sistema $\langle \Delta E \rangle$. Se tomó como ejemplo $T = 1$ y el estado ρ_{S_3}	113
4.16. Estado final de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_1} . Se usó una dispersión $\sigma = 0,5$ y un tiempo total: (a) $T = 0$; (b) $T = 1$; (c) $T = 10$	113
4.17. Valores medios de energía $\langle \Delta E \rangle$ y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM al final de la evolución en función de la duración del protocolo T para el estado inicial ρ_{S_1} . Esta gráfica es independiente de la dispersión σ utilizada. Podemos ver que la misma converge al valor $\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle = E$ para $T \rightarrow \infty$	114

4.18. Probabilidades de no-transición para el estado ρ_{S_1} en función del tiempo normalizado t/T para distintos tiempos T de duración del protocolo. En línea de trazo corto se muestra cómo deberían comportarse, en el límite adiabático, cada uno de los estados.	115
4.19. Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_1} con $T = 10$ y $\sigma = 0,5$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{5}T$; (c) $t = \frac{2}{5}T$; (d) $t = \frac{3}{5}T$; (e) $t = \frac{4}{5}T$; (f) $t = T$	116
4.20. Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_1} con parámetros $T = 10$ y $\sigma = 0,5$. Se observa que estas tres magnitudes coinciden, a todo tiempo, con la forma de $w_{++}(t)$, evidenciando el comportamiento adiabático.	117
4.21. Estado final de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_2} . Se usó una dispersión $\sigma = 0,1$ y un tiempo total: (a) $T = 0$; (b) $T = 1$; (c) $T = 10$	118
4.22. Valores medios de energía $\langle \Delta E \rangle$ y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM al final de la evolución en función de la duración del protocolo T para el estado inicial ρ_{S_2} . Esta gráfica es independiente de la dispersión σ utilizada. Podemos ver que la misma converge al valor $\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle = E/4$ para $T \rightarrow \infty$	119
4.23. Probabilidades de no-transición para el estado ρ_{S_2} en función del tiempo normalizado t/T para distintos tiempos T de duración del protocolo. En línea de trazo corto se muestra cómo deberían comportarse, en el límite adiabático, cada uno de los estados.	120
4.24. Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_2} con $T = 10$ y $\sigma = 0,1$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{5}T$; (c) $t = \frac{2}{5}T$; (d) $t = \frac{3}{5}T$; (e) $t = \frac{4}{5}T$; (f) $t = T$	121
4.25. Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_2} con parámetros $T = 10$ y $\sigma = 0,1$. Se observa que estas tres magnitudes coinciden a todo tiempo (debido a que el estado inicial no presenta coherencias) adoptando al final de la evolución el valor $E/4$ (debido al comportamiento adiabático).	122
4.26. Estado final de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_3} . Se usó una dispersión $\sigma = 0,1$ y un tiempo total: (a) $T = 0$; (b) $T = 4$; (c) $T = 100$	123
4.27. Valores medios de energía $\langle \Delta E \rangle$ y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM al final de la evolución en función de la duración del protocolo T para el estado inicial ρ_{S_3} . Estas gráficas son obtenidas mediante una dispersión $\sigma = 1,0$. Podemos ver que las mismas convergen al valor $\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle = E/4$ para $T \rightarrow \infty$	124
4.28. Probabilidades de no-transición para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo normalizado t/T para distintos tiempos T de duración del protocolo. En línea de trazo corto se muestra cómo deberían comportarse, en el límite adiabático, cada uno de los estados.	125
4.29. Probabilidades de no-transición para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo normalizado t/T para distintos tiempos T de duración del protocolo en la dinámica del atajo adiabático. En línea de trazo corto se muestra cómo deberían comportarse, en el límite adiabático del Hamiltoniano original, cada uno de los estados.	126

4.30. Variación media de energía que se obtiene en los protocolos directo e inverso para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo T de duración del protocolo. Podemos notar que ambas curvas presentan una simetría temporal entre ellas.	127
4.31. Valor medio de trabajo que se obtiene en los protocolos directo e inverso para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo T de duración del protocolo. Las imágenes corresponden a las distribuciones (a) WSM para $\sigma = 1,0$; (b) TPM. Podemos notar que cada gráfica no presenta una simetría temporal en sus respectivas curvas.	127
4.32. Valor medio de trabajo que se obtiene en los protocolos directo e inverso para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo T de duración del protocolo. Las imágenes corresponden a la distribución WSM con dispersiones (a) $\sigma = 0,5$; (b) $\sigma = 2,0$. Las gráficas coinciden bastante con lo obtenido respecto a la distribución TPM y la variación media de energía, respectivamente.	128
4.33. Valor medio de trabajo que se obtiene en los protocolos directo e inverso para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo T de duración del protocolo. Las imágenes corresponden a la distribución WSM con dispersiones (a) $\sigma = 0,5$; (b) $\sigma = 2,0$. Las gráficas coinciden bastante con lo obtenido respecto a la distribución TPM y la variación media de energía, respectivamente. Para valores de $T \sim 100$ se muestra una convergencia que evidencia el régimen adiabático.	129

Introducción

La *termodinámica* surge a principios del siglo XIX como una teoría fenomenológica para describir el funcionamiento de las nuevas máquinas térmicas que surgían de la Revolución Industrial. Efectivamente, el objetivo fundamental de la termodinámica es describir el intercambio de energía entre sistemas macroscópicos complejos, reduciéndolos a la descripción de ciertas propiedades macroscópicas accesibles como pueden ser el volumen, la presión, la energía, el trabajo, el calor y la entropía. Desde sus inicios hasta el día de hoy, la termodinámica ha otorgado varias herramientas en una gran gama de aplicaciones, donde muchas de sus afirmaciones, como la segunda ley, son consideradas fundamentales. No obstante, a su incuestionable éxito, la termodinámica presenta ciertas limitaciones.

En primer lugar, la teoría solamente nos provee de afirmaciones sobre los valores medios de las propiedades de un sistema, como pueden ser la energía o el trabajo. Para sistemas macroscópicos, donde podemos fácilmente tener números de partículas del orden de 10^{23} , las fluctuaciones se vuelven despreciables y, efectivamente, una descripción en base a valores medios es suficiente. Sin embargo, con los avances tecnológicos de las últimas décadas, se ha vuelto rutinaria la observación y manipulación de sistemas de pocas moléculas (como es común en áreas de la biología y la química) o hasta de átomos individuales (como se hace en información cuántica). En estos casos, las fluctuaciones dominan y pueden ser fácilmente del mismo orden que los valores medios. Para dar un ejemplo, es posible observar experimentalmente realizaciones individuales donde se viola la segunda ley [1]. Por lo tanto, para este tipo de situaciones se vuelve imperativo tener una descripción no sólo en base a valores medios de las magnitudes termodinámicas, sino que también poder cuantificar rigurosamente sus fluctuaciones.

En segundo lugar, la termodinámica se ocupa principalmente de la descripción de sistemas en equilibrio térmico. Efectivamente, gran parte de las predicciones de la termodinámica son solamente válidas para procesos reversibles donde el sistema permanece siempre en equilibrio. Sin embargo, esto típicamente significa que las transformaciones deben ser *cuasiestáticas* y, por lo tanto, requieren de un tiempo infinito. Claramente, cualquier proceso real se llevará a cabo en tiempo finito. Es más, naturalmente surgen preguntas como cuál es el balance entre la duración de una transformación y la irreversibilidad (medida, por ejemplo, como entropía o calor). La segunda ley nos provee de algunas cotas generales sobre los procesos irreversibles, pero no nos permite obtener resultados exactos sobre ellos. Por otro lado, la *termodinámica endorreversible* (encabezada por Curzon y Ahlborn [2]) ataca el problema considerando sistemas que globalmente están fuera de equilibrio, pero que se pueden subdividir en subsistemas localmente sometidos a procesos reversibles. No obstante, el enfoque tiene sus propias limitaciones.

La búsqueda de un tratamiento sistemático y riguroso de las fluctuaciones llevó al desarrollo de lo que hoy se conoce como la *termodinámica estocástica* [3]. Los primeros resultados en esta área se deben a la teoría de respuesta lineal, que considera sistemas que se apartan poco respecto del

equilibrio. De esta forma, se pueden encontrar relaciones entre la evolución de las propiedades de un sistema que es perturbado fuera del equilibrio con las fluctuaciones de su estado sin perturbar [4, 5]. Este tipo de relaciones son casos particulares de lo que se ha venido a conocer como *teoremas de fluctuación*. Los teoremas de fluctuación se han convertido en una de las herramientas fundamentales de la termodinámica estocástica, especialmente para describir sistemas más allá del régimen lineal y sometidos a procesos fuera de equilibrio arbitrarios. En términos generales, los teoremas de fluctuación relacionan la estadística de magnitudes termodinámicas durante un proceso de no-equilibrio (como puede ser el trabajo o la producción de entropía) con propiedades del equilibrio térmico. En muchos casos, estos teoremas pueden interpretarse como refinamientos de la segunda ley que nos proveen de más información sobre las fluctuaciones de los procesos irreversibles. Entre los muchos teoremas de fluctuación que se han formulado, se destacan los célebres trabajos de Jarzynski [6] y Crooks [7], que llevan el nombre de *relaciones de trabajo*. De particular interés para nosotros será la notable identidad de Jarzynski, que relaciona la estadística del trabajo necesario para llevar a cabo una transformación de no-equilibrio arbitraria con la diferencia de energía libre de Helmholtz entre dos estados de equilibrio [6]. Los resultados de la termodinámica estocástica se han vuelto una herramienta esencial para tratar ciertos sistemas biológicos [8] y de la física molecular [9, 10]. Efectivamente, las igualdades de Jarzynski y de Crooks han sido verificadas en experimentos con moléculas individuales [11–13].

Todos los resultados hasta aquí resumidos fueron originalmente obtenidos en el marco de la mecánica clásica. Sin embargo, con los avances tecnológicos de los últimos años, surgió la idea de estudiar cómo funcionarían estos dispositivos en escala microscópica, lejos del régimen habitual donde se aplica la termodinámica clásica y donde la física es dictada por la mecánica cuántica. De este modo, nació la *termodinámica cuántica* que busca cerrar el espacio que queda entre los sistemas microscópicos estudiados por la mecánica cuántica y los sistemas macroscópicos en equilibrio descritos por la termodinámica clásica. Su objetivo principal es construir un nuevo marco teórico para la termodinámica que permita tener en cuenta, entre otras cosas, efectos de tamaño finito, sistemas fuera del equilibrio y efectos cuánticos [14].

Surge entonces, naturalmente, preguntarse si es posible deducir los teoremas de fluctuación a partir de los principios fundamentales de la cuántica. Es más, dado el increíble nivel de control que se ha podido lograr de sistemas cuánticos a la nanoscala, es natural preguntarnos cómo los resultados de la termodinámica se ven afectados al incorporar efectos puramente cuánticos como la coherencia o el entrelazamiento. Si, por ejemplo, consideramos sistemas débilmente acoplados con baños y que se apartan poco respecto del equilibrio, es posible desarrollar una teoría cuántica consistente con los resultados clásicos. Sin embargo, tratar de obtener resultados más generales y válidos para procesos de no-equilibrio arbitrarios, como lo son los teoremas de fluctuación de Jarzynski o Crooks, presenta dificultades. A raíz de estas dificultades yace el problema que, a falta de ciertas nociones clásicas como las trayectorias, no es para nada obvio cómo definir una noción de trabajo para sistemas cuánticos arbitrariamente fuera del equilibrio. Una contribución fundamental en esta área han sido los trabajos de Allahverdyan [15] y Talkner, Hänggi y Lutz [16, 17], quienes para sistemas cuánticos aislados, pero que son forzados unitariamente, propusieron cuantificar el trabajo como una variable aleatoria cuyo valor está dado simplemente como la diferencia de los resultados de una medición de energía inicial (antes de aplicar el forzado) y final (una vez ya terminado el proceso). Para estados iniciales libres de coherencias, esta idea provee una definición intuitiva y operacional del trabajo que además permite recuperar teoremas de fluctuación análogos a los clásicos [16–18]. No obstante, a su formulación clara,

esta definición de trabajo tiene dificultades a la hora de querer ser implementada experimentalmente debido al requisito de dos mediciones proyectivas [19, 20]. Tanto es así que todas las propuestas [21, 22] y realizaciones [23, 24] involucran una medición indirecta de las propiedades del sistema que luego permiten una reconstrucción de la distribución de probabilidades de trabajo.

Además, la definición de trabajo como resultado de dos mediciones proyectivas se encuentra con problemas significativos al ser aplicada a estados que poseen coherencias en el estado inicial [25]. Efectivamente, esto es consecuencia de que, en tal caso, la medición inicial de energía destruye las coherencias iniciales del estado cuántico. Más aún, recientemente se ha mostrado que resulta imposible definir una distribución de probabilidades de trabajo que generalice los resultados anteriores y satisfaga una serie de propiedades que intuitivamente uno esperaría de una definición razonable de trabajo [26]. Esto ha desembocado en la comunidad a buscar nuevos enfoques para tratar las situaciones con coherencias [27–30], incluyendo distintas propuestas de distribuciones de cuasi-probabilidad [31–37]. En general, las distintas distribuciones de cuasi-probabilidad tienen sus ventajas y desventajas a la hora de analizar las diferentes características asociadas con los tipos de procesos y estados. El uso de distribuciones de cuasi-probabilidad se remonta ya a los comienzos de la mecánica cuántica como un intento de formalizar las técnicas de cuantización y para dar una descripción de la mecánica cuántica sobre el espacio de fases, en algún sentido análoga a su contraparte clásica [38–41].

En particular, podemos destacar una distribución de cuasi-probabilidad reciente que se define en términos de la función de Wigner [42]. Esta definición se basa en el hecho de que la distribución de probabilidad del trabajo también puede medirse coherentemente acoplando el sistema a un aparato cuántico auxiliar (*ancilla*) y realizando una única medida sobre el aparato, es decir, un protocolo de única medición [43]. De este modo, el estado final del aparato contiene la información sobre la distribución del trabajo y es posible definir una distribución de cuasi-probabilidad. Además, se puede demostrar que la presencia de coherencias cuánticas está relacionada con la aparición de características que revelan la no-clasicalidad en la función de Wigner, tales como las negatividades y las franjas de interferencia. Por otro lado, para estados libres de coherencia, esta definición concuerda con la distribución de probabilidad de medida estándar de dos mediciones proyectivas de trabajo.

Esta tesis tiene como objetivo la caracterización de distribuciones de cuasi-probabilidad de trabajo y, con ello, lograr una extensión de los teoremas de fluctuación en sistemas cuánticos. En primer lugar, nos concentraremos en las distribuciones de Margenau-Hill [31], Full-Counting [32] y Kirkwood-Dirac [33] las cuales pueden ser introducidas a partir de un formalismo que permite encontrar la distribución de cuasi-probabilidad más general de trabajo. Se destacarán sus pros y contras al momento de analizar procesos que involucran la presencia de coherencias cuánticas. Luego, se explorará detalladamente la dinámica de la distribución de cuasi-probabilidad basada en la función de Wigner en una variedad de procesos, desde aquellos que ocurren fuera del equilibrio hasta en ataques adiabáticos. Este análisis proporcionará una visión clara de cómo la función de Wigner puede utilizarse para describir la evolución temporal de sistemas cuánticos en diferentes contextos. Finalmente, se abordará cómo extender la identidad de Jarzynski a través de las distintas distribuciones de cuasi-probabilidad mencionadas.

En el Capítulo 1, se discutirán las principales dificultades asociadas a la definición del trabajo en mecánica cuántica. Se analizarán los enfoques históricos más relevantes, como su representación mediante un observable (en el sentido de un operador hermítico) y la caracterización de su estadística a través de dos mediciones proyectivas de energía. Además, se enunciarán los teoremas de fluctuación de trabajo y su relevancia en procesos fuera del equilibrio. Como contraparte, se desarrollará el teo-

INTRODUCCIÓN

rema adiabático y se discutirán las condiciones necesarias para que un sistema, bajo una evolución determinada, permanezca en equilibrio (de manera aproximada) a cada instante.

En el Capítulo 2, se introducirá el concepto de mediciones generalizadas y su utilidad para redefinir el trabajo en sistemas cuánticos aislados. Se explorará un esquema basado en una única medición proyectiva al final de la evolución del estado. Asimismo, se demostrará que no existe una distribución de probabilidad que satisfaga simultáneamente tres condiciones fundamentales que se esperarían de una definición intuitiva del trabajo.

En el Capítulo 3, se desarrollará el formalismo de cuasi-probabilidades como una posible solución a encontrar una definición de trabajo aceptable. En particular, se presentarán y analizarán las distribuciones de Margenau-Hill, Full-Counting y Kirkwood-Dirac, contrastando sus ventajas y limitaciones en la descripción de procesos con y sin coherencias cuánticas al inicio de la dinámica. Finalmente, se mencionará la función de Wigner y su utilidad en la caracterización de sistemas cuánticos.

En el Capítulo 4, se estudiará en detalle una distribución de cuasi-probabilidad recientemente definida, basada en la función de Wigner y en el esquema de única medición proyectiva introducido en el Capítulo 2. Se analizará su comportamiento en un sistema de dos niveles sometido a procesos fuera del equilibrio, incluyendo atajos adiabáticos.

En el Capítulo 5, se explorarán distintas formas de extender la identidad de Jarzynski a partir de las distribuciones de cuasi-probabilidad desarrolladas en este trabajo. Se verificará que dichas distribuciones recuperan la identidad de Jarzynski conocida en el contexto de la termodinámica estadística clásica.

Capítulo 1

Trabajo y teoremas de fluctuación en sistemas cuánticos

En este capítulo se introducirán las bases necesarias para el desarrollo de este trabajo. Iniciaremos con una discusión sobre cómo se puede definir el trabajo en un sistema cuántico y las dificultades que esta tarea presenta. Efectivamente, dar una correcta definición para ello resulta ser un problema sutil que requiere particular cuidado. Esto se debe a que el trabajo no se puede representar por medio de un observable, en el sentido de un operador hermítico [15]. Esto ha llevado a la conclusión de que “el trabajo no es un observable” [17]. Sin embargo, esto no quiere decir que el trabajo no se pueda medir. Particularmente, analizaremos dos enfoques relevantes para estudiar en detalle esta problemática: el operador de trabajo y el protocolo de dos mediciones proyectivas. De allí, veremos las falencias que presentan cada uno de ellos y cómo esto puede ayudarnos a obtener una correcta definición del trabajo en sistemas cuánticos.

Luego, expondremos los teoremas de fluctuación conocidos en la mecánica estadística y su relevancia en sistemas fuera del equilibrio. Veremos cómo pueden recuperarse los mismos para sistemas cuánticos si basamos nuestra definición de trabajo a partir del protocolo de dos mediciones proyectivas [17, 18, 44].

Por último, describiremos los procesos adiabáticos [45]. Estos son procesos que se realizan de forma suficientemente lenta de manera que no se produzcan transiciones entre niveles energéticos de un sistema. Además, analizaremos un atajo adiabático por medio de *ingeniería inversa* [46] el cual nos permitirá obtener el mismo resultado final que el que se conseguiría frente a una evolución adiabática, pero en un tiempo mucho más corto. Con esto, se estudiará cómo repercute el comportamiento adiabático de un sistema cuántico si se quiere obtener el trabajo en base a la definición del protocolo de dos mediciones proyectivas.

1.1. La problemática de definir el trabajo en mecánica cuántica

La noción de trabajo es uno de los conceptos más básicos y fundamentales de la física y, en particular, de la termodinámica. Por lo tanto, resulta de extrema importancia poder formular una definición general válida para cualquier sistema cuántico. Sin embargo, esta tarea presenta serias dificultades. Esto se debe, en primer lugar, a que muchos de los conceptos subyacentes en la definición clásica de trabajo no se pueden trasladar al mundo cuántico. En efecto, la definición tradicional del trabajo W que realiza una

fuerza \vec{F} sobre una partícula a lo largo de su trayectoria \mathcal{C} es:

$$W = \int_{\mathcal{C}} \vec{F} \cdot d\vec{r} \quad (1.1)$$

siendo $d\vec{r}$ el diferencial de la trayectoria. Empero, el concepto de trayectoria deja de tener sentido en mecánica cuántica. Debido a ello, se han buscado formas alternativas para definir el trabajo W a partir del punto de vista termodinámico.

En la primera ley de la termodinámica, la variación de energía ΔE que sufre un sistema macroscópico está relacionada con el calor Q absorbido por el sistema y el trabajo W que el entorno realiza sobre el mismo:

$$\Delta E = Q + W \quad (1.2)$$

donde tomamos la convención de que $Q > 0$ si el sistema absorbe calor (por lo que $Q < 0$ si el sistema lo cede) y $W > 0$ si el entorno realiza trabajo sobre el sistema (por lo que $W < 0$ si el sistema realiza trabajo sobre el entorno).

En este trabajo, nos enfocaremos en aquellos sistemas que se encuentran **aislados** del entorno; es decir, no hay transferencia alguna de calor ($Q = 0$). Esto implica que el trabajo y la variación de energía estarán relacionados de manera directa. Aplicándolo a sistemas microscópicos, debemos interpretar a la primera ley como una igualdad en cuanto a valores medios. Por lo tanto, lo que nos queda de la expresión (1.2) es:

$$\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle \quad (1.3)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ indica el valor medio de la magnitud pertinente.

Entre los primeros intentos de definir el trabajo para sistemas cuánticos se encuentran los esfuerzos de Bochkov *et al.* [47] y de Allahverdyan *et al.* [15]. En ambos casos, los autores propusieron definiciones basadas en analogías con expresiones clásicas del trabajo fuera del equilibrio que habían sido utilizadas para describir sus fluctuaciones. Sin embargo, en ninguno de estos casos estas definiciones dieron frutos, en cuanto a que no se logró producir versiones cuánticas de estas.

Uno de estos métodos consistió en querer representar al trabajo en los sistemas cuánticos mediante un observable; es decir, como un operador hermítico en donde sus autovalores dieran cuenta de los valores de trabajo que puede realizar el sistema con sus correspondientes autoestados, que se relacionarían con la probabilidad de obtener dicho autovalor. Contrario a lo que uno podría esperar *a priori*, se llegaría a la conclusión de que este **operador de trabajo** no cumple con los requisitos necesarios para relacionarlo satisfactoriamente con la variación de energía que sufre el sistema [15].

Un gran avance a este problema llegaría de la mano de Talkner y Hänggi, quienes basados en los trabajos de Kurchan [48] y de Tasaki [44], propondrían un nuevo método para definir el trabajo en sistemas cuánticos aislados pero sometidos a una fuerza variable en el tiempo [17]. La definición de los autores se inspiraría en que el trabajo sea la diferencia entre los resultados de mediciones de energía del sistema al inicio y al final de la evolución. Este protocolo, que consiste en dos mediciones proyectivas, sería nombrado como **protocolo TPM** (del inglés: “Two Projective Measurements”). A partir de esta nueva definición, los autores lograron deducir una versión cuántica para las fluctuaciones de trabajo [16]. Sin embargo, a pesar de ser un buen protocolo de medición de trabajo para estados iniciales que son diagonales en la base de energía, presenta problemas en un caso general debido a la invasividad que supone la primera medición al inicio de la evolución.

A continuación, analizaremos los enfoques del operador de trabajo y el protocolo TPM para identificar en detalle sus falencias y, con ello, esclarecer los requisitos que debe cumplir una correcta definición del trabajo en mecánica cuántica.

1.1.1. Operador de trabajo

Estudiaremos la idea de querer definir al trabajo como un observable, a partir de un operador hermítico, y las fallas a las que este planteo conduce. Para esto, consideraremos un sistema cuántico descrito inicialmente con una matriz densidad ρ . Supondremos que el sistema está aislado y, por lo tanto, evoluciona unitariamente en el tiempo t según el operador evolución $\mathcal{U}(t, t_0)$, donde t_0 es un tiempo de referencia fijo. Este operador cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (1.4)$$

Por cuestión de simplificación, diremos que $t \in [0, T]$ donde T indica el tiempo final de la evolución. Por lo cual, tendremos un Hamiltoniano final $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(T)$ e inicial $H \equiv \mathcal{H}(0)$. Además, notaremos a $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$.

Dada la relación que dedujimos en la ecuación (1.3) para sistemas aislados, podemos relacionar el valor medio de trabajo $\langle W \rangle$ que realiza el sistema con la diferencia de valores medios de las energías al final y al inicio de la evolución:

$$\langle W \rangle = \text{tr}[\tilde{H} \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H \rho] \quad (1.5)$$

$$= \text{tr}[(\mathcal{U}^\dagger \tilde{H} \mathcal{U} - H) \rho] \quad (1.6)$$

$$= \text{tr}[\mathbb{W} \rho] \quad (1.7)$$

donde definimos $\mathbb{W} \equiv \tilde{H}^{(H)} - H$ al **operador de trabajo** siendo $\tilde{H}^{(H)} \equiv \mathcal{U}^\dagger \tilde{H} \mathcal{U}$ el Hamiltoniano final \tilde{H} en representación de Heisenberg. Vemos entonces que \mathbb{W} no es más que la “variación” del Hamiltoniano en representación de Heisenberg, el cual podemos interpretarlo como un análogo clásico a la variación de energía.

Como mencionamos antes, el espíritu de \mathbb{W} es que sus autovalores representen las realizaciones de los valores de trabajo y sus autovectores relacionen sus respectivas probabilidades. Supongamos un caso en el que contamos con un Hamiltoniano que es cíclico. Es decir:

$$H = \tilde{H} \equiv H_I \quad (1.8)$$

Entonces, una interpretación que puede darse a esta condición es que el sistema solo interactúa con la fuente de trabajo para $t \in [0, T]$ y que por fuera de este intervalo su valor es H_I . Ahora bien, esto permite que \mathbb{W} pueda tener autovalores positivos, negativos y nulos. Llamaremos $|0\rangle$ a uno de los estados que tiene autovalor nulo con el operador de trabajo, el cual satisface:

$$\mathbb{W} |0\rangle = (H_I^{(H)} - H_I) |0\rangle = 0 \quad (1.9)$$

donde $H_I^{(H)} \equiv \mathcal{U}^\dagger H_I \mathcal{U}$. De esta manera, acorde a como se interpreta en la mecánica cuántica, en el estado $|0\rangle$ se tiene un trabajo estrictamente nulo y, por lo tanto, no debería existir intercambio de energía alguno. Esto no da margen a que se produzcan fluctuaciones alrededor de este valor, sino que

a cada realización con el mismo estado $|0\rangle$ se debería observar una variación de energía nula.

Un detalle no menor, en el que hay que tener cierto cuidado, es que esto no implica que $|0\rangle$ sea autoestado de H_I ya que, en general, \mathbb{W} y H_I no comutan. Vemos que esto es consecuencia directa de que un operador puede no conmutar consigo mismo escrito en representación de Heisenberg:

$$[\mathbb{W}, H_I] = [H_I^{(H)}, H_I] = H_I^{(H)}H_I - H_IH_I^{(H)} \neq 0 \quad (1.10)$$

Por lo cual, $|0\rangle$ es autoestado de \mathbb{W} pero no es necesariamente autoestado de H_I ; lo mismo ocurre para $H_I^{(H)}$.

Dicho todo esto, veremos que surgen problemas cuando quiere verificarse si \mathbb{W} es consistente en cuanto a ser un fiel representante de la variación de energía del sistema. A continuación mostraremos un ejemplo, expuesto ya en [15], donde esto ocurre: tomando un sistema de cuatro niveles (es el más simple al que podemos ir, ya que para dos y tres niveles no se tiene ningún problema) donde tenemos un Hamiltoniano dado por:

$$H_I = \begin{pmatrix} \mathbb{A} & 0^{2 \times 2} \\ 0^{2 \times 2} & \mathbb{B} \end{pmatrix}, \quad \text{donde } \mathbb{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix} \text{ y } \mathbb{B} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

con $a, b, c, d \in \mathbb{R}$, y contando con un operador unitario evolución \mathcal{U} de la forma:

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} 0^{2 \times 2} & \mathbb{I}^{2 \times 2} \\ \mathbb{I}^{2 \times 2} & 0^{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

donde \mathbb{I}^{nxn} representa a la matriz identidad en un bloque nxn ($n \in \mathbb{N}$), tenemos que:

$$H_I^{(H)} \equiv \mathcal{U}^\dagger H_I \mathcal{U} = \begin{pmatrix} \mathbb{B} & 0^{2 \times 2} \\ 0^{2 \times 2} & \mathbb{A} \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

De esta forma, el operador trabajo \mathbb{W} queda definido como:

$$\mathbb{W} = H_I^{(H)} - H_I = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c-d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d-c \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

que tiene una doble degeneración en el autovalor nulo, donde sus correspondientes autovectores son:

$$|0_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad |0_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

Ahora bien, como mencionamos antes, si al trabajo lo podemos representar como un observable entonces los estados $|0_1\rangle$ y $|0_2\rangle$ van a tener siempre como resultado una variación de energía estrictamente nula al medirse sobre ellos. Esto implica que los momentos de H_I y $H_I^{(H)}$ deben coincidir en **todos** sus órdenes para cada uno de estos estados por separado. De no ser así, estaría implicando que

efectivamente hay fluctuaciones en la energía pero que, en valor medio, se cumple la primera ley. Puede verse que, para el estado $|0_1\rangle$:

$$\langle 0_1 | (H_I^{(H)})^m | 0_1 \rangle = \langle 0_1 | (H_I)^m | 0_1 \rangle \quad \text{para } m = 1, 2 \quad \checkmark \quad (1.16)$$

pero

$$\langle 0_1 | (H_I^{(H)})^m | 0_1 \rangle \neq \langle 0_1 | (H_I)^m | 0_1 \rangle \quad \text{para } m \geq 3 \quad \times \quad (1.17)$$

Es decir, acorde a esta definición para el operador trabajo, es posible obtener una variación de energía con, estrictamente, cero fluctuación de trabajo. En este caso, no existe una conexión entre la energía intercambiada y el trabajo hecho en un sistema aislado debido a que resulta problemático tratar de interpretar las fluctuaciones. En otras palabras, tenemos que la primera ley se cumple (en promedio) pero no tenemos un análogo cuántico para las fluctuaciones del trabajo, siendo entonces una definición incompleta para el mismo.

Se podría intentar buscar una definición alternativa de un “operador de trabajo” que resulte más adecuada. Por ejemplo, que los autovalores de dicho operador resulten de la resta de los autovalores de los Hamiltonianos final e inicial, respectivamente. Sin embargo, notemos que en el caso de contar con un sistema que tiene dimensión D , los valores posibles de trabajo son en general D^2 resultados distintos. Por lo tanto, al ser mayor que la dimensión del espacio de Hilbert del sistema, no existe ningún observable representado por un operador hermítico que genere estos resultados. Es decir: “el trabajo no es un observable” [17].

1.1.2. Protocolo TPM

Se podría decir que necesitamos un enfoque diferente para afrontar la problemática de dar con una definición adecuada para el trabajo en mecánica cuántica. Una idea intuitiva consiste en definir al trabajo realizado durante un proceso de un sistema cuántico aislado como la diferencia de dos mediciones de energía: una al inicio y otra al final.

Para ello, tomaremos un sistema cuántico descrito por un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(\lambda(t))$. El Hamiltoniano depende del tiempo a través de un parámetro $\lambda \equiv \lambda(t)$ que realiza trabajo sobre el sistema, al cual llamaremos **protocolo**, y que suponemos que podemos controlar externamente. Inicialmente, el sistema se encuentra en un estado descrito por una matriz densidad ρ . Luego, se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ en $t = 0$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. Más allá de la dependencia de λ , diremos que el sistema está aislado, por lo que evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (donde t_0 es fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (1.18)$$

Además, con el objetivo de simplificar la notación, denotaremos $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(T))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$.

Por lo tanto, sea $\{E_n\}$ el espectro de energías del Hamiltoniano inicial H y sea $\{\tilde{E}_m\}$ el espectro de energías del Hamiltoniano final \tilde{H} , si en la medición a $t = 0$ se obtuvo un valor de energía E_n y, posteriormente, a $t = T$ resultó ser \tilde{E}_m entonces el trabajo w_{nm} medido en esta realización particular es:

$$w_{nm} \equiv \tilde{E}_m - E_n \quad (1.19)$$

Como ya ha sido mencionado antes, a partir de esta definición de trabajo se puede ver de forma sencilla que **es imposible definir un operador hermítico que represente la medición de trabajo**. Efectivamente, esto es una consecuencia de que la cantidad de valores posibles de trabajo W es, en general, mayor que la dimensión del espacio de estados, mientras que el número de autovalores distintos de un operador hermítico es siempre menor o igual a la dimensión del espacio. Sin embargo, esto no quita el hecho de que pueda ser medido.

En general, dado un sistema inicial descrito por ρ que evoluciona según \mathcal{U} , realizaciones independientes del protocolo resultarán en distintos valores de trabajo w_{nm} , debido tanto a las fluctuaciones propias del estado inicial en energía como también a las fluctuaciones intrínsecas de una medición cuántica. Para calcular la probabilidad de obtener como resultado un cierto trabajo w_{nm} , veamos paso a paso la implementación del **protocolo TPM**:

1. A tiempo $t = 0$ se realiza la primer medición de energía, cuyo valor está determinado por el Hamiltoniano inicial H . El resultado de la medición es E_n con probabilidad p_n dada por:

$$p_n = \text{tr}[\rho \Pi_n] \quad (1.20)$$

donde Π_n es el proyector sobre el autoespacio de energía E_n . A su vez, el estado del sistema luego de la medición es:

$$\rho_n = \frac{\Pi_n \rho \Pi_n}{p_n} \quad (1.21)$$

2. El sistema evoluciona unitariamente con \mathcal{U} de forma que se alcanza el estado:

$$\rho_n(T) = \mathcal{U} \rho_n \mathcal{U}^\dagger \quad (1.22)$$

3. Se realiza una nueva medición de energía, ahora con el Hamiltoniano final \tilde{H} . Se obtiene como resultado \tilde{E}_m con probabilidad $p_{m|n}$ dada por:

$$p_{m|n} = \text{tr}[\rho_n(T) \tilde{\Pi}_m] \quad (1.23)$$

donde $\tilde{\Pi}_m$ es el proyector sobre el subespacio de energía \tilde{E}_m y $p_{m|n}$ es interpretada como la probabilidad condicional de obtener \tilde{E}_m dado que inicialmente se midió E_n . Otra forma de escribir a $p_{m|n}$ es:

$$p_{m|n} = \text{tr}[\rho_n(\tau) \tilde{\Pi}_m] = \text{tr}[\mathcal{U} \rho_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m] \quad (1.24)$$

$$= \frac{1}{p_n} \text{tr}[\mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m] \quad (1.25)$$

por lo que la probabilidad de medir w_{nm} resulta:

$$P_{\text{TPM}}(w_{nm}) \equiv p_n p_{m|n} = \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \quad (1.26)$$

donde se verifica que $\sum_{n,m} P_{\text{TPM}}(w_{nm}) = 1$.

4. Finalmente, la distribución de probabilidad del trabajo W es:

$$P_{\text{TPM}}(W) = \sum_{n,m} P(w_{nm}) \delta(W - w_{nm}) \quad (1.27)$$

$$P_{\text{TPM}}(W) = \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (1.28)$$

En la deducción aquí presentada asumimos, por simplicidad, que los Hamiltonianos no presentan degeneraciones. Sin embargo, es sencillo extender este mismo procedimiento a los casos degenerados y mostrar que la misma expresión (1.28) sigue siendo válida aún en esta situación más general [18].

A pesar de que el protocolo TPM implique un gran avance en la búsqueda de una definición de trabajo satisfactoria, vamos a mostrar que cuando el estado inicial del sistema posee coherencias entre estados de distinta energía, entonces se llega a conclusiones contrarias a lo que uno esperaría de una definición razonable de trabajo. Cabe notar que el motivo de este problema radica naturalmente en la primera medición de energía que se realiza en el protocolo TPM. Efectivamente, si el estado inicial es diagonal en la base de energía, entonces ρ puede interpretarse como una distribución de probabilidades “clásica” sobre estados de distinta energía. En tal caso, una medición de energía no es invasiva en cuanto simplemente “revela” el “verdadero” valor de energía en esa realización del experimento. Sin embargo, si el estado inicial sí tiene coherencias entre niveles de energía distintos, la energía del sistema ya no está bien definida y la interpretación ya no es tan sencilla, dado que, por la naturaleza de las mediciones en mecánica cuántica, esto perturba de forma significativa e irreversible el estado del sistema.

Como ejemplo concreto de los problemas que surgen en presencia de coherencias cuánticas, consideremos el valor medio del trabajo realizado al aplicar una evolución \mathcal{U} a un sistema aislado que inicialmente se encuentra en el estado ρ y pasa de un Hamiltoniano inicial H a uno final \tilde{H} . El valor medio de la variación de energía $\langle \Delta E \rangle$ que sufre este sistema es:

$$\langle \Delta E \rangle \equiv \text{tr}[\tilde{H} \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H \rho] \quad (1.29)$$

donde $\mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger$ es el estado final (evolucionado) del sistema si inicialmente se encontraba en el estado ρ . Claramente, invocando a la primera ley para sistemas aislados (1.3), la definición de trabajo y su respectiva distribución de probabilidades debe satisfacer que su valor medio sea igual a $\langle \Delta E \rangle$. Sin embargo, en el protocolo TPM, al realizar una medición de energía sobre el estado inicial se perturba al sistema destruyendo las coherencias. Para ver esto, calculemos el valor medio de trabajo $\langle W \rangle_{\text{TPM}}$ que resulta de la distribución de probabilidades del protocolo TPM:

$$\langle W \rangle_{\text{TPM}} = \int dW W P_{\text{TPM}}(W) \quad (1.30)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \int dW W \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (1.31)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] (\tilde{E}_m - E_n) \quad (1.32)$$

Si consideramos que la base de proyectores $\{\Pi_n\}$ y $\{\tilde{\Pi}_m\}$ son tales que podemos escribir $\tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m$

y $H = \sum_n E_n \Pi_n$, entonces la expresión (1.32) queda como:

$$\langle W \rangle_{\text{TPM}} = \text{tr} \left[\sum_{n,m} \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] - \text{tr} \left[\sum_{n,m} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} E_n \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] \quad (1.33)$$

$$= \text{tr} \left[\tilde{H} \mathcal{U} \sum_n \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] - \text{tr} \left[\mathcal{U} \sum_n E_n \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] \quad (1.34)$$

$$= \text{tr} \left[\tilde{H} \mathcal{U} \bar{\rho} \mathcal{U}^\dagger \right] - \text{tr} \left[\sum_n E_n \Pi_n \rho \right] \quad (1.35)$$

$$= \text{tr}[\tilde{H} \mathcal{U} \bar{\rho} \mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H \rho] \quad (1.36)$$

donde utilizamos que $\sum_m \tilde{\Pi}_m = \mathbb{I}$, siendo \mathbb{I} el operador identidad, y llamamos $\bar{\rho} \equiv \sum_n \Pi_n \rho \Pi_n$ al estado inicial *dephased*. Es decir, $\bar{\rho}$ es la matriz densidad que se consigue a partir de ρ eliminando todos los términos de coherencias entre subespacios de distinta energía. Notemos, entonces, que el valor medio del trabajo $\langle W \rangle_{\text{TPM}}$ no coincide con la variación media de energía $\langle \Delta E \rangle$ dada por (1.29), con lo que no se reproduce la primera ley dada por la ecuación (1.3) cuando el estado inicial ρ presenta coherencias cuánticas, o dicho de otra forma, cuando no commuta con el Hamiltoniano inicial H .

Cabe notar que el estado *dephased* se puede obtener a partir de ρ tomando un promedio temporal asintótico de una evolución dada por el Hamiltoniano inicial H .

$$\bar{\rho} = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \rho e^{\frac{i}{\hbar} H t} \quad (1.37)$$

Añadiendo identidades del tipo $\sum_k \Pi_k$, donde Π_k son los proyectores asociados a los autoestados de H , vemos que:

$$\bar{\rho} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \left(\sum_k \Pi_k \right) \rho \left(\sum_l \Pi_l \right) e^{\frac{i}{\hbar} H t} \quad (1.38)$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt \sum_{k,l} e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \Pi_k \rho \Pi_l e^{\frac{i}{\hbar} E_l t} \quad (1.39)$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \left[\int_{-T/2}^{T/2} dt \sum_n \Pi_n \rho \Pi_n + \int_{-T/2}^{T/2} dt \sum_{k,l \neq k} \Pi_k \rho \Pi_l e^{-\frac{i}{\hbar} (E_k - E_l) t} \right] \quad (1.40)$$

$$= \sum_n \Pi_n \rho \Pi_n \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt = \sum_n \Pi_n \rho \Pi_n \quad \checkmark \quad (1.41)$$

donde lo que hicimos fue separar en dos integrales: una con los términos diagonales de ρ y otra con los términos fuera de la diagonal, donde esta última resulta ser nula en promedio temporal por ser oscilante. Por lo tanto, **salvo que el estado inicial sea diagonal en la base del Hamiltoniano inicial, el valor medio de trabajo generado por el TPM difiere de la diferencia de valores medios de energía**, justamente debido al efecto invasivo de la primera medición de energía.

Otro defecto con el protocolo TPM surge al querer obtener las *distribuciones marginales* de probabilidad de energía en los Hamiltonianos final \tilde{H} e inicial H . Esto puede conseguirse si sumamos únicamente sobre uno de los índices a la expresión dada en (1.26), llegando a que:

$$\sum_m P_{\text{TPM}}(w_{nm}) = \sum_m \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] = \text{tr}[\Pi_n \rho] \quad \checkmark \quad (1.42)$$

$$\sum_n P_{\text{TPM}}(w_{nm}) = \sum_n \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] = \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \bar{\rho} \mathcal{U}^\dagger] \quad \times \quad (1.43)$$

A partir de esto, se visualiza que la distribución marginal para el Hamiltoniano inicial H se reproduce correctamente, pero no ocurre lo mismo para el Hamiltoniano final \tilde{H} donde hace aparición el estado $\bar{\rho}$ en lugar del estado inicial ρ . Esto lleva a la conclusión de que la distribución de probabilidad del protocolo TPM no puede ser del todo bien interpretada como una *distribución de probabilidad conjunta*.

Con todo esto, podemos tomar mayor dimensión del problema que resulta dar con una definición para el trabajo en el contexto de la mecánica cuántica. No pudimos incluir las fluctuaciones de trabajo correctamente con el enfoque del operador de trabajo y tampoco cumplir la primera ley, para un caso general, en el protocolo TPM. Esto deja un sabor de boca amargo, que implica seguir intentando enfoques distintos para poder solucionar esto. A pesar de los diversos caminos, recientemente pudo demostrarse [26] que es imposible dar con una distribución de probabilidad de trabajo general que satisfaga, al mismo tiempo, los resultados del protocolo TPM para sistemas sin coherencias cuánticas al inicio de la evolución, reproduzca la primera ley de la termodinámica y sea una función lineal frente a una mezcla estadística de estados cuánticos. Esto será analizado mejor en los capítulos siguientes.

1.2. Teoremas de fluctuación

Los teoremas de fluctuación relacionan propiedades del equilibrio de un sistema (energía, temperatura, entropía, etc.) con procesos fuera del equilibrio [4, 5], poniendo límites a la forma que pueden tener sus fluctuaciones. Estas herramientas han resultado ser muy útiles para el estudio de sistemas microscópicos dominados por estas fluctuaciones donde la termodinámica del equilibrio no es aplicable. En esta oportunidad, presentaremos dos de los teoremas de fluctuación trabajo-energía (también llamados **relaciones de trabajo**) más frecuentes utilizados: el teorema de Crooks y la identidad de Jarzynski. Luego, veremos cómo surgen estas mismas en el marco de la mecánica cuántica.

Si queremos estudiar el trabajo W que se debe realizar sobre un sistema termodinámico para que evolucione de un estado a otro, nos encontramos con ciertas restricciones dadas por la segunda ley de la termodinámica. En particular, si se trata de un sistema que se encuentra en equilibrio térmico a temperatura T al inicio y al final del proceso, obtenemos que:

$$\left\{ \begin{array}{l} W = \Delta E - Q \\ Q \leq T \Delta S \\ F = E - TS \end{array} \right. \Rightarrow W \geq \Delta E - T \Delta S \Rightarrow \boxed{W \geq \Delta F} \quad (1.44)$$

donde E es la energía interna del sistema, Q es el calor intercambiado, S es la entropía y F la energía libre de Helmholtz. Esto da una cota inferior al trabajo que podemos realizar sobre el sistema; si conocemos y están fijadas las condiciones iniciales y finales del proceso, y en ambos puntos el sistema se encuentra en equilibrio térmico a temperatura T , entonces podemos relacionar una diferencia de

energía libre de Helmholtz ΔF y establecer que se requiere un **trabajo mínimo** sobre el sistema para ello, que resulta ser ΔF .

Sin embargo, puede que esto no ocurra siempre. Para verlo, pensaremos en el proceso inverso (o dicho de otra forma, “pasando la película hacia atrás”) donde la diferencia de energía libre de Helmholtz puede relacionarse como:

$$\Delta F^* = -\Delta F \quad (1.45)$$

donde el $*$ indica que se trata del proceso inverso. Si queremos relacionar los trabajos realizados sobre el sistema en cada proceso, vemos que:

$$W^* = -W \quad (1.46)$$

pero, como debe cumplirse la segunda ley en el proceso original, obtenemos:

$$W^* = -W \leq -\Delta F = \Delta F^* \Rightarrow \boxed{W^* \leq \Delta F^*} \quad (1.47)$$

por lo que estaríamos violando la segunda ley en el proceso inverso, que ya el trabajo W^* podría llegar a ser menor que el incremento de energía libre ΔF^* .

Este ejemplo ilustra que la segunda ley no puede cumplirse absolutamente siempre; esto es debido a que esta ley tiene un carácter estadístico. Más bien, la forma correcta que tenemos para entender la relación entre W y ΔF es respecto al valor medio:

$$\boxed{\langle W \rangle \geq \Delta F} \quad (1.48)$$

Ahora bien, cabe preguntarse por qué hablar de un valor medio. Si tomamos al proceso como un protocolo $\lambda(t)$, el trabajo realizado W dependerá del mismo y de las condiciones iniciales $(q_i; p_i)$ de las partículas del sistema, donde llamamos $(q; p)$ a las coordenadas canónicas. Como el estado inicial está en equilibrio térmico, los valores $(q_i; p_i)$ están distribuidos según el ensamble canónico, por lo que transforman al trabajo W en una variable aleatoria. Claro está que para sistemas macroscópicos las fluctuaciones están muy suprimidas, por lo que nunca (en el sentido estadístico) vamos a ver un comportamiento distinto. Pero, para sistemas más pequeños, podemos observar fluctuaciones en las que se viole la segunda ley.

Como el trabajo W es una variable aleatoria, a la misma le corresponde una función de distribución $P(W)$ que estará dada por las condiciones iniciales $x_i = (q_i; p_i)$ de las partículas y por el protocolo $\lambda(t)$ al que el sistema esté sometido. En contraparte, también existe una densidad de probabilidad $P^*(W)$ cuando aplicamos un protocolo $\lambda^*(t)$ que resulta ser el de “pasar la película hacia atrás”, cuyas condiciones iniciales serán $x_i^* = (q_i^*; p_i^*)$. Llamaremos $\lambda(t)$ al **protocolo directo** y $\lambda^*(t)$ al **protocolo inverso**, donde $\lambda^*(t) = \lambda(T - t)$, con $t \in (0, T)$. Cabe destacar que deben cumplir cierta condición las coordenadas $x_i^* = (q_i^*; p_i^*)$ debido a que representan también, de alguna manera, el estado final $(q_f; p_f)$ de las partículas pero “pasando la película hacia atrás”. Así, tenemos que $x_i^* = (q_i^*; p_i^*) = (q_f; -p_f)$ para cada una de las partículas.

El **teorema de Crooks** relaciona las distribuciones de probabilidad $P(W)$ y $P^*(-W)$; es decir, la probabilidad de realizar un trabajo W en el protocolo directo y la probabilidad de realizar un trabajo $-W$ en el protocolo inverso. La demostración de este resultado puede verse en el Apéndice A, donde se

llega a que:

$$\frac{P(W)}{P^*(-W)} = e^{\beta(W-\Delta F)} \quad (1.49)$$

siendo $\beta = (kT)^{-1}$ y k la constante de Boltzmann. Podemos notar que en el caso donde W cumple con la segunda ley ($W \geq \Delta F$) esto implica que la probabilidad de observar un trabajo $-W$ en el protocolo inverso (que violaría la segunda ley) está exponencialmente suprimida. En el caso reversible ($W = \Delta F$) recuperamos que la probabilidad de observar un trabajo W en el protocolo directo es igual a la probabilidad de observar un trabajo $-W$ en el protocolo inverso, coincidiendo esto con la termodinámica clásica.

A partir de la expresión (1.49), tenemos que:

$$\frac{P(W)}{P^*(-W)} = e^{\beta(W-\Delta F)} \Rightarrow P(W)e^{-\beta W} = P^*(-W)e^{-\beta \Delta F} \quad (1.50)$$

Si integramos a ambas partes:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dW P(W)e^{-\beta W} = \int_{-\infty}^{+\infty} dW P^*(-W)e^{-\beta \Delta F} \quad (1.51)$$

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = e^{-\beta \Delta F} \quad (1.52)$$

donde se obtiene la conocida **identidad de Jarzynski**. Vemos que, entonces, el **teorema de Crooks implica la identidad de Jarzynski**. Notablemente, estos dos resultados relacionan la energía libre, que es una propiedad de un sistema en equilibrio termodinámico, con la distribución de trabajo de un proceso que puede estar arbitrariamente lejos del equilibrio. Cabe destacar que, aunque dedujimos la identidad de Jarzynski a partir del teorema de Crooks, la primera puede obtenerse directamente calculando el valor medio de la magnitud $e^{-\beta W}$ para la distribución de probabilidad $P(W)$ [6].

Podemos estudiar las consecuencias que trae la identidad de Jarzynski, pero para ello usaremos la **desigualdad de Jensen** [49] que establece que para una función $f(x)$ convexa el valor medio de la misma es mayor o igual a la función evaluada en la media. Es decir:

$$\langle f(x) \rangle \geq f(\langle x \rangle) \quad (1.53)$$

Como la función $e^{-\beta W}$ resulta ser una función convexa, podemos aplicar la desigualdad de Jensen a la identidad de Jarzynski (1.52):

$$e^{-\beta \Delta F} = \langle e^{-\beta W} \rangle \geq e^{-\beta \langle W \rangle} \Rightarrow \langle W \rangle \geq \Delta F \quad (1.54)$$

recuperando el resultado de la segunda ley de la termodinámica (se cumple en valor medio).

1.2.1. Fluctuaciones en el protocolo TPM

Como consecuencia del fracaso de representar al trabajo mediante un operador hermítico debido a no poder incluir sus fluctuaciones (esto es, dar un análogo cuántico de los teoremas de fluctuación), el protocolo TPM fue un gran paso para conseguir otro enfoque que reprodujera las identidades de Crooks

y Jarzynski para la mecánica cuántica, a pesar de no poder cumplir la primera ley para estados que inicialmente presentan coherencias en la base que diagonaliza al Hamiltoniano inicial H .

Para mostrar esto, tomaremos un sistema cuántico descrito por un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(\lambda(t))$. El Hamiltoniano depende del tiempo a través de un protocolo $\lambda \equiv \lambda(t)$ que realiza trabajo sobre el sistema. Luego, se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ en $t = 0$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. Al encontrarse aislado el sistema, evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (donde t_0 es fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (1.55)$$

Llamaremos, por simplificación, $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(T))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$.

Nos enfocaremos en hallar las expresiones para las distribuciones de probabilidad $P(W)$ y $P^*(-W)$ del teorema de Crooks dado por (1.49) que, necesariamente, estarán relacionadas con la distribución del protocolo TPM:

$$P(W) \longrightarrow P_{\text{TPM}}(W) \quad (1.56)$$

$$P^*(-W) \longrightarrow P_{\text{TPM}}^*(-W) \quad (1.57)$$

donde los estados iniciales de cada proceso corresponderán a estados térmicos.

Para el caso del protocolo directo, la distribución de probabilidad $P_{\text{TPM}}(W)$ ya fue dada en la relación (1.28). El estado inicial ρ resulta ser un estado térmico a temperatura T y con Hamiltoniano H . Por lo tanto, tenemos que las probabilidades de los distintos niveles de energía estarán dadas por el ensamble canónico:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (1.58)$$

donde $Z = \text{tr}[e^{-\beta H}]$ es la función de partición canónica y $\beta = (kT)^{-1}$, siendo k la constante de Boltzmann. Estos estados reciben el nombre de **estados de Gibbs**.

Los estados térmicos, así definidos, tienen la característica de ser diagonales en la base de autoestados de energía del Hamiltoniano. Por lo cual, si llamamos $\{E_n\}$ al espectro de energías del Hamiltoniano inicial H y $\{\Pi_n\}$ a sus respectivos proyectores, tendremos que ρ conmuta con cada uno de los proyectores Π_n :

$$[\rho, \Pi_n] = 0 \quad (1.59)$$

Luego, al proyectar ρ sobre cada Π_n obtendremos:

$$\Pi_n \rho \Pi_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \Pi_n \quad (1.60)$$

Así, la distribución de probabilidad $P(W)$ que resulta de evaluar a la distribución $P_{\text{TPM}}(W)$ con el estado de Gibbs ρ dado por (1.58) es:

$$P(W) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (1.61)$$

donde utilizamos la expresión dada por (1.60) en (1.28).

Ahora bien, en el protocolo inverso, desconocemos la expresión de la distribución de probabilidad

$P_{\text{TPM}}^*(-W)$. Sin embargo, podemos hallarla a partir del concepto de “pasar la película hacia atrás”. En efecto, comenzaríamos con cierto estado ρ^* y el valor de la primera medición de energía estaría dado por el Hamiltoniano \tilde{H} (en lugar de H) con cierto resultado \tilde{E}_m y asociado a su respectivo proyector $\tilde{\Pi}_m$. Luego, se haría *involucionar* y la segunda medición de energía se haría sobre el Hamiltoniano H (en lugar de \tilde{H}) con cierto resultado E_n y asociado a su respectivo proyector Π_n . Por lo tanto, a la expresión de la distribución de probabilidad del protocolo TPM dada por (1.28) se le deben realizar las siguientes modificaciones:

$$\begin{array}{ll} \rho \rightarrow \rho^* & \mathcal{U} \longleftrightarrow \mathcal{U}^\dagger \\ \Pi_n \longleftrightarrow \tilde{\Pi}_m & E_n \longleftrightarrow \tilde{E}_m \end{array}$$

Así, conseguimos que la distribución de probabilidad de trabajo para el protocolo TPM en *time-reversal* resulta ser:

$$P_{\text{TPM}}^*(-W) = \sum_{n,m} \text{tr}[\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \rho^* \tilde{\Pi}_m \mathcal{U}] \delta(-W - (E_n - \tilde{E}_m)) \quad (1.62)$$

El estado inicial ρ^* en mi protocolo inverso es un estado térmico a la misma temperatura T y con Hamiltoniano \tilde{H} . Entonces, tenemos que los distintos niveles de energía estarán dados por:

$$\rho^* = \frac{e^{-\beta \tilde{H}}}{\tilde{Z}} \quad (1.63)$$

donde $\tilde{Z} = \text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}}]$ es la función de partición canónica. Nuevamente vemos que, al ser ρ^* diagonal en la base de autoestados de \tilde{H} , se tiene:

$$[\rho^*, \tilde{\Pi}_m] = 0 \quad (1.64)$$

Luego, al proyectar ρ^* sobre cada $\tilde{\Pi}_m$ obtendremos:

$$\tilde{\Pi}_m \rho^* \tilde{\Pi}_m = \frac{e^{-\beta \tilde{E}_m}}{\tilde{Z}} \tilde{\Pi}_m \quad (1.65)$$

Así, la distribución de probabilidad $P^*(-W)$ que resulta de evaluar a la distribución $P_{\text{TPM}}^*(-W)$ con el estado de Gibbs ρ^* dado por (1.63) es:

$$P^*(-W) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta \tilde{E}_m}}{\tilde{Z}} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \delta(-W - (E_n - \tilde{E}_m)) \quad (1.66)$$

donde utilizamos la expresión dada por (1.65) en (1.62).

Una vez halladas las expresiones de las distribuciones de probabilidad de trabajo en los protocolos directo $P(W)$ e inverso $P^*(-W)$ para los estados de Gibbs correspondientes, dadas por las relaciones (1.61) y (1.66) respectivamente, veamos cómo podemos recuperar las identidades de Crooks y Jarzynski. En primer lugar, será útil recordar la relación existente entre la energía libre de Helmholtz F y la función de partición canónica Z :

$$F = -kT \ln(Z) \quad (1.67)$$

Esto permite que la diferencia de energía libre ΔF pueda expresarse como:

$$\Delta F = -\beta^{-1} \ln \left(\frac{\tilde{Z}}{Z} \right) \quad (1.68)$$

Luego, a partir de (1.61), escribimos:

$$P(W) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \frac{\tilde{Z}}{Z} e^{-\beta \tilde{E}_m} e^{\beta \tilde{E}_m} \quad (1.69)$$

$$= \frac{\tilde{Z}}{Z} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta \tilde{E}_m}}{\tilde{Z}} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) e^{\beta(\tilde{E}_m - E_n)} \quad (1.70)$$

$$= e^{-\beta \Delta F} e^{\beta W} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta \tilde{E}_m}}{\tilde{Z}} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (1.71)$$

donde incluimos a la función de partición canónica \tilde{Z} para así obtener la diferencia de energía libre de Helmholtz ΔF , usando la relación (1.68). Además, usando la paridad de la función delta de Dirac, vemos que:

$$P(W) = e^{\beta(W - \Delta F)} \underbrace{\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta \tilde{E}_m}}{\tilde{Z}} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \delta \left(-W - (E_n - \tilde{E}_m) \right)}_{=P^*(-W)} \quad (1.72)$$

$$= e^{\beta(W - \Delta F)} P^*(-W) \quad \checkmark \quad (1.73)$$

obteniéndose, finalmente, la misma expresión del teorema de Crooks en su versión clásica (1.49) y cuántica para el protocolo TPM. A este resultado se lo conoce como la **relación de fluctuación Tasaki-Crooks** [17, 18, 44]. También, se llega a la misma expresión para la identidad de Jarzynski (1.52) en el caso clásico y cuántico, haciendo uso de los mismos pasos que en su deducción para el caso clásico.

1.3. Teorema adiabático

Con la obtención de los teoremas de fluctuación en su versión cuántica gracias al protocolo TPM, se puede obtener información útil de procesos fuera del equilibrio para sistemas cuánticos térmicos y relacionarlos con magnitudes que se encuentran definidas en el equilibrio del sistema. Sin embargo, también resultan interesantes aquellos procesos en los cuales se pasa por sucesivos estados de equilibrio. En la termodinámica clásica, estos procesos suelen denominarse *cuasiestáticos* ya que deben realizarse de manera muy lenta (idealmente, en un tiempo $t \rightarrow \infty$) para que instante a instante el sistema no sea perturbado de manera considerable y se encuentre, en todo momento, en un estado de equilibrio. Con esto, resulta lógico que se quiera buscar un análogo a esta idea en la mecánica cuántica.

Si queremos que un estado cuántico permanezca en equilibrio a lo largo de un proceso arbitrario, entonces debemos asegurarnos de que no se produzcan transiciones en los niveles de energía. Sin embargo, si consideramos la dinámica de un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ con sus respectivos autovalores $\{E_n(t)\}$ y autoestados $\{|n(t)\rangle\}$ instantáneos, evolucionar en el tiempo uno de los autoestados $|n(0)\rangle$ del Hamilto-

niano inicial $\mathcal{H}(0)$, en base a la dinámica de la ecuación de Schrödinger, no suele permanecer instante a instante en un autoestado del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$. Es decir, la evolución del estado $|n(0)\rangle$ a un tiempo t no resulta ser $|n(t)\rangle$. Cabe preguntarse, entonces, si es posible alguna evolución tal que el estado $|n(0)\rangle$ instante a instante sea $|n(t)\rangle$ [45]. De esa manera, se tendría que “se pasa por sucesivos estados de equilibrio” similar a como ocurre en la termodinámica clásica con los procesos cuasiestáticos.

Esto resulta equivalente a plantear un estado general $|\psi(t)\rangle$ como:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n(t)\rangle \quad (1.74)$$

donde $c_n(t)$ son coeficientes que varían en el tiempo, los cuales verifican:

$$|c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2 \quad (1.75)$$

Esta última condición implica la no-transición entre los niveles que diagonalizan instantáneamente el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ debido a que la probabilidad $|c_n(t)|^2$ asociada a cada autoestado $|n(t)\rangle$ permanece constante $\forall t$. Es decir, si el sistema empieza en un autoestado $|n(0)\rangle$ de $\mathcal{H}(0)$, a un tiempo t estará en su correspondiente autoestado $|n(t)\rangle$ del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$.

Max Born y Vladimir Fock fueron los primeros en encontrar la forma de llegar a esto [50]. Para ello, debe ocurrir que el espectro de energía sea no-degenerado; en particular, que no se produzcan cruces entre los niveles instantáneos de energía. A este resultado lo denominaron como **teorema adiabático**, cuya demostración se encuentra en el Apéndice B. El mismo podemos enunciarlo como:

Teorema adiabático: Un sistema cuántico permanece en su autoestado instantáneo $|n(t)\rangle$ si la perturbación que actúa sobre él es lo bastante lenta y hay un salto energético entre su autovalor de energía $E_n(t)$ y el resto del espectro del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$. Es decir:

$$\beta_{mn}(t) \equiv \frac{\langle m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | n(t) \rangle}{E_m(t) - E_n(t)} \rightarrow 0 \quad \forall t, \quad m \neq n \quad (1.76)$$

Notar que, para no producirse transiciones en los niveles energéticos, los términos por fuera de la diagonal de $\dot{\mathcal{H}}(t)$, en la base que diagonaliza a $\mathcal{H}(t)$, son muy chicos. En particular, son chicos respecto a la separación de niveles de $\mathcal{H}(t)$. Esto es equivalente a pedir que la perturbación que afecta al sistema es suficientemente lenta, ya que podemos pensar al Hamiltoniano en un tiempo $t + dt$ (a primer orden) como:

$$\mathcal{H}(t + dt) \approx \mathcal{H}(t) + \dot{\mathcal{H}}(t)dt \quad (1.77)$$

jugando $\dot{\mathcal{H}}(t)$ el rol de una perturbación. Esto es, justamente, el análogo de la termodinámica clásica a un proceso que se realiza cuasiestáticamente.

No está de más señalar que *adiabático* en el teorema adiabático quiere decir *suficientemente lento* en contraste con lo que significa en la termodinámica clásica que es *sin intercambio de calor*; es más, en la termodinámica clásica un proceso puede realizarse de manera adiabática si su tiempo de realización es mucho más corto que el tiempo necesario para que ocurra el intercambio de calor. Es decir, mientras que el concepto de adiabaticidad en la mecánica cuántica se refiere a procesos lentos, en la termodinámica clásica se refiere a procesos que se llevan a cabo de manera rápida.

1.3.1. Un atajo adiabático

Acabamos de ver que, en el contexto de la mecánica cuántica, los procesos adiabáticos son aquellos que se realizan de manera suficientemente lenta como para evitar que se produzcan transiciones energéticas entre distintos niveles, de manera que el sistema conserva la probabilidad de estar en un autoestado instantáneo de energía. Generalmente, los sistemas que se estudian en la práctica resultan ser delicados o difíciles de controlar, como puede ser un átomo. Es común que quiera preparárselo sin cambiar sus estados o excitarlo, lo que conlleva dificultades serias debido al gran tiempo que debe emplearse para que se cumpla el límite adiabático y la probabilidad muy alta de ser perturbados, perdiéndose así sus valiosas propiedades cuánticas.

Los **atajos adiabáticos** son técnicas para soslayar las dificultades que acabamos de describir: se trata de conseguir los mismos resultados que los lentos procesos adiabáticos, pero en poco tiempo (en un tiempo finito). Existen muchos atajos adiabáticos para una transformación dada; en particular, en el Apéndice C damos un enfoque con *ingeniería inversa* [46] tal que podamos encontrar un nuevo Hamiltoniano $\mathcal{H}_{AA}(t)$, asociado a nuestro **Hamiltoniano original** $\mathcal{H}(t)$, que permita que los autoestados instantáneos $|n(t)\rangle$ del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ no produzcan transiciones energéticas de manera exacta (a comparación del límite adiabático, donde se logra de manera aproximada). Es decir, buscamos un **Hamiltoniano por atajo adiabático** $\mathcal{H}_{AA}(t)$ que pueda escribirse como:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = \mathcal{H}(t) + \mathcal{H}_{CD}(t) \quad (1.78)$$

donde llamamos $\mathcal{H}_{CD}(t)$ a nuestro **Hamiltoniano contradiabático** que *modificará* a $\mathcal{H}(t)$ y dará la contribución para que se produzca el atajo adiabático en la dinámica de nuestro sistema.

Bajo este enfoque, $\mathcal{H}_{CD}(t)$ resulta ser:

$$\mathcal{H}_{CD}(t) = -i\hbar \sum_n \sum_{m \neq n} \frac{\langle m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) | n(t) \rangle}{E_m(t) - E_n(t)} |m(t)\rangle\langle n(t)| \quad (1.79)$$

Así, podemos escribir al Hamiltoniano por atajo adiabático $\mathcal{H}_{AA}(t)$, de nuestro Hamiltoniano original $\mathcal{H}(t)$, como:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = \mathcal{H}(t) - i\hbar \sum_n \sum_{m \neq n} \beta_{mn}(t) |m(t)\rangle\langle n(t)| \quad (1.80)$$

donde habíamos definido $\beta_{mn}(t)$ en la relación (1.76).

En general, el Hamiltoniano $\mathcal{H}_{AA}(t)$ no quedará diagonal en la base de autoestados de $\mathcal{H}(t)$. La contribución de $\mathcal{H}_{CD}(t)$ podemos pensarla como una perturbación o interacción externa que modifica la dinámica del sistema únicamente en el tiempo de evolución; es decir, en $t \in [0, T]$ siendo T el tiempo que dura el proceso. Por fuera de este tiempo, $\mathcal{H}_{CD}(t) \equiv 0$ y los autoestados del sistema vuelven a ser $|n(t)\rangle$.

1.3.2. Comportamiento adiabático en el protocolo TPM

Con la intención de no desviarnos de nuestro problema principal, recordemos que el foco está en llegar a una correcta definición de trabajo para sistemas aislados. Sin embargo, a pesar de que el protocolo TPM no cumpla con la primera ley con un estado que no es diagonal en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial, resulta interesante ver qué se consigue cuando la evolución cumple con el límite

adiabático. Para ello, primero estudiaremos el valor medio de la diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$, pero en el caso en que nos encontramos en este régimen.

Expresaremos a la base de autoestados del Hamiltoniano dependiente del tiempo $\mathcal{H}(t)$ como $|n(t)\rangle$, con $t \in [0, T]$; en particular, denotaremos $|n\rangle \equiv |n(0)\rangle$ y $|\tilde{n}\rangle \equiv |n(T)\rangle$. Por otra parte, llamaremos $H \equiv \mathcal{H}(0)$ y $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(T)$. Con esto, podemos definir la base de proyectores $\Pi_n = |n\rangle\langle n|$ y $\tilde{\Pi}_m = |\tilde{m}\rangle\langle \tilde{m}|$ tales que $\tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m$ y $H = \sum_n E_n \Pi_n$, siendo $\{E_n\}, \{\tilde{E}_m\}$ los espectros de energía de H y \tilde{H} , respectivamente. Al encontrarse aislado el sistema, evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (donde t_0 es fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (1.81)$$

donde llamaremos $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$.

Nuestra matriz densidad inicial ρ en la base de autoestados de H será:

$$\rho = \sum_{n,m} c_{nm} |n\rangle\langle m| \quad (1.82)$$

dando la posibilidad de que ρ presente coherencias en el estado inicial. Así, sabiendo que $\langle \Delta E \rangle$ se define a partir de la relación (1.29), obtenemos:

$$\langle \Delta E \rangle \equiv \text{tr}[\tilde{H} \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H \rho] \quad (1.83)$$

$$= \text{tr} \left[\sum_m \tilde{E}_m |\tilde{m}\rangle\langle \tilde{m}| \mathcal{U} \sum_{n',m'} c_{n'm'} |n'\rangle\langle m'| \mathcal{U}^\dagger \right] - \text{tr} \left[\sum_n E_n |n\rangle\langle n| \sum_{n',m'} c_{n'm'} |n'\rangle\langle m'| \right] \quad (1.84)$$

Luego, en el régimen adiabático, instante a instante el sistema se queda en un autoestado del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$. Por lo cual, se tiene que al final de la evolución $\mathcal{U} |n\rangle = |\tilde{n}\rangle$. Entonces, el valor medio de la diferencia de energía en el régimen adiabático $\langle \Delta E \rangle_{(\text{ad})}$ resulta:

$$\langle \Delta E \rangle_{(\text{ad})} = \text{tr} \left[\sum_{n',m',m} c_{n'm'} \tilde{E}_m |\tilde{m}\rangle \underbrace{\langle \tilde{m}| \tilde{n}' \rangle}_{=\delta_{mn'}} \langle \tilde{m}'| \right] - \text{tr} \left[\sum_{n',m',n} c_{n'm'} E_n |n\rangle \underbrace{\langle n| n' \rangle}_{=\delta_{nn'}} \langle m'| \right] \quad (1.85)$$

$$= \text{tr} \left[\sum_{m',m} c_{mm'} \tilde{E}_m |\tilde{m}\rangle\langle \tilde{m}'| \right] - \text{tr} \left[\sum_{m',n} c_{nm'} E_n |n\rangle\langle m'| \right] \quad (1.86)$$

$$= \sum_m c_{mm} \tilde{E}_m - \sum_n c_{nn} E_n = \sum_n \underbrace{c_{nn}}_{=\langle n|\rho|n\rangle} (\tilde{E}_n - E_n) \quad (1.87)$$

$$= \sum_n \langle n|\rho|n\rangle w_{nn} \quad (1.88)$$

donde en la última línea se utilizó que $c_{nn} = \langle n|\rho|n\rangle$ y se cambió la expresión para formularla en función de un único índice n . Además, se definió $w_{nn} \equiv \tilde{E}_n - E_n$.

Como podemos ver, la magnitud $\langle \Delta E \rangle_{(\text{ad})}$ depende exclusivamente de los términos diagonales de ρ en la base de autoestados de H . Es más, vemos que el resultado muestra valores de trabajo w_{nn} que representan la diferencia de valores de energía del mismo autoestado $|n(t)\rangle$ a tiempos $t = 0$ y $t = T$, por lo que no se aprecian cruces energéticos, y ponderados por la probabilidad $c_{nn} = \langle n|\rho|n\rangle$ dada

por los términos diagonales del estado inicial ρ (se conserva la probabilidad para cada estado). Algo sorprendente es que no toman rol alguno los términos por fuera de la diagonal del estado ρ en la base de autoestados de H , dando que **las coherencias no juegan papel alguno en el límite adiabático**.

Dado esto, puede llegar a inferirse que en el límite adiabático los valores medios de variación de energía $\langle \Delta E \rangle_{(\text{ad})}$ y de trabajo $\langle W \rangle_{\text{TPM}(\text{ad})}$ dado por el protocolo TPM pueden llegar a coincidir debido a la nula relevancia de las coherencias en el estado inicial ρ . Recordando la definición para el estado *dephased* $\bar{\rho} \equiv \sum_n \Pi_n \rho \Pi_n$, el valor de $\langle W \rangle_{\text{TPM}}$ dado por la relación (1.36) cumple que, en el límite adiabático, es:

$$\langle W \rangle_{\text{TPM}(\text{ad})} = \text{tr}[\tilde{H} \mathcal{U} \bar{\rho} \mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H \rho] \quad (1.89)$$

$$\begin{aligned} &= \text{tr} \left[\sum_{n,m} \tilde{E}_m |\tilde{m}\rangle \langle \tilde{m}| \underbrace{\mathcal{U} |n\rangle \langle n|}_{=|\tilde{n}\rangle} \sum_{n',m'} c_{n'm'} |n'\rangle \underbrace{\langle m'|n\rangle \langle n| \mathcal{U}^\dagger}_{=\delta_{m'n} \quad =\langle \tilde{n}|} \right] - \\ &\quad - \text{tr} \left[\sum_n E_n |n\rangle \langle n| \sum_{n',m'} c_{n'm'} |n'\rangle \langle m'| \right] \end{aligned} \quad (1.90)$$

$$= \text{tr} \left[\sum_{n',n,m} c_{n'n} \tilde{E}_m |\tilde{m}\rangle \underbrace{\langle \tilde{m}| \tilde{n}\rangle}_{=\delta_{mn}} \underbrace{\langle n| n'\rangle}_{=\delta_{nn'}} \langle \tilde{n}| \right] - \text{tr} \left[\sum_{n',m',n} c_{n'm'} E_n |n\rangle \underbrace{\langle n| n'\rangle}_{=\delta_{nn'}} \langle m'| \right] \quad (1.91)$$

$$= \text{tr} \left[\sum_n c_{nn} \tilde{E}_n |\tilde{n}\rangle \langle \tilde{n}| \right] - \text{tr} \left[\sum_{m',n} c_{nm'} E_n |n\rangle \langle m'| \right] \quad (1.92)$$

$$= \sum_n c_{nn} \tilde{E}_n - \sum_n c_{nn} E_n = \sum_n \langle n | \rho | n \rangle w_{nn} = \langle \Delta E \rangle_{(\text{ad})} \quad \checkmark \quad (1.93)$$

corroborándose así que $\langle \Delta E \rangle_{(\text{ad})}$ y $\langle W \rangle_{\text{TPM}(\text{ad})}$ coinciden. Cabe notar que solo estamos viendo sus resultados al final del proceso, pero como durante toda la evolución se tiene que los autoestados instantáneos no producen cruces energéticos entre ellos y las probabilidades se conservan, se tiene que, en realidad, **ambos resultados coinciden durante todo el proceso**.

Capítulo 2

Medición del trabajo cuántico

Como ya hemos discutido en el capítulo anterior, gran parte de la dificultad para definir correctamente el trabajo en la mecánica cuántica radica en el hecho de que no se puede representar mediante un observable cuántico, en el sentido de un operador hermítico [15]. De aquí, una de las definiciones más comunes de trabajo en un sistema cuántico aislado es el protocolo TPM que involucra la realización de dos mediciones proyectivas de energía a tiempos distintos. No obstante, a pesar de que el protocolo TPM nos provee una definición de trabajo intuitiva y razonable, resulta complicado de implementar en la práctica [19–24] y su valor medio de trabajo no coincide con la variación de energía del sistema cuando el estado no es diagonal en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial (es decir, cuando presenta coherencias cuánticas).

En este capítulo, haremos foco en un trabajo reciente [43] que ha mostrado que la medición de trabajo del protocolo TPM no es más que una medición cuántica generalizada. Esto esclarece desde un punto de vista teórico el rol de la medición de trabajo como un POVM, los cuales se presentan todo el tiempo en la teoría de la información cuántica. Además, las mediciones generalizadas hacen uso de las correlaciones cuánticas, como el entrelazamiento, para obtener resultados que no son posibles de otra forma. Veremos que, para lograr esto, puede introducirse un sistema auxiliar (*ancilla*) que se acopla al sistema de interés cuyas propiedades se buscan medir. Luego, se hace evolucionar a los dos sistemas en conjunto de forma adecuada y, finalmente, se mide proyectivamente sobre el sistema auxiliar. Esta idea que analizaremos permite diseñar estrategias para medir el trabajo realizado en una única medición proyectiva, a diferencia del protocolo TPM. Aquí, presentaremos algunos resultados centrales y extenderemos estos mismos para el caso en que tenemos estados auxiliares lo más generales posibles.

Por último, podremos demostrar que no existe una distribución de probabilidad de trabajo general para sistemas cuánticos aislados que abarque resultados correctos ya obtenidos y satisfaga una serie de propiedades que intuitivamente uno esperaría de una definición razonable de trabajo [26], obligándonos a cambiar de paradigma para la resolución de este problema.

2.1. Mediciones de un sistema cuántico

Debemos enfatizar en el hecho de que extraer información de un sistema cuántico requiere, inevitablemente, de la realización de una medición y, por lo tanto, interactuar con el sistema. La naturaleza física del proceso de medición en sistemas cuánticos continúa siendo uno de los problemas conceptuales

y filosóficos más grandes de la mecánica cuántica. Sin embargo, para nuestros propósitos resultará suficiente una visión más pragmática, en la que nos preguntaremos simplemente qué tipos de mediciones son posibles y cómo las describe la teoría.

En el Apéndice D se desarrolla un formalismo estándar de las **mediciones proyectivas** y las **mediciones generalizadas** en la mecánica cuántica. Allí, describimos cómo asignar probabilidades para cada enfoque y cómo queda el estado cuántico luego del proceso de medición. En particular, concluimos que las mediciones proyectivas no son la forma más general de asignar probabilidades a estados cuánticos (dado que son innecesariamente restrictivas), teniéndose que recurrir a las mediciones generalizadas para esto. Además, la forma más general posible de realizar una medición está descrita formalmente por un POVM (del inglés: “Positive Operator Valued Measure”) que se encuentra conformado por un conjunto de operadores $\{E_\mu\}$, con $1 \leq \mu \leq N$, que cumplen ciertas propiedades. Luego, las mediciones proyectivas resultan ser un caso particular para este formalismo.

Al momento de interpretar físicamente el significado de los operadores en un POVM, resulta extremadamente útil el **teorema de Neumark**, el cual también es desarrollado en el Apéndice D. Aquí, damos un análisis detallado del mismo, donde explicamos cómo la inclusión de un sistema cuántico auxiliar puede ayudar a obtener los resultados deseados. Siendo más específico, puede acoplarse el sistema sobre el cual se quiere medir con un sistema cuántico auxiliar mediante una transformación unitaria global apropiada y, finalmente, realizando una medición proyectiva estándar sobre el sistema auxiliar [51]. Este teorema garantiza que esta implementación del POVM exista, pero en general no es única, sino que hay distintas implementaciones físicas de un mismo POVM.

En lo que sigue, veremos cómo el formalismo de las mediciones generalizadas y el teorema de Neumark pueden ayudarnos a obtener un protocolo de medición para el trabajo cuántico.

2.2. Medición generalizada del trabajo

En el Capítulo 1, hemos analizado los problemas que conlleva dar una correcta definición de trabajo en la mecánica cuántica. La principal dificultad radica en que no existe un observable físico, en el sentido de operador hermítico, que pueda reproducir todas las características y propiedades que debe tener este. Esto ha decantado en la conclusión de que la medición de trabajo no se puede reducir a una simple medición proyectiva estándar. Sin embargo, esto no significa que no pueda medirse, ya que conocemos otro tipo de mediciones en la mecánica cuántica: las mediciones generalizadas. Por lo tanto, cabe preguntarse si, a lo mejor, podemos definir el trabajo a partir de mediciones generalizadas; es decir, a partir de un POVM.

Lo que haremos a continuación será estudiar dos tipos de protocolos para la medición de trabajo y ver si es posible asociar un POVM a cada uno de ellos. Primero, analizaremos el ya conocido protocolo TPM y, por otro lado, desarrollaremos el protocolo de única medición proyectiva (o **protocolo SM**, del inglés: “Single Measurement”)

2.2.1. Protocolo TPM

En la Sección 1.1.2, fuimos capaces de desarrollar y analizar el protocolo TPM en profundidad. Recordemos que este protocolo sugiere una definición de trabajo, comúnmente aceptada, que involucra la realización de dos mediciones proyectivas del Hamiltoniano: al inicio y al final de la evolución. A pesar de que este protocolo fue un éxito para recuperar los teoremas de fluctuación ya conocidos

de la mecánica estadística, esta vez para sistemas cuánticos, no reproduciría la primera ley en los casos donde el sistema presentara coherencias cuánticas. Es entonces que no llega a ser una definición completamente satisfactoria para nuestro propósito. Sin embargo, este protocolo ayudó a incluir la idea de que el trabajo puede ser medido aunque no exista un observable asociado a él. Entonces, da el puntapié a que la distribución de probabilidad de trabajo del protocolo TPM pueda ser construida a partir de una medición generalizada.

Para la construcción de este protocolo, habíamos considerado un sistema cuántico descrito por un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(\lambda(t))$ que depende del tiempo a través de un protocolo $\lambda \equiv \lambda(t)$. Al inicio, el sistema se encuentra en un estado descrito por una matriz densidad ρ y se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ en $t = 0$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. El sistema está aislado, por lo que evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (donde t_0 es fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.1)$$

Usaremos que $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(T))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$. Luego, definiendo $\{E_n\}$ el espectro de energías del Hamiltoniano inicial H y $\{\tilde{E}_m\}$ al espectro de energías del Hamiltoniano final \tilde{H} , si tomamos que en la medición a $t = 0$ se obtuvo un valor de energía E_n y posteriormente a $t = T$ resultó ser \tilde{E}_m , el trabajo w_{nm} medido en esta realización particular es:

$$w_{nm} \equiv \tilde{E}_m - E_n \quad (2.2)$$

Efectivamente, notemos que la probabilidad $P_{\text{TPM}}(w_{nm})$ de medir un dado valor de trabajo w_{nm} está dada por la relación ya obtenida en (1.26). Entonces, reescribimos:

$$P_{\text{TPM}}(w_{nm}) = \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \quad (2.3)$$

$$= \text{tr}[\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho] \equiv \text{tr}[E_{nm} \rho] \quad (2.4)$$

donde definimos a los operadores $E_{nm} \equiv \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n$, siendo Π_n y $\tilde{\Pi}_m$ los proyectores asociados a las mediciones (autovalores) de energía E_n y \tilde{E}_m , respectivamente. Vemos que esta última expresión coincide con la estructura de un POVM (ver ecuación D.5 del Apéndice D) tomando $E_\mu \equiv E_{nm}$. Aún habría que mostrar que estos operadores cumplen con las propiedades que caracterizan a todo POVM. Las mismas son:

P1. Son hermíticos:

Demostración:

Si aplicamos el traspuesto conjugado a cada uno de los operadores E_{nm} :

$$E_{nm}^\dagger = \left(\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \right)^\dagger = \Pi_n^\dagger \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m^\dagger \mathcal{U} \Pi_n^\dagger \quad (2.5)$$

$$= \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n = E_{nm} \quad \checkmark \quad (2.6)$$

debido a que los proyectores cumplen $\Pi_n = \Pi_n^\dagger$ y $\tilde{\Pi}_m = \tilde{\Pi}_m^\dagger$ por ser, también, hermíticos. \square

P2. Son semi-definidos positivos:

Demostración:

Calculando el valor medio de los operadores E_{nm} en un estado arbitrario ρ :

$$\langle E_{nm} \rangle = \text{tr}[E_{nm}\rho] = \text{tr} \left[E_{nm} \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right] = \sum_i p_i \langle\psi_i|E_{nm}|\psi_i\rangle \quad (2.7)$$

$$= \sum_i p_i \langle\psi_i|\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi_i\rangle = \sum_i p_i \langle\psi_i|\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi_i\rangle \quad (2.8)$$

$$= \sum_i p_i \|\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi_i\rangle\|^2 \geq 0 \quad \checkmark \quad (2.9)$$

donde expresamos a $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ en una base ortonormal $\{|\psi_i\rangle\}$ con $p_i \geq 0$ y utilizamos la propiedad $\tilde{\Pi}_m^2 = \tilde{\Pi}_m$ de los proyectores. \square

P3. Suman la identidad:

Demostración:

Si sumamos sobre los índices n, m :

$$\sum_{n,m} E_{nm} = \sum_{n,m} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n = \sum_n \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \sum_m \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \quad (2.10)$$

$$= \sum_n \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} \Pi_n = \sum_n \Pi_n^2 = \sum_n \Pi_n = \mathbb{I} \quad \checkmark \quad (2.11)$$

dado que $\sum_m \tilde{\Pi}_m = \mathbb{I}$, $\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = \mathbb{I}$ y $\Pi_n^2 = \Pi_n$, donde notamos \mathbb{I} al operador identidad. \square

El cumplimiento de estas tres características concluye en que los operadores E_{nm} definen un POVM y, por tanto, la medición de trabajo en el protocolo TPM no es más que una medición generalizada. En este sentido, la medición de trabajo no es fundamentalmente distinta a cualquier otra medición. Esto implica que, sorprendentemente, la estrategia del protocolo TPM puede ser reemplazada por una estrategia que requiere una única medición a un único tiempo si introducimos sistemas auxiliares y evoluciones unitarias apropiadas, como indica el teorema de Neumark (ver Apéndice D). Sin embargo, esto resultaría inútil para el propósito de dar con una correcta definición de trabajo debido a que el protocolo TPM no obtiene la estadística correcta en el caso general.

2.2.2. Protocolo SM

El hecho de que el protocolo TPM pueda ser tratado como una medición generalizada es un avance extraordinario. Si bien sus resultados no son los esperados para una correcta definición del trabajo, esto no implica que no podamos buscar otras alternativas de construir un protocolo mediante una medición generalizada y, con este, tener un resultado que sea satisfactorio. Por lo tanto, lo que buscaremos es armar un nuevo protocolo que, mediante una única medición proyectiva sobre el sistema auxiliar, reproduzcamos la distribución de probabilidad de trabajo correcta de nuestro sistema de interés. Este protocolo será bautizado como protocolo SM.

Ahora bien, si queremos seguir en esta línea, es indispensable tener presente que el teorema de Neumark (ver Apéndice D) nos condiciona a acoplar, a nuestro sistema de interés \mathcal{S} , sistemas auxiliares (*ancillas*) \mathcal{A} y operadores unitarios \mathcal{U} apropiados para esa tarea. Es más, notemos que, en particular,

la proyección que se realiza en el sistema global $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ en el teorema de Neumark (ver ecuación D.11 del Apéndice D) en realidad resulta ser una proyección sobre la *ancilla*; es decir, la medición se realiza sobre el sistema auxiliar. Esto puede ser provechoso si tomamos a la *ancilla* como un codificador de información del sistema \mathcal{S} . Lo que se quiere decir es que, si el sistema auxiliar \mathcal{A} puede incluir la información de la variación de energía que sufre el sistema \mathcal{S} , entonces una única medición proyectiva al final de la evolución revelaría dicho valor. Esta es la genialidad que explotaremos en el protocolo SM.

Entonces, sea \mathcal{S} el sistema cuyo trabajo se quiere medir y \mathcal{A} (la *ancilla*) el sistema auxiliar que introduciremos, supondremos el caso más sencillo donde \mathcal{A} tiene un grado de libertad continuo \mathcal{W} (el cual es un observable) tal que w son sus autovalores y $|w\rangle$ sus autoestados, siendo $\{|w\rangle : w \in \mathbb{R}\}$ una base ortonormal particular. Luego, llevaremos a cabo una interacción entre \mathcal{S} y \mathcal{A} de manera tal que, al medir el sistema auxiliar, este termine en un estado $|w\rangle$ que revelará el trabajo realizado por \mathcal{S} , mientras que \mathcal{S} estará en un estado ρ_w que dependerá de la implementación particular del proceso de medición. Un esquema básico de este protocolo puede visualizarse en la Figura 2.1. Debe quedar claro que la interacción que propongamos será la parte fundamental del protocolo SM, ya que será la encargada de extraer la información del sistema \mathcal{S} para que quede codificada en el sistema auxiliar \mathcal{A} y así inferir el valor de trabajo al medirse sobre él.

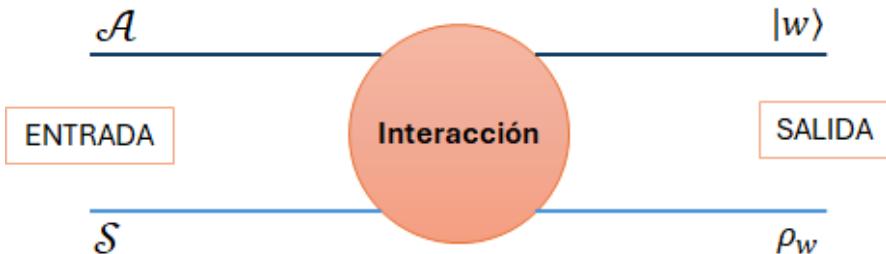


Figura 2.1: Esquema de una medición generalizada para medir el trabajo. El sistema \mathcal{S} se acopla con la *ancilla* \mathcal{A} mediante una interacción (con operadores unitarios y proyectando como rige el teorema de Neumark) tal que, a la salida, el sistema auxiliar se encuentre en el estado $|w\rangle$. Al registrar el resultado w , el sistema \mathcal{S} se encuentra en un estado ρ_w que depende de los detalles de la interacción.

Para saber cómo definir esta interacción, consideremos que \mathcal{S} es un sistema cuántico gobernado por la dinámica de un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(\lambda(t))$. El Hamiltoniano depende del tiempo a través de un *protocolo* $\lambda \equiv \lambda(t)$ que realiza trabajo sobre el sistema \mathcal{S} y que suponemos que podemos controlar externamente. Inicialmente, a $t = 0$, el sistema \mathcal{S} se encuentra en un estado descrito por $|\psi\rangle$. Luego, se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. Más allá de la dependencia de λ , diremos que el sistema está aislado, por lo que evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (con t_0 un tiempo fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.12)$$

Además, con el propósito de simplificar la notación, llamaremos $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(t))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$. Vamos a asociarles espectros de energías $\{E_n\}$ y $\{\tilde{E}_m\}$ a estos Hamiltonianos H, \tilde{H} , de manera

que podemos escribirlos como:

$$H = \sum_n E_n \Pi_n \quad , \quad \tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m \quad (2.13)$$

siendo Π_n y $\tilde{\Pi}_m$ los proyectores de H y \tilde{H} , respectivamente.

Definida la dinámica de \mathcal{S} durante la evolución, queremos obtener el valor de trabajo realizado codificando los valores de energía que tuvo al inicio y al final de dicha evolución. Es decir, queremos realizar un tipo de interacción donde en la *ancilla* “se almacene” la información de las energías E_n y \tilde{E}_m del sistema \mathcal{S} , correspondientes a los Hamiltonianos inicial H y final \tilde{H} , respectivamente. Esto, claramente, produce un entrelazamiento entre el sistema \mathcal{S} y la *ancilla* \mathcal{A} . Para ser más claros, una idea básica para implementar este protocolo consiste en:

- 1°. El estado auxiliar \mathcal{A} inicia en el estado $|w = 0\rangle$.
- 2°. Antes de la evolución, se realiza una primera interacción con un operador unitario \mathcal{U}_1 , de manera que la información de la energía E_n de \mathcal{S} “se almacene” en la *ancilla*. De esta forma, el estado auxiliar \mathcal{A} queda en el estado $|w = -E_n\rangle$.
- 3°. Se evoluciona el sistema \mathcal{S} mediante el operador unitario \mathcal{U} .
- 4°. Se realiza una segunda interacción luego de la evolución, con un operador unitario \mathcal{U}_2 , de manera que la información de la energía \tilde{E}_m de \mathcal{S} quede “guardada” en la *ancilla*. Así, el estado auxiliar \mathcal{A} queda en el estado $|w = \tilde{E}_m - E_n\rangle$.
- 5°. Se proyecta sobre el sistema auxiliar \mathcal{A} que devuelve el estado $|w = \tilde{E}_m - E_n\rangle$ e informa del valor de trabajo del sistema \mathcal{S} .

En resumen, este protocolo se basaría en aplicar la secuencia de operadores \mathcal{U}_1 , $(\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}})$, \mathcal{U}_2 sobre el sistema global $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ para, finalmente, medir el sistema auxiliar \mathcal{A} , donde denominamos $\mathbb{I}_{\mathcal{A}}$ al operador identidad en el espacio de la *ancilla*. Si pensamos que los valores que codifica el sistema auxiliar son almacenados, entonces puede asociarse que la *ancilla* \mathcal{A} cumple un rol análogo al de una batería, sobre la cual luego puede extraérsele trabajo si así se desea. Lo que estaría faltando es definir los operadores \mathcal{U}_1 y \mathcal{U}_2 adecuadamente de forma que reproduzcan el protocolo que queremos. Un diagrama más detallado del protocolo puede visualizarse en la Figura 2.2.

Cabe destacar una gran ventaja que presenta el protocolo SM frente al protocolo TPM: como la medición se realiza al final de la medición, las coherencias cuánticas solo son destruidas al final del proceso. Por lo tanto, *a priori*, resolveríamos el problema de la invasividad que presenta el protocolo TPM y por el cual no es fidedigno a la variación de energía en estados que no son diagonales en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H .

Para hallar los Hamiltonianos de interacción $\mathcal{H}_1^{int}, \mathcal{H}_2^{int}$ que son responsables de los operadores unitarios $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2$, respectivamente, es útil pensar que lo que ocurre en la variable w cada vez que se “guarda” uno de estos valores es como si se produjeran “desplazamientos”. Entonces, resulta lógico suponer que en nuestros Hamiltonianos de interacción $\mathcal{H}_1^{int}, \mathcal{H}_2^{int}$ debe aparecer el generador de las traslaciones en la base $\{|w\rangle\}$, que lo denominaremos \mathcal{T} . Definiendo $\{\tau\}$ y $\{|\tau\rangle\}$ a los autovalores y autoestados de \mathcal{T} , respectivamente, se tiene que \mathcal{W} es el generador de traslaciones en la base $|\tau\rangle$. Entonces, se satisface la relación de commutación canónica $[\mathcal{W}, \mathcal{T}] = i\hbar$.

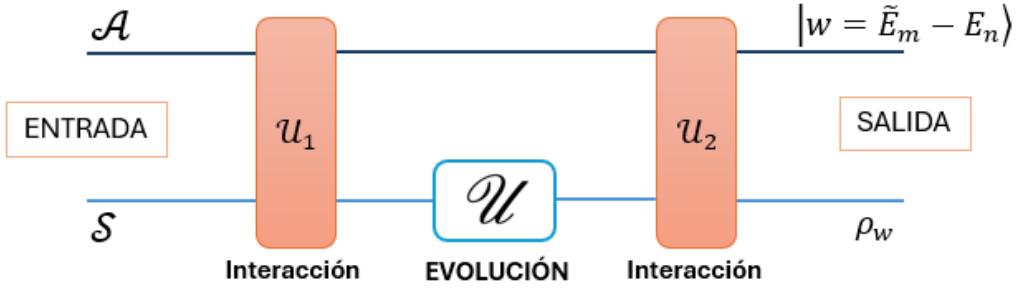


Figura 2.2: Esquema de la implementación del POVM propuesto para medir trabajo. La diferencia de energía del sistema \mathcal{S} antes y después de la evolución \mathcal{U} se codifica en la *ancilla* \mathcal{A} mediante dos operaciones entrelazantes (interacciones) $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2$. A la salida, el sistema auxiliar se encuentre en el estado $|w = \tilde{E}_m - E_n\rangle$ mientras que el sistema \mathcal{S} se encuentra en un estado ρ_w .

Con esto, podemos definir:

$$\mathcal{H}_1^{int} \equiv -\kappa H \otimes \mathcal{T} \quad (2.14)$$

$$\mathcal{H}_2^{int} \equiv \kappa \tilde{H} \otimes \mathcal{T} \quad (2.15)$$

donde κ es una constante que proporciona las unidades correctas. Notemos que el signo difiere en cada Hamiltoniano de interacción. Esto es debido a cómo definimos antes el protocolo SM, ya que en la primera interacción queremos un desplazamiento $-E_n$ en la variable w con el Hamiltoniano H , mientras que la segunda interacción requiere un desplazamiento \tilde{E}_m en la variable w con el Hamiltoniano \tilde{H} . De esta forma, los operadores unitarios $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2$ que propician estos Hamiltonianos de interacción resultan:

$$\mathcal{U}_1(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \kappa H \otimes \mathcal{T} t} \quad (2.16)$$

$$\mathcal{U}_2(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \kappa \tilde{H} \otimes \mathcal{T} t} \quad (2.17)$$

donde si evaluamos en el tiempo $t = 1/\kappa$, obtenemos:

$$\mathcal{U}_1 \equiv \mathcal{U}_1(t = 1/\kappa) = e^{\frac{i}{\hbar} \kappa H \otimes \mathcal{T} \frac{1}{\kappa}} = e^{i H \otimes \mathcal{T} / \hbar} \quad (2.18)$$

$$\mathcal{U}_2 \equiv \mathcal{U}_2(t = 1/\kappa) = e^{-\frac{i}{\hbar} \kappa \tilde{H} \otimes \mathcal{T} \frac{1}{\kappa}} = e^{-i \tilde{H} \otimes \mathcal{T} / \hbar} \quad (2.19)$$

Dicho esto, haremos que el operador unitario \mathcal{U}_1 sea el responsable de la primera interacción y el operador unitario \mathcal{U}_2 proporcione la segunda interacción.

Es importante mencionar que interacciones de la forma de $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2$ se han estudiado experimentalmente desde los inicios de la mecánica cuántica. Efectivamente, esta es la interacción que se realiza en el famoso experimento de Stern-Gerlach, una de las primeras experiencias en revelar el carácter cuántico de la naturaleza. En su experimento original, Stern y Gerlach generaban en un horno un haz de átomos de plata para luego pasarlos por una región del espacio con un campo magnético inhomogéneo. La interacción de este campo con el *spin* de los átomos causa deflexión de su trayectoria y la magnitud de esta desviación depende de la intensidad del campo y del tiempo de interacción. En términos de la notación utilizada, el grado de libertad de *spin* del átomo sería el sistema \mathcal{S} mientras que la \mathcal{A} está codificada en los grados de libertad espaciales. Notablemente, este tipo de secuencias de operadores $\mathcal{U}_1, (\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}), \mathcal{U}_2$ que actúan sobre el sistema global $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ se ha realizado recientemente en un experimento para crear

superposiciones coherentes de autoestados de momento con “atom-chip” [53]. Éstos son dispositivos integrados que permiten controlar con gran precisión campos electromagnéticos sobre su superficie. De esta forma, pueden manipular y controlar el estado de una nube de iones ^{87}Rb que dejan caer sobre la superficie del chip.

Con esto, ya tenemos a nuestros operadores definidos y reunimos todo lo necesario para poner el protocolo en marcha para un caso particular sencillo y ver sus resultados. Supongamos un estado inicial formado por el sistema \mathcal{S} y la *ancilla* \mathcal{A} en un estado producto. Ambos se encuentran en un estado puro que denotamos $|\psi\rangle$ para \mathcal{S} y $|w\rangle$ para \mathcal{A} . Luego, procedemos con el protocolo SM definido anteriormente:

1°. El estado auxiliar \mathcal{A} inicia en el estado $|w = 0\rangle$. Definiendo al estado global inicial como $|\Psi_0\rangle$:

$$|\Psi_0\rangle \equiv |\psi\rangle \otimes |w = 0\rangle \quad (2.20)$$

2°. Se realiza una primera interacción sobre el estado $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ con un operador unitario $\mathcal{U}_1 = e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar}$, donde esta interacción no es más que una traslación en la variable w sobre la *ancilla* \mathcal{A} , condicionada por el valor de energía inicial de \mathcal{S} :

$$\mathcal{U}_1 |\Psi_0\rangle = e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} |\psi\rangle \otimes |w = 0\rangle \quad (2.21)$$

$$= \sum_n \Pi_n |\psi\rangle \otimes e^{iE_n \mathcal{T}/\hbar} |w = 0\rangle \quad (2.22)$$

$$= \sum_n \Pi_n |\psi\rangle \otimes |w = -E_n\rangle \quad (2.23)$$

Aquí, la interacción entrelaza al sistema \mathcal{S} y a la *ancilla* \mathcal{A} correlacionando los valores de energía de E_n y los estados de $|w = -E_n\rangle$.

3°. Aplicamos una evolución unitaria \mathcal{U} que hace trabajo sobre \mathcal{S} :

$$(\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) \mathcal{U}_1 |\Psi_0\rangle = (\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) \sum_n \Pi_n |\psi\rangle \otimes |w = -E_n\rangle \quad (2.24)$$

$$= \sum_n \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle \otimes |w = -E_n\rangle \quad (2.25)$$

4°. Se realiza la segunda interacción sobre el estado $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ con un operador unitario $\mathcal{U}_2 = e^{-i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar}$, donde esta interacción no es más que una traslación en la variable w sobre la *ancilla* \mathcal{A} , condicionada por el valor de energía final de \mathcal{S} :

$$\mathcal{U}_2 (\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) \mathcal{U}_1 |\Psi_0\rangle = e^{-i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar} \sum_n \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle \otimes |w = -E_n\rangle \quad (2.26)$$

$$= \sum_{n,m} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle \otimes e^{-i\tilde{E}_m \mathcal{T}/\hbar} |w = -E_n\rangle \quad (2.27)$$

$$= \sum_{n,m} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle \otimes |w = \tilde{E}_m - E_n\rangle \equiv |\Psi_f\rangle \quad (2.28)$$

5°. El protocolo finaliza con una medición sobre el estado \mathcal{A} que permite inferir los valores de trabajo. Por lo tanto, escribimos la matriz densidad ρ del estado final $|\Psi_f\rangle$ y hallamos $\tilde{\rho}_{\mathcal{A}}$ que es la matriz densidad reducida de la *ancilla* al finalizar el protocolo. Al tomar traza parcial sobre el sistema

\mathcal{S} :

$$\tilde{\rho}_{\mathcal{A}} = \text{tr}_{\mathcal{S}}[\rho] = \text{tr}_{\mathcal{S}}[|\Psi_f\rangle\langle\Psi_f|] \quad (2.29)$$

$$= \text{tr}_{\mathcal{S}} \left[\sum_{n,n',m,m'} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle\langle\psi| \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_{m'} \otimes |w = \tilde{E}_m - E_n\rangle\langle w = \tilde{E}_{m'} - E_{n'}| \right] \quad (2.30)$$

$$= \sum_{n,n',m,m'} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle\langle\psi| \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_{m'} \right] |w = \tilde{E}_m - E_n\rangle\langle w = \tilde{E}_{m'} - E_{n'}| \quad (2.31)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle\langle\psi| \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] |w = \tilde{E}_m - E_n\rangle\langle w = \tilde{E}_m - E_{n'}| \quad (2.32)$$

donde en la última línea utilizamos que $\tilde{\Pi}_m \tilde{\Pi}_{m'} = \delta_{mm'} \tilde{\Pi}_m$. Este caso puede generalizarse para cuando \mathcal{S} inicia en un estado mixto $\rho_{\mathcal{S}}$. Basta con reemplazar:

$$|\psi\rangle\langle\psi| \longrightarrow \rho_{\mathcal{S}} \quad (2.33)$$

Así, $\tilde{\rho}_{\mathcal{A}}$ resulta ser:

$$\boxed{\tilde{\rho}_{\mathcal{A}} = \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] |w = w_{nm}\rangle\langle w = w_{n'm}|} \quad (2.34)$$

donde llamamos $w_{nm} \equiv \tilde{E}_m - E_n$.

Finalmente, si queremos saber la densidad de probabilidad de trabajo $P_{\text{SM}}(W)$ dado el protocolo SM, debemos medir la probabilidad de encontrar al sistema auxiliar \mathcal{A} en el estado $|W\rangle$. Esto resulta:

$$P_{\text{SM}}(W) \equiv \langle W | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | W \rangle \quad (2.35)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \langle W | w = w_{nm} \rangle \langle w = w_{n'm} | W \rangle \quad (2.36)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \delta(W - w_{nm}) \delta(W - w_{n'm}) \quad (2.37)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) = P_{\text{TPM}}(W) \quad (2.38)$$

que es, nada más ni nada menos, que la distribución de probabilidad del protocolo TPM que ya obtuvimos en (1.28). Es decir, visto desde otra perspectiva, este protocolo en particular resulta ser una forma de medir el protocolo TPM mediante una medición cuántica generalizada.

Esto resulta ser algo muy desafortunado ya que la implementación del protocolo SM, con estas interacciones definidas y esta *ancilla* inicial utilizada, no devolvió un resultado diferente al que ya conocíamos. La idea novedosa de agregar sistemas auxiliares e interacciones que satisfagan el teorema de Neumark no estaría rindiendo sus frutos y pareciese que no se presentara una solución clara a la problemática de definir correctamente el trabajo en sistemas cuánticos. Es como si diéramos vueltas en círculos y el protocolo TPM nos estuviese diciendo a gritos que es la mejor alternativa que existe para definir el trabajo mediante una distribución de probabilidad en el marco de la mecánica cuántica.

Sin embargo, a la hora de hallar culpables, pareciese que la utilización del estado inicial de la *ancilla* como $|w = 0\rangle$ tiene la mayor responsabilidad, ya que de este es donde florecen las funciones

delta de Dirac y, con ello, la expresión de la distribución de probabilidad del protocolo TPM. Uno podría llegar a interpretar que, a lo mejor, debe buscarse sistemas auxiliares más sofisticados para poder explotar al máximo este protocolo y así conseguir una distribución de probabilidad que sea acorde a la que buscamos. Por lo tanto, no estaría mal plantear un estado general $|\phi\rangle$ para nuestro sistema auxiliar inicial (que depende de la variable w) y analizar qué resultados pueden obtenerse de él, dejando inalterado el resto del protocolo.

Siguiendo esta idea, supongamos un estado inicial formado por el sistema \mathcal{S} y la *ancilla* \mathcal{A} en un estado producto. Ambos se encuentran en un estado puro que denotamos $|\psi\rangle$ para \mathcal{S} y $|\phi\rangle$ para \mathcal{A} . Luego, procedemos con el protocolo de la siguiente manera:

1°. El estado auxiliar \mathcal{A} inicia en el estado general $|\phi\rangle$. Definiendo al estado global inicial como $|\Phi_0\rangle$:

$$|\Phi_0\rangle \equiv |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \quad (2.39)$$

2°. Se realiza una primera interacción sobre el estado $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ con un operador unitario $\mathcal{U}_1 = e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar}$, donde esta interacción no es más que una translación en la variable w sobre la *ancilla* \mathcal{A} , condicionada por el valor de energía inicial de \mathcal{S} :

$$\mathcal{U}_1 |\Phi_0\rangle = e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \quad (2.40)$$

$$= \sum_n \Pi_n |\psi\rangle \otimes e^{iE_n \mathcal{T}/\hbar} |\phi\rangle \quad (2.41)$$

$$= \sum_n \Pi_n |\psi\rangle \otimes D_n |\phi\rangle \quad (2.42)$$

donde definimos $D_n \equiv e^{iE_n \mathcal{T}/\hbar}$. Aquí, la interacción entrelaza al sistema \mathcal{S} y a la *ancilla* \mathcal{A} .

3°. Aplicamos una evolución unitaria \mathcal{U} que hace trabajo sobre \mathcal{S} :

$$(\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) \mathcal{U}_1 |\Phi_0\rangle = (\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) \sum_n \Pi_n |\psi\rangle \otimes D_n |\phi\rangle \quad (2.43)$$

$$= \sum_n \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle \otimes D_n |\phi\rangle \quad (2.44)$$

4°. Se realiza la segunda interacción sobre el estado $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ con un operador unitario $\mathcal{U}_2 = e^{-i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar}$, donde esta interacción no es más que una translación en la variable w sobre la *ancilla* \mathcal{A} , condicionada por el valor de energía final de \mathcal{S} :

$$\mathcal{U}_2 (\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) \mathcal{U}_1 |\Phi_0\rangle = e^{-i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar} \sum_n \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle \otimes D_n |\phi\rangle \quad (2.45)$$

$$= \sum_{n,m} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle \otimes e^{-i\tilde{E}_m \mathcal{T}/\hbar} D_n |\phi\rangle \quad (2.46)$$

$$= \sum_{n,m} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle \otimes D_{nm} |\phi\rangle \equiv |\Phi_f\rangle \quad (2.47)$$

donde definimos $D_{nm} \equiv e^{-iw_{nm} \mathcal{T}/\hbar}$ con $w_{nm} \equiv \tilde{E}_m - E_n$.

5°. El protocolo finaliza con una medición sobre el estado \mathcal{A} que permite inferir los valores de trabajo. Por lo tanto, escribimos la matriz densidad ρ del estado final $|\Phi_f\rangle$ y hallamos $\tilde{\rho}_{\mathcal{A}}$ que es la matriz

densidad reducida de la *ancilla* al finalizar el protocolo. Al tomar traza parcial sobre el sistema \mathcal{S} :

$$\tilde{\rho}_{\mathcal{A}} = \text{tr}_{\mathcal{S}}[\rho] = \text{tr}_{\mathcal{S}}[|\Phi_f\rangle\langle\Phi_f|] \quad (2.48)$$

$$= \text{tr}_{\mathcal{S}} \left[\sum_{n,n',m,m'} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle\langle\psi| \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_{m'} \otimes D_{nm} |\phi\rangle\langle\phi| D_{n'm'}^\dagger \right] \quad (2.49)$$

$$= \sum_{n,n',m,m'} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle\langle\psi| \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_{m'} \right] D_{nm} |\phi\rangle\langle\phi| D_{n'm'}^\dagger \quad (2.50)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n |\psi\rangle\langle\psi| \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] D_{nm} |\phi\rangle\langle\phi| D_{n'm}^\dagger \quad (2.51)$$

donde en la última línea utilizamos que $\tilde{\Pi}_m \tilde{\Pi}_{m'} = \delta_{mm'} \tilde{\Pi}_m$. Este caso puede generalizarse para cuando \mathcal{S} y \mathcal{A} comienzan en estados mixtos $\rho_{\mathcal{S}}$ y $\rho_{\mathcal{A}}$, respectivamente. Basta con reemplazar:

$$|\psi\rangle\langle\psi| \longrightarrow \rho_{\mathcal{S}} \quad , \quad |\phi\rangle\langle\phi| \longrightarrow \rho_{\mathcal{A}} \quad (2.52)$$

Así, $\tilde{\rho}_{\mathcal{A}}$ resulta ser:

$$\boxed{\tilde{\rho}_{\mathcal{A}} = \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] D_{nm} \rho_{\mathcal{A}} D_{n'm}^\dagger} \quad (2.53)$$

Notar que en el caso donde $\rho_{\mathcal{A}} = |w=0\rangle\langle w=0|$ recuperamos la expresión (2.34). Es decir, este resultado sirve para cualquier estado general $\rho_{\mathcal{A}}$ en el que se encuentre inicialmente la *ancilla*.

Así, si queremos hallar la distribución de probabilidad asociada, debemos saber la probabilidad de encontrar a \mathcal{A} en el estado $|W\rangle$. Por lo tanto, la distribución de probabilidad que se obtenga dependerá del estado inicial $\rho_{\mathcal{A}}$ del sistema auxiliar. Esto resulta un poco incómodo ya que existe una infinita cantidad de estados $\rho_{\mathcal{A}}$ con los que podemos asociar inicialmente a nuestro sistema auxiliar y, dependiendo de su expresión, obtendríamos distintas distribuciones de probabilidad. Entonces, ¿cuál *ancilla* escogemos? ¿Hay una que sea “más correcta” de utilizar que otra? Y en todo caso, ¿por qué?

Esto podría entenderse de que, en realidad, debemos cambiar la forma de las interacciones $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2$ buscando otros Hamiltonianos de interacción que cumplan con lo que deseamos, o inclusive agregar más interacciones o más sistemas auxiliares. Así, aumentaríamos todavía más el número de las distintas distribuciones de probabilidad que podemos obtener. Esto no parece una buena forma de caracterizar al trabajo, ya que nosotros queremos una **expresión general** y no particular que dependa de la *ancilla* o las interacciones utilizadas. Es así como aún no es clara una salida a la problemática de definir el trabajo en mecánica cuántica mediante una distribución de probabilidad, dadas las arbitrariedades que podemos incluir en las mediciones generalizadas. De todas formas, es importante resaltar que **el trabajo debe ser fruto de una medición cuántica generalizada**, sino no podríamos medir sus resultados.

En adicional a todo esto, parece que el problema es aún peor de lo que imaginamos. Recientemente, pudo demostrarse que es imposible dar con esa distribución de probabilidad de trabajo general [26]. Es decir, cambiar el protocolo de medición desarrollado, involucrar otras interacciones o cambiar la *ancilla* para luego hallar su distribución de probabilidad será inútil frente a esa realidad. A continuación, daremos un mayor detalle de este resultado.

2.3. Inexistencia de la distribución de probabilidad general de trabajo

Viendo en retrospectiva, resulta increíble dimensionar en lo que ha desembocado una pregunta que parecía meramente inocente sobre cómo definir correctamente el trabajo en sistemas cuánticos aislados. En el Capítulo 1, hemos tenido que recurrir a las herramientas que ofrece la termodinámica clásica debido a que la definición que presta la mecánica clásica como la fuerza que actúa sobre una partícula a lo largo de una trayectoria queda obsoleta debido a que el concepto de trayectoria deja de tener sentido en mecánica cuántica. Con ello, se tuvo el intento de encontrar definiciones basadas en analogías clásicas del trabajo, donde se incluye al operador de trabajo, que fracasan en el momento de recuperar los teoremas de fluctuación, dando como conclusión que el trabajo no es un observable [17]. Por otra parte, la novedosa invención del protocolo TPM, que da una definición intuitiva mediante dos mediciones proyectivas a distintos tiempos, logró recobrar las identidades de Crooks y Jarzynski, pero no cumple la primera ley en estados que presentan coherencias al inicio de la evolución.

En el desarrollo de este capítulo, se intentó definir al trabajo como una medición generalizada y obtener su distribución de probabilidad para sistemas cuánticos aislados con la implementación de *ancillas* e interacciones que cumplieran el teorema de Neumark (ver Apéndice D). Así surgió el protocolo SM, siendo un nuevo intento por resolver este problema pero que no quedaría muy en claro cómo obtener dicha distribución general de trabajo. Desafortunadamente, veremos que esta distribución de probabilidad de trabajo general no existe si es que esperamos que satisfaga una serie de propiedades que intuitivamente uno esperaría de ella [26], lo que nos obligará a dar un cambio de paradigma.

Para ello, consideremos un sistema cuántico descrito por la matriz densidad ρ que se encuentra aislado y, por lo tanto, evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$, siendo t_0 un tiempo fijo. Este operador cumple la ecuación diferencial con un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.54)$$

donde $t \in [0, T]$ y llamaremos $H \equiv \mathcal{H}(0)$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(T)$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$. Vamos a asociarles espectros de energías $\{E_n\}$ y $\{\tilde{E}_m\}$ a ambos Hamiltonianos, de manera que podemos escribirlos como:

$$H = \sum_n E_n \Pi_n \quad , \quad \tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m \quad (2.55)$$

siendo Π_n y $\tilde{\Pi}_m$ los proyectores de H y \tilde{H} , respectivamente.

Definida la dinámica del sistema, estableceremos tres requerimientos que debe cumplir la distribución de probabilidad general de trabajo $P(W)$ que estamos buscando. Cabe aclarar que, además, queremos contar con un esquema o protocolo que minimice la invasión sobre el sistema y tenga resultados acordes a lo físicamente esperados. Con ello, definimos las condiciones:

(I) Cumplimiento de la primera ley: Para toda evolución de un sistema cuántico aislado, el valor medio de trabajo W coincide con la diferencia entre los valores medios de energía:

$$\langle W \rangle = \text{tr}[\tilde{H} \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H \rho] \equiv \langle \Delta E \rangle \quad , \quad \forall \rho, \mathcal{U}$$

(II) Recuperación de los teoremas de fluctuación: Para estados ρ que no presentan coherencias cuánticas en la base de energía del Hamiltoniano inicial H (es decir: $[\rho, H] = 0$), se tiene que $P(W)$ coincide con la distribución de probabilidad del protocolo TPM:

$$P(W) = \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \delta\left(W - \left(\tilde{E}_m - E_n\right)\right) \quad \text{si} \quad [\rho, H] = 0$$

(III) El trabajo es una medición cuántica generalizada: La distribución $P(W)$ puede escribirse como el resultado de un POVM sobre el sistema ρ :

$$P(W) = \text{tr}[E_\mu \rho] \quad (2.56)$$

donde los operadores $\{E_\mu\}$ definen un POVM, con $1 \leq \mu \leq N$, siendo N la cantidad de valores que puede tomar W .

Los requerimientos dados por (I) y (II) resultan ser los que venimos buscando cumplir desde el Capítulo 1 para nuestra distribución $P(W)$ deseada. El requerimiento (III) resulta del hecho de que físicamente podemos medir el trabajo, solo que no proyectivamente. Por lo tanto, debe ser tratado como una medición generalizada a través de un POVM sobre el sistema ρ .

Algo curioso, referido a la propiedad (III), es que puede reescribirse de otra forma. Notemos que la expresión dada por (2.56) condiciona a que la distribución de probabilidad debe ser lineal en el estado ρ ya que dejamos explícito que los operadores $\{E_\mu\}$ forman un POVM y, por lo tanto, **no** dependen del estado ρ . Esta condición de linealidad es intuitiva para un estado $\rho = \alpha\rho_1 + (1 - \alpha)\rho_2$ (con $\alpha \in [0, 1]$ jugando el rol de una probabilidad), donde el trabajo que puede efectuar ρ estará condicionado por los estados ρ_1 y ρ_2 con sus respectivas probabilidades, con la interpretación de ρ como una mezcla estadística de dos estados distintos. Entonces, otra forma de escribir la condición (III) es:

(III) Linealidad de la distribución de probabilidad: Sean ρ_1 y ρ_2 dos matrices de densidad y sea $\alpha \in [0, 1]$, podemos definir entonces una nueva matriz $\rho = \alpha\rho_1 + (1 - \alpha)\rho_2$ tal que:

$$P[\rho] = \alpha P[\rho_1] + (1 - \alpha)P[\rho_2]$$

donde $P[\cdot]$ indica la probabilidad de tener algún valor de trabajo para el estado involucrado.

Estas condiciones enumeradas son básicas para que obtengamos una distribución de probabilidad razonable y una definición de trabajo correcta en sistemas cuánticos aislados. Sin embargo, veremos que la incompatibilidad de estos resultados no es por una falla en el enfoque utilizado, sino más bien por una limitación fundamental de la mecánica cuántica. Es decir, **no existe una medición de trabajo que satisfaga simultáneamente estas condiciones para todo proceso y estado**. Esto implica una imposibilidad de presentar al trabajo como el resultado de una cantidad fluctuante en la mecánica cuántica y abrirá paso a diferentes definiciones para el mismo en la literatura.

Para demostrar esto, veamos que podemos reescribir la expresión (2.3) de la condición (I) de manera

que:

$$\langle W \rangle = \text{tr}[\tilde{H}\mathcal{U}\rho\mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H\rho] \quad (2.57)$$

$$= \text{tr}[(\mathcal{U}^\dagger\tilde{H}\mathcal{U} - H)\rho] \quad (2.58)$$

$$= \text{tr}[\mathbb{W}\rho] \quad (2.59)$$

donde definimos el operador $\mathbb{W} \equiv \mathcal{U}^\dagger\tilde{H}\mathcal{U} - H$, que lo podemos asociar con el operador de trabajo de la Sección 1.1.1. Además, a partir de la relación (2.56) dada por la condición (III), tenemos que el valor medio del trabajo $\langle W \rangle$ puede escribirse como:

$$\langle W \rangle = \sum_W W P(W) = \sum_\mu W_\mu \text{tr}[E_\mu\rho] \quad (2.60)$$

$$= \text{tr} \left[\sum_\mu W_\mu E_\mu \rho \right] \quad (2.61)$$

Así, comparando las expresiones obtenidas para $\langle W \rangle$ por parte de (2.58) y (2.61) damos cuenta de que:

$$\text{tr}[(\mathcal{U}^\dagger\tilde{H}\mathcal{U} - H)\rho] = \text{tr} \left[\sum_\mu W_\mu E_\mu \rho \right] \quad (2.62)$$

$$\mathcal{U}^\dagger\tilde{H}\mathcal{U} - H = \sum_\mu W_\mu E_\mu \quad (2.63)$$

ya que esta relación debe cumplirse para todo estado ρ inicial y toda evolución \mathcal{U} . En particular, debe cumplirse para aquellos estados que son diagonales en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H ; es decir, donde es válido el protocolo TPM. Entonces, para cumplir la condición (I), requerimos que el POVM sea el dado por el protocolo TPM, que resulta ser el hallado en la expresión (2.4). Entonces, teniendo que $E_\mu \equiv E_{nm} = \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n$ llegamos a que:

$$\mathcal{U}^\dagger\tilde{H}\mathcal{U} - H = \sum_{n,m} w_{nm} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n$$

(2.64)

siendo $w_{nm} \equiv \tilde{E}_m - E_n$. Con este último resultado, se entiende que debe satisfacerse para toda evolución \mathcal{U} , siempre y cuando el estado inicial ρ no presente coherencias cuánticas.

Para refutar esto, veamos un contraejemplo: consideremos un sistema de dos niveles $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ donde el Hamiltoniano inicial y final vienen dados por $H = \varepsilon|1\rangle\langle 1|$ y $\tilde{H} = \tilde{\varepsilon}|1\rangle\langle 1|$, respectivamente. Tomaremos un proceso tal que el operador evolución \mathcal{U} vendrá dado por:

$$\mathcal{U} = |0\rangle\langle +| + |1\rangle\langle -| \quad \text{con} \quad |\pm\rangle = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.65)$$

A partir de esto, puede verse que:

$$\mathcal{U}^\dagger\tilde{H}\mathcal{U} - H = \tilde{\varepsilon}|-\rangle\langle -| - \varepsilon|1\rangle\langle 1| \quad (2.66)$$

$$\sum_{n,m} w_{nm} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n = \frac{\tilde{\varepsilon}}{2} |0\rangle\langle 0| + \frac{(\tilde{\varepsilon} - 2\varepsilon)}{2} |1\rangle\langle 1| \quad (2.67)$$

donde ambas expresiones no coinciden a menos que $\tilde{\varepsilon} = 0$, demostrando que la expresión (2.64) no se cumple para toda evolución \mathcal{U} . Notar que en ningún momento supusimos una expresión particular para ρ , más que fuese diagonal en la base de autoestados de H .

Con este simple contraejemplo, se ve que es imposible encontrar una función de distribución de probabilidad $P(W)$ que satisfaga las condiciones (I), (II) y (III) al mismo tiempo. Asimismo, ilustra la dificultad de definir un esquema universal para medir el trabajo en todo sistema cuántico, sobre todo para aquellos que poseen coherencias. Esto lleva a un cambio de estrategia a la hora de tratar de definir generalizaciones de la distribución de trabajo, llegando incluso a plantear que se debe dejar de lado alguna de las tres condiciones definidas. Sin embargo, la condición (I) resultaría inamovible debido a que es el corazón de nuestra búsqueda, al igual que (II) por incluir los teoremas de fluctuación y lo mismo ocurre con (III) por definir que el trabajo es parte de una medición cuántica generalizada.

Entre las diversas estrategias para encontrar una solución a esto, existen intentos de emplear un POVM que dependa del estado inicial [29], por lo que la distribución de probabilidad ya no es lineal en ρ , rescindiendo de esta manera la condición (III). Otras alternativas corresponden al uso de “mediciones débiles” [31, 35], la teoría Bohmiana [30] o el esquema de “Consistent Histories” [37]. Si bien los aportes realizados por estas teorías resultan interesantes, no llegan a incluir todas las propiedades necesarias que requerimos; estos enfoques no serán tratados en el desarrollo de esta tesis.

Existe una propuesta particular que incluye la introducción de distribuciones de cuasi-probabilidad [31–37]. Esta alternativa tiene como objeto conservar el cumplimiento de la primera ley, los teoremas de fluctuación y el concepto de trabajo como una medición generalizada, pero con el costo de sacrificar la positividad de la distribución $P(W)$. Sin embargo, veremos cómo esta herramienta podría dar una nueva esperanza para tener, por fin, una definición de trabajo en sistemas cuánticos aislados que sea compatible con la realidad física.

Capítulo 3

Distribuciones de cuasi-probabilidad de trabajo

En el desarrollo del capítulo anterior, se ha concluido que el trabajo debe ser fruto de una medición cuántica generalizada por el simple hecho de que es posible medir sus resultados. Este fue el caso del protocolo TPM que, aunque *a priori* sea definido por medio de dos mediciones proyectivas a distinto tiempo, se le puede asociar un POVM correspondiente y llevarse a cabo por medio de un esquema que involucre una medición cuántica generalizada. Con el teorema de Neumark, se pudo implementar un protocolo de única medición proyectiva (protocolo SM), con el agregado de sistemas auxiliares e interacciones determinadas, y así asomar una nueva esperanza para poder dar con una definición satisfactoria de trabajo en sistemas cuánticos aislados [43].

Sin embargo, se demostró que es imposible definir un esquema que tenga una distribución de probabilidad de trabajo tal que: sea lineal con respecto al estado inicial, se reduzca al protocolo TPM para estados que no presentan coherencias en el estado inicial y que el valor medio de trabajo corresponda al valor medio del cambio de energía [26]. Esto llevó a la comunidad a buscar nuevos enfoques para tratar esto [27–30], incluyendo distintas propuestas de distribuciones de cuasi-probabilidad [31–37]. En general, las distribuciones de cuasi-probabilidad tienen sus ventajas, pero se debe incluir una noción “probabilística” que pareciese no ser compatible con nuestra noción cotidiana.

En este capítulo, introduciremos el concepto de cuasi-probabilidades y cómo puede definirse la distribución de cuasi-probabilidad más general de trabajo para sistemas cuánticos aislados [54]. Mostraremos cómo la presencia de coherencias en el estado cuántico inicial se encuentra vinculada a la presencia de negatividades en estas distribuciones y cómo puede reconstruirse la estadística mediante la incorporación de un sistema auxiliar. Luego, se dará una caracterización para ciertas funciones de distribución; en particular, se considerarán las distribuciones de Margenau-Hill (MHQ) [31], Full-Counting (FCQ) [32] y Kirkwood-Dirac (KDQ) [33], destacando sus aspectos más relevantes, especialmente en relación a procesos que involucran la presencia de coherencias cuánticas. Por último, se dará un desarrollo a la función de Wigner [39], la cual es una distribución de cuasi-probabilidad que permite representar estados cuánticos en un espacio de fase similar al de la mecánica clásica.

3.1. Cuasi-probabilidades

En la Sección 2.3 se demostró que no es posible llegar a una distribución de probabilidad general para el trabajo en sistemas cuánticos aislados que cumpla simultáneamente tres condiciones esenciales para una definición adecuada. Estas condiciones son: el cumplimiento de la primera ley de la termodinámica, la reproducción de los resultados del protocolo TPM cuando el estado inicial no presenta coherencias, y la linealidad de la distribución respecto al estado inicial. Debido a esta limitación, se han explorado alternativas que permitan abordar esta problemática, entre las cuales se destaca el uso de distribuciones de cuasi-probabilidad. Esto plantea una pregunta clave: ¿existe una distribución de cuasi-probabilidad para el trabajo que satisfaga las tres condiciones mencionadas? Y, de ser así, ¿es única? Con este objetivo, nos proponemos identificar la clase más general de distribuciones de cuasi-probabilidad que dé una definición de trabajo adecuada y permita medirlo [54]. Para ello, comenzaremos introduciendo una noción formal, general y básica sobre las cuasi-probabilidades, lo que nos permitirá profundizar en su interpretación y en su utilidad para caracterizar el trabajo en sistemas cuánticos.

3.1.1. Definición y propiedades

En el Capítulo 2, se abordó el concepto de mediciones generalizadas, el cual proporciona la descripción más amplia posible de una medición en un sistema cuántico. Esta formulación se basa en la definición de un conjunto de operadores $\{E_\mu\}$, que representan un POVM (donde $1 \leq \mu \leq N$, siendo N el número total de resultados posibles), cuyas propiedades son discutidas en el Apéndice D. Desde una perspectiva experimental, los operadores $\{E_\mu\}$ pueden interpretarse como los diferentes eventos observables, cada uno de los cuales está asociado a una probabilidad p_μ (ver ecuación D.5 del Apéndice D). Esta probabilidad actúa como un análogo de la regla de Born en el caso de las mediciones proyectivas.

Con el fin de no sobrecargar la notación, cuando estemos hablando de la probabilidad p_μ para un operador E_μ particular omitiremos el índice μ . En su lugar, reescribiremos $p_\mu \equiv p(E)$ y $E_\mu \equiv E$, por lo que esta expresión puede ser reescrita como:

$$p(E) \equiv \text{tr}[E\rho] \quad (3.1)$$

donde ρ indica el estado del sistema cuántico. Dada la definición para $p(E)$, y al tratarse la misma de una probabilidad debido a las características de los POVM, se cumple que:

$$p(E) \in [0, 1] \quad (3.2)$$

$$p(\mathbb{I}) = 1 \quad (3.3)$$

$$p(E + F + \dots) = p(E) + p(F) + \dots \quad (3.4)$$

donde \mathbb{I} representa el operador identidad y los operadores E, F, \dots pertenecen al mismo conjunto de operadores de un dado POVM, por lo que se verifica que:

$$p(E) + p(F) + \dots \leq 1 \quad (3.5)$$

En consecuencia, al analizar **un evento individual** E dentro de un POVM, este tendrá asociada una **probabilidad** $p(E)$, previamente definida en la expresión (3.1). Dado que $p(E)$ representa una magnitud probabilística, su valor no puede ser negativo.

Queremos extender este formalismo al caso de **múltiples eventos**. Para ello, comenzaremos analizando dos eventos E, G y posteriormente generalizaremos el resultado a un número arbitrario de eventos. Sin embargo, dado que buscamos ir más allá del marco convencional de las probabilidades, relajaremos la restricción de no-negatividad en la estadística de E, G , permitiendo que pueda tomar cualquier valor real. Así, introducimos el concepto de **cuasi-probabilidad** $q(E, G)$, cuya definición se basará en las siguientes propiedades:

$$q(E, G) \in \mathbb{R} \quad (3.6)$$

$$q(\mathbb{I}, E) \equiv q(E, \mathbb{I}) \equiv p(E) \quad (3.7)$$

$$q(E + F + \dots, G) \equiv q(E, G) + q(F, G) + \dots \quad (3.8)$$

$$q(G, E + F + \dots) \equiv q(G, E) + q(G, F) + \dots \quad (3.9)$$

donde los operadores E, F, \dots pertenecen al mismo conjunto de operadores de un dado POVM. Notar que a través de la relación (3.7) se recupera la noción intuitiva de probabilidad, mientras que las expresiones (3.8) y (3.9) buscan ser análogas a (3.4) pero en ambos argumentos de la función $q(\cdot, \cdot)$.

A partir de estas definiciones, es posible deducir otras propiedades para las cuasi-probabilidades. En el Apéndice E demostramos detalladamente esto y analizamos en profundidad las consecuencias que implican cada una de ellas. En lo que sigue, mencionaremos los aspectos más relevantes que permitirán el desarrollo de este trabajo.

Es posible mostrar mediante las propiedades (3.8) y (3.9) que la función $q(\cdot, \cdot)$ es lineal en la primera y en la segunda entrada. Esto conlleva a que la función $q(\cdot, \cdot)$ es **bilineal** en sus argumentos. Además, dado que $q(\cdot, \cdot)$ debe cumplir la relación (3.7) para recuperar la probabilidad convencional, resulta estar definida a partir de la traza como un análogo al teorema de Gleason [56], pero en el contexto de cuasi-probabilidades. Esto lleva a que la función $q(\cdot, \cdot)$ resulte ser:

$$q(E, G) \equiv \Re(\text{tr}[EG\rho]) \quad (3.10)$$

donde $\Re(\cdot)$ indica la parte real del argumento.

A la hora de querer generalizar la función de cuasi-probabilidad $q(\cdot, \cdot, \dots)$ para un número arbitrario de eventos, esta puede ser definida en base a propiedades análogas a las mencionadas en (3.6), (3.7), (3.8) y (3.9):

$$q(E, G, \dots) \in \mathbb{R} \quad (3.11)$$

$$q(\mathbb{I}, E, G, \dots) \equiv q(E, \mathbb{I}, G, \dots) \equiv \dots \equiv q(E, G, \dots) \quad (3.12)$$

$$q(E + F + \dots, G, \dots) \equiv q(E, G, \dots) + q(F, G, \dots) + \dots \quad (3.13)$$

$$q(G, E + F + \dots, \dots) \equiv q(G, E, \dots) + q(G, F, \dots) + \dots \quad (3.14)$$

donde los operadores E, F, \dots pertenecen al mismo conjunto de operadores de un dado POVM. A partir de aquí, también puede deducirse que la función $q(\cdot, \cdot, \dots)$ es lineal en cada una de sus entradas, implicando que $q(\cdot, \cdot, \dots)$ es **multilineal** en sus argumentos. Para la expresión general de esta cuasi-probabilidad $q(\cdot, \cdot, \dots)$, extrapolaremos la relación para dos eventos [55]. Siguiéndonos de (3.10), resulta que:

$$q(E, G, \dots) \equiv \Re(\text{tr}[EG \dots \rho]) \quad (3.15)$$

Podemos notar que si a una función de cuasi-probabilidad de N eventos se incluye al operador \mathbb{I} en uno de sus argumentos, entonces resulta ser una función de cuasi-probabilidad de $(N - 1)$ eventos:

$$q(\underbrace{E, \mathbb{I}, G, H \dots}_{N \text{ eventos}}) \equiv \Re(\text{tr}[E \mathbb{I} G H \dots \rho]) = \Re(\text{tr}[E G H \dots \rho]) \equiv q(\underbrace{E, G, H, \dots}_{(N-1) \text{ eventos}}) \quad (3.16)$$

que es una propiedad análoga a la definida en (3.7), pero ahora para un número arbitrario de eventos, tal como indicamos en (3.12). Para el caso donde $N = 2$, recuperamos la noción intuitiva de probabilidad.

Es importante aclarar que la expresión (3.15) **depende del orden de los eventos**. No existe una simetría directa entre las entradas de la función $q(\cdot, \cdot, \dots)$, conllevando a que la función de cuasi-probabilidad dependa de los eventos conjuntos. Como ejemplo, podemos particularizar al caso donde tenemos tres eventos. Aquí, se tiene que:

$$q(E, G, H) \neq q(G, E, H) \quad (3.17)$$

donde la función $q(E, G, H)$ puede ser descompuesta en dos grupos conjuntos de eventos $E \wedge G$ y $G \wedge H$, mientras que la función $q(G, E, H)$ puede ser descompuesta en $G \wedge E$ y $E \wedge H$. Se puede apreciar que ambas funciones tienen una distinta descomposición de eventos conjuntos, implicando que ambas describen una estadística distinta. Para el caso donde se tratan dos eventos, ambas entradas resultan ser simétricas; esto puede verse a partir de cómo resulta su expresión en (3.10), o sino percatándose de que coinciden en su descomposición de eventos conjuntos.

Por otra parte, se puede derivar una condición suficiente (la cual no es necesaria) para que la función de cuasi-probabilidad de un número arbitrario de eventos $q(\cdot, \cdot, \dots)$ definida en (3.15) sea no-negativa; es decir, para que pueda ser considerada como una probabilidad [54]. Esta condición sugiere que se den relaciones de commutación nulas suficientes entre el estado ρ y los eventos $E, G \dots$ involucrados (representados como proyectores) para que el argumento de la traza pueda ser reducido al producto de únicamente dos operadores (ya sean dos proyectores o un proyector con el estado ρ). Sin embargo, no hay un número exacto de relaciones $[\cdot, \cdot] = 0$ distintas, entre los eventos y ρ , para que una función de cuasi-probabilidad pueda ser tratada como una función de probabilidad. No obstante, existe un número **mínimo** de relaciones de commutación diferentes para que esto pueda llegar a pasar. Un caso particular de ello ocurre cuando estas relaciones son entre **operadores contiguos**: si la distribución de cuasi-probabilidad es la correspondiente a N eventos, entonces es necesario $(N - 1)$ relaciones de commutación $[\cdot, \cdot] = 0$ entre operadores contiguos para que se trate de una función de probabilidad [54].

Otro caso particular que es interesante analizar es donde el estado ρ presenta coherencias en la base de autoestados de todos los eventos. Es decir, $[\rho, \Pi_X] \neq 0$ siendo $X = A, B, C, \dots$ los N eventos involucrados en la distribución de cuasi-probabilidad $q(A, B, C, \dots)$. Gracias a los resultados obtenidos en el Apéndice E, se sabe que necesitamos como condición suficiente $(N - 1)$ de relaciones de commutación $[\cdot, \cdot] = 0$ entre eventos contiguos para probar que se trata de una distribución de probabilidad. Es decir:

$$[\Pi_A, \Pi_B] = 0 \quad , \quad [\Pi_B, \Pi_C] = 0 \quad , \quad \dots \quad (3.18)$$

lo que es equivalente a que todos los eventos deben commutar entre sí. Luego, si solo disponemos de $(N - 2)$ relaciones de commutación distintas $[\cdot, \cdot] = 0$ entre eventos contiguos y observamos negatividades en la distribución $q(A, B, C \dots)$, entonces **dichas negatividades son consecuencia directa de los**

términos de coherencia presentes en el estado ρ respecto a las bases que diagonalizan a, al menos, dos de los eventos involucrados. Esto demanda que exista una relación intrínseca entre la aparición de valores negativos en las distribuciones de cuasi-probabilidad y las coherencias presentes en el estado cuántico ρ .

3.1.2. Distribución “q-class” de trabajo

Habiendo dado una descripción formal para la función de cuasi-probabilidad $q(\cdot, \cdot, \dots)$ de un dado número de eventos, y analizado sus propiedades y características (ver Apéndice E para más información), procederemos a investigar cómo debe ser la distribución de trabajo general que obtenga los resultados adecuados a la realidad física. Para ello, consideremos un sistema cuántico gobernado por la dinámica de un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(\lambda(t))$. El Hamiltoniano depende del tiempo a través de un *protocolo* $\lambda \equiv \lambda(t)$ que realiza trabajo sobre el sistema y que suponemos que podemos controlar externamente. Inicialmente, a $t = 0$, el sistema se encuentra en un estado descrito por ρ . Luego, se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. Más allá de la dependencia de λ , diremos que el sistema está aislado, por lo que evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (con t_0 un tiempo fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (3.19)$$

Además, con el propósito de simplificar la notación, llamaremos $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(t))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$. Vamos a asociarles espectros de energías $\{E_n\}$ y $\{\tilde{E}_m\}$ a estos Hamiltonianos H, \tilde{H} , de manera que podemos escribirlos como:

$$H = \sum_n E_n \Pi_n \quad , \quad \tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m \quad (3.20)$$

siendo Π_n y $\tilde{\Pi}_m$ los proyectores de H y \tilde{H} , respectivamente.

Para iniciar la construcción de la distribución general de trabajo, basada en el formalismo de cuasi-probabilidades, recordemos que el protocolo TPM reproduce correctamente la estadística de trabajo cuando el estado ρ es diagonal en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H ; esto es equivalente a decir que $\rho = \bar{\rho}$, donde $\bar{\rho} \equiv \sum_n \Pi_n \rho \Pi_n$ se lo conoce como estado inicial *dephased* (el cual elimina de ρ todos los términos de coherencias entre subespacios de distinta energía). Entonces, particularizar a la distribución de probabilidad del protocolo TPM en el caso donde $\rho = \bar{\rho}$ debe reproducir los resultados correctos si tenemos que $[\rho, H] = 0$. A partir de la expresión deducida en (1.28), se tiene que:

$$P_{\text{TPM}}(W | \rho = \bar{\rho}) = \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \bar{\rho} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (3.21)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \bar{\rho}] \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (3.22)$$

donde denotamos $\tilde{\Pi}_m^{(H)} \equiv \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U}$ al proyector del Hamiltoniano final \tilde{H} en representación de Heisenberg. Podemos ver que el factor $\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \bar{\rho}]$ es similar a la función de cuasi-probabilidad de dos eventos $q(\cdot, \cdot)$ definida en (3.10), con la diferencia de que no es necesario agregar el operador $\mathfrak{R}(\cdot)$ ya que $\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \bar{\rho}] \geq 0$ (por tratarse de una probabilidad). Por lo cual, no parece errado plantear que

la distribución de cuasi-probabilidad de trabajo deba tener una expresión similar. Preguntas válidas serían: ¿cuántos eventos deben estar involucrados? ¿Quiénes serían dichos eventos? Podríamos asumir un número arbitrario de eventos, donde los mismos estén determinados por los proyectores Π_n y $\tilde{\Pi}_m^{(H)}$. Así, planteamos que la distribución $P(W)$ de trabajo general puede escribirse como:

$$P(W) = \sum_{n,\dots,l,m,\dots} q(\Pi_n, \dots, \Pi_l, \tilde{\Pi}_m^{(H)}, \dots) \delta\left(W - w\left(E_n, \dots, E_l, \tilde{E}_m, \dots\right)\right) \quad (3.23)$$

donde $w\left(E_n, \dots, E_l, \tilde{E}_m, \dots\right)$ es una función que depende de los espectros de energía de los Hamiltonianos inicial y final, y sus eventos involucrados. Cabe aclarar que el orden de los eventos que aparecen en la función de cuasi-probabilidad $q(\cdot, \cdot, \dots)$ no refleja exactamente el orden en el que deben ir, sino que sólo es una forma esquemática de representar quiénes forman parte de dicha función.

Sin embargo, sabemos que a partir de la expresión (3.23) se debe obtener la relación (3.22), ofrecida por el protocolo TPM, cuando el estado ρ no presenta coherencias en la base de autoestados de H . Esto puede conseguirse, por ejemplo, a partir de una distribución que tenga la forma:

$$\boxed{P_{\text{MH}}(W) \equiv \sum_{n,m} \Re\left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho]\right) \delta\left(W - (\tilde{E}_m - E_n)\right)} \quad (3.24)$$

la cual se conoce como la distribución de cuasi-probabilidad de Margenau-Hill, o simplemente **distribución MHQ** (del inglés: “Margenau-Hill Quasiprobability”). Es inmediato notar que si particularizamos al caso donde $\rho = \bar{\rho}$ para la distribución MHQ entonces se recupera la expresión (3.22). Esto es debido a que $\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \bar{\rho}] \geq 0$ lo cual lleva a que $\Re\left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \bar{\rho}]\right) = \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \bar{\rho}]$, demostrando así lo deseado.

Existe otra distribución de cuasi-probabilidad de trabajo que también recupera la condición (3.22), la cual resulta ser más general que la distribución MHQ. Esta distribución recibe el nombre de distribución de cuasi-probabilidad de clase- q , o simplemente **distribución “ q -class”**, y se define como:

$$P_q(W) \equiv \sum_{l,n,m} \Re\left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho]\right) \delta\left(W - (\tilde{E}_m - qE_l - (1-q)E_n + f_{lnm})\right) \quad (3.25)$$

donde f_{lnm} son ciertos coeficientes que cumplen $f_{nnm} = 0$ y $q \in [0, 1]$. Vemos que si tomamos $\rho = \bar{\rho}$, y teniendo que $[\bar{\rho}, \Pi_l] = 0$, entonces:

$$P_q(W | \rho = \bar{\rho}) = \sum_{l,n,m} \Re\left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \bar{\rho}]\right) \delta\left(W - (\tilde{E}_m - qE_l - (1-q)E_n + f_{lnm})\right) \quad (3.26)$$

$$= \sum_{l,n,m} \Re\left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \underbrace{\Pi_n \Pi_l}_{=\Pi_n \delta_{nl}} \bar{\rho}]\right) \delta\left(W - (\tilde{E}_m - qE_l - (1-q)E_n + f_{lnm})\right) \quad (3.27)$$

$$= \sum_{n,m} \Re\left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \bar{\rho}]\right) \delta\left(W - \left(\tilde{E}_m - qE_n - (1-q)E_n + \underbrace{f_{nnm}}_{=0}\right)\right) \quad (3.28)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \bar{\rho}] \delta\left(W - (\tilde{E}_m - E_n)\right) \quad \checkmark \quad (3.29)$$

recuperando así la estadística correcta para estados ρ diagonales en la base de autoestados de H . Notemos que q tiene el propósito de ser un *peso* entre los proyectores Π_l, Π_n que vienen del Hamiltoniano

H . Además, se ve que la distribución definida en (3.25) presenta una simetría frente al cambio $q \longleftrightarrow (1 - q)$, por lo que podemos acotar sus valores efectivos a $q \in [0, 1/2]$.

Es importante aclarar que si se hubiese querido formar otra distribución de cuasi-probabilidad de la forma que se propuso en (3.23), y recuperar la estadística del protocolo TPM para estados inicialmente incoherentes en la base de autoestados de H , entonces esta distribución puede ser reescrita de manera que recuperemos la distribución MHQ o la distribución “ q -class” (para un dado $q \in [0, 1/2]$) [54]. Es decir, no existe otra variante de distribución de cuasi-probabilidad de trabajo que no sean las dadas por las expresiones (3.24) y (3.25). Además, vemos que ambas resultan ser lineales en el estado ρ , satisfaciéndose así otra de nuestras condiciones básicas para definir el trabajo en sistemas cuánticos.

La última condición que requerimos verificar es la reproducción de los resultados que ofrece la primera ley de la termodinámica. Recordemos que el valor medio de trabajo $\langle W \rangle$ para sistemas cuánticos aislados debe satisfacer la expresión:

$$\langle W \rangle = \text{tr}[(\tilde{H}^{(H)} - H)\rho] \equiv \langle \Delta E \rangle \quad (3.30)$$

donde definimos $\tilde{H}^{(H)} \equiv \mathcal{U}^\dagger \tilde{H} \mathcal{U}$ al Hamiltoniano final \tilde{H} en representación de Heisenberg y $\langle \Delta E \rangle$ a la variación media de energía. Por lo tanto, queremos ver si las distribuciones definidas en (3.24) y (3.25) recuperan la condición dada en (3.30). Primero, analizaremos el caso de la distribución “ q -class”, donde el valor medio de trabajo está definido por:

$$\langle W \rangle_q \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dW W P_q(W) \quad (3.31)$$

Así, obtenemos que:

$$\langle W \rangle_q = \int_{-\infty}^{+\infty} dW W \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \delta \left(W - \left(\tilde{E}_m - qE_l - (1 - q)E_n + f_{lnm} \right) \right) \quad (3.32)$$

$$= \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \left(\tilde{E}_m - qE_l - (1 - q)E_n + f_{lnm} \right) \quad (3.33)$$

$$= \text{tr}[\tilde{H}^{(H)} \rho] - q \text{tr}[\tilde{H} \rho] - (1 - q) \text{tr}[H \rho] + \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) f_{lnm} \quad (3.34)$$

$$= \underbrace{\text{tr}[(\tilde{H}^{(H)} - H)\rho]}_{=\langle \Delta E \rangle} + \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) f_{lnm} \quad (3.35)$$

$$= \langle \Delta E \rangle + \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) f_{lnm} \quad (3.36)$$

con $\tilde{H}^{(H)} = \sum_m \tilde{E}_m \Pi_m^{(H)}$. Por lo cual, resulta que la distribución $P_q(W)$ satisface los requisitos de dar con una definición correcta de trabajo si:

$$\sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) f_{lnm} = 0 \quad \text{con} \quad f_{nnm} = 0 \quad (3.37)$$

Luego, como esto debe cumplirse para todo estado ρ y eventos $\Pi_l, \tilde{\Pi}_m^{(H)}, \Pi_n$, podemos decir que los coeficientes deben ser $f_{lnm} \equiv 0$ [54]. Así, tenemos que la distribución “ q -class” de la expresión (3.25)

resulta ser en definitiva:

$$P_q(W) \equiv \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \delta \left(W - \left(\tilde{E}_m - q E_l - (1-q) E_n \right) \right) \quad (3.38)$$

Vemos que, además, como los coeficientes f_{lnm} son nulos, esto permite que la distribución $P_q(W)$ sea lineal en el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$. Esto quiere decir que frente a una transformación $\mathcal{H}(t) \rightarrow \alpha \mathcal{H}(t)$ se tiene que $\langle W \rangle_q \rightarrow \alpha \langle W \rangle_q$ con $\alpha \in \mathbb{R}$, lo cual representa una característica intuitiva que debe cumplir el trabajo.

Podemos observar que la expresión (3.38) sigue dependiendo del valor de q , ya que no encontramos ninguna restricción para él en las propiedades que requeríamos que satisficiera la distribución $P_q(W)$. Esto da una infinita cantidad de distribuciones de cuasi-probabilidad de trabajo que dependen del parámetro $q \in [0, 1/2]$. Notar que para $q = 0$ se obtiene la distribución MHQ dada por (3.24), implicando que la distribución MHQ es un caso particular de la distribución “ q -class” y que también cumple con los requerimientos para una definición correcta de trabajo en sistemas cuánticos aislados. Claro está que la condición que sacrificamos para ello es que ahora permitimos que puedan presentarse “probabilidades negativas”.

Definiremos la distribución que resulta de tomar el valor $q = 1/2$, que corresponde al otro extremo del intervalo para el parámetro q . En este caso particular, se obtiene la llamada distribución de cuasi-probabilidad de conteo completo, o también denominada **distribución FCQ** (del inglés: “Full-Counting Quasiprobability”):

$$P_{\text{FC}}(W) \equiv \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \delta \left(W - \left(\tilde{E}_m - \frac{E_l + E_n}{2} \right) \right) \quad (3.39)$$

Esta distribución pondera en igual magnitud a los eventos Π_n, Π_l relacionados al Hamiltoniano inicial H . Al ser un caso particular de la distribución “ q -class”, queda claro que también cumple con los requisitos deseados para una correcta definición de trabajo.

Como conclusión de lo desarrollado hasta el momento, debe quedar claro que la distribución “ q -class” resulta ser la más general posible, basada en el formalismo de cuasi-probabilidades, que cumple: linealidad en el estado inicial ρ , reproducción de los resultados del protocolo TPM cuando el estado no presenta coherencias al inicio (y, por lo tanto, recupera los teoremas de fluctuación clásicos) y cumplimiento de la primera ley de la termodinámica. Además, las distribuciones MHQ y FCQ resultan ser casos particulares de la distribución “ q -class” (casos extremos) para valores de $q = 0$ y $q = 1/2$, respectivamente.

El hecho de que la distribución “ q -class” sea buena independientemente del parámetro q puede indicar que debamos exigir un poco más a nuestra definición de trabajo para poder encontrar aquel valor de q que mejor se adecúe a lo que buscamos. Por ejemplo, podemos buscar que la variable W no sólo satisfaga la primera ley, sino que también:

$$\langle W^2 \rangle \equiv \text{tr}[(\tilde{H}^{(H)} - H)^2 \rho] \equiv \langle (\Delta E)^2 \rangle \quad (3.40)$$

que implica la coincidencia en el segundo momento para el trabajo y la diferencia de energía en todo

proceso con estado inicial ρ , relacionando así sus fluctuaciones. Con esto, vemos que:

$$\langle W^2 \rangle_q \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dW W^2 P_q(W) \quad (3.41)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dW W^2 \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \delta \left(W - \left(\tilde{E}_m - qE_l - (1-q)E_n \right) \right) \quad (3.42)$$

$$= \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \left(\tilde{E}_m - qE_l - (1-q)E_n \right)^2 \quad (3.43)$$

$$= \text{tr}[\tilde{H}^{2(H)} \rho] + \text{tr}[H^2 \rho] - 2 \Re \left(\text{tr}[\tilde{H}^{(H)} H \rho] \right) \quad (3.44)$$

$$= \text{tr}[(\tilde{H}^{(H)} - H)^2 \rho] = \langle (\Delta E)^2 \rangle \quad \checkmark \quad (3.45)$$

Es decir: el segundo momento en el trabajo W coincide con el segundo momento de la diferencia de energía para todo $q \in [0, 1/2]$. Esto significa que nuestra distribución definida en (3.38) no parecería tener una diferencia apreciable, hasta el momento, en los resultados físicos que se obtendrían a distintos valores de q .

A pesar de esto, sí podemos afirmar una diferencia significativa para las distribuciones $P_q(W)$, y está relacionado al argumento que se presenta en la función delta de Dirac. Se ve que la única distribución que logra tener a los valores de trabajo definidos como la diferencia de energías al final y al inicio del proceso es la distribución MHQ ($q = 0$); para el resto de valores de q , la definición de trabajo cambia e interviene una combinación entre los distintos autovalores de energía del Hamiltoniano inicial H , que da lugar a valores de trabajo que no corresponden con la definición intuitiva basada en el protocolo TPM. Sin embargo, como ya vimos, esto no repercute en el cumplimiento de la primera ley ni en la recuperación de los resultados del protocolo TPM para estados sin coherencias al inicio.

En la Apéndice E, se analiza un caso particular en el que las negatividades de la función de cuasi-probabilidad $q(\cdot, \cdot, \dots)$ de un dado número de eventos están relacionadas con las coherencias del estado inicial ρ en las bases de autoestados de los eventos involucrados. A partir de este análisis, se concluye que la aparición de negatividades se debe a la no commutatividad de ρ en, al menos, dos de dichas bases. Por lo cual, estas mismas negatividades saldrán a la luz en la distribución de cuasi-probabilidad $P_q(W)$ por los mismos motivos. Para el caso $q \neq 0$, intervienen tres eventos: $\Pi_l, \tilde{\Pi}_m^{(H)}, \Pi_n$, lo que evidencia la presencia de coherencias en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . En cambio, cuando $q = 0$, solo participan dos eventos: $\tilde{\Pi}_m^{(H)}, \Pi_n$. Esto indica que, incluso en este caso, la aparición de negatividades sigue estando asociada a la presencia de coherencias en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H .

Como última propiedad a analizar, nos resulta de suma relevancia el estudio de la función característica $\zeta_q(u)$ para nuestra distribución “ q -class” dada por (3.38), con $q \in [0, 1/2]$. La función característica permite la reconstrucción de la distribución de cuasi-probabilidad ya que en ella se tiene la información de cada uno de los momentos de la distribución. Esta función puede definirse como:

$$\zeta_q(u) \equiv \langle e^{iuW} \rangle_q = \int_{-\infty}^{+\infty} dW P_q(W) e^{iuW} \quad (3.46)$$

donde se ve que:

$$\zeta_q(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} dW \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) e^{iuW} \delta \left(W - \left(\tilde{E}_m - qE_l - (1-q)E_n \right) \right) \quad (3.47)$$

$$= \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) e^{iu(\tilde{E}_m - qE_l - (1-q)E_n)} \quad (3.48)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\text{tr} \left[e^{iu\tilde{H}^{(H)}} e^{-iuqH} \rho e^{-iu(1-q)H} \right] + \text{tr} \left[e^{iu\tilde{H}^{(H)}} e^{-iu(1-q)H} \rho e^{-iuqH} \right] \right) \quad (3.49)$$

Por lo que la función $\zeta_q(u)$ depende del parámetro q elegido. Esta expresión será relevante para el estudio en la extensión de los teoremas de fluctuación que se presenten en sistemas cuánticos. Es decir, encontramos una diferencia fundamental: los teoremas de fluctuación para sistemas cuánticos dependen del valor de q que elijamos para la distribución “ q -class”. Se pueden obtener los distintos k -momentos en la variable W con la relación:

$$\langle W^k \rangle_q \equiv \frac{1}{i^k} \frac{\partial^k \zeta_q}{\partial u^k} \Big|_{u=0} \quad (3.50)$$

A manera de poder dimensionar el camino recorrido hasta este punto, presentamos en la Tabla 3.1 un esquema comparativo de los enfoques más relevantes analizados para definir el trabajo en sistemas cuánticos [26]. En particular, se contrastan el formalismo del operador de trabajo (Sección 1.1.1), el protocolo TPM (Sección 1.1.2) y el enfoque basado en cuasi-probabilidades (desarrollado en este capítulo). Se observa que las distribuciones de cuasi-probabilidad cumplen tanto la primera ley de la termodinámica como los teoremas de fluctuación clásicos, aunque a costa de no poder ser medibles directamente (en el sentido clásico, debido a su negatividad).

	Medible	Teoremas de fluctuación	Primera ley
Operador de trabajo	✓	✗	✓
Protocolo TPM	✓	✓	✗
Cuasi-probabilidades	✗	✓	✓

Tabla 3.1: Comparación de las diferentes definiciones analizadas hasta el momento para el trabajo en sistemas cuánticos aislados: el carácter ✓ indica que esa propiedad se cumple, mientras que ✗ implica lo contrario.

El hecho de que estas magnitudes no sean medibles directamente no significa que la información no pueda ser extraída. Una posible estrategia consiste en acoplar un sistema auxiliar (*ancilla*) que facilite la recuperación de información del sistema original. Posteriormente, mediante una medición proyectiva sobre el sistema auxiliar, es posible obtener una estadística del trabajo, en un procedimiento similar al abordado en el Capítulo 2 [32, 54, 57]. Este enfoque corresponde a una medición indirecta. En el Apéndice F se explora cómo implementar un protocolo para reconstruir la distribución de cuasi-probabilidad de trabajo “ q -class”, permitiendo así la obtención de la información deseada.

A continuación, analizaremos distintas distribuciones de cuasi-probabilidad, las cuales resultan ser las más relevantes en la comunidad científica. Entre ellas, ahondaremos más profundo en los casos de las distribuciones MHQ y FCQ.

3.2. Distribución MHQ de trabajo

La distribución MHQ [63–69] es un caso particular dentro de la familia de distribuciones “ q -class”, correspondiente al valor $q = 0$. En este caso, su expresión se reduce a la forma original dada en (3.24). Esta distribución conserva las mismas propiedades generales de la familia “ q -class”, tales como: satisfacer la primera ley de la termodinámica, reproducir los resultados del protocolo TPM cuando el estado inicial ρ es diagonal en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial y presentar linealidad respecto al estado ρ . Sin embargo, el precio a pagar es trabajar con distribuciones de cuasi-probabilidad. Además, como se observó en (3.45), el segundo momento en la variable de trabajo W coincide con el segundo momento de la variación de energía experimentada por el estado ρ .

Lo que hace especialmente interesante a esta distribución es su distinguibilidad dentro del espectro de las distribuciones “ q -class” por la forma de su argumento en la función delta de Dirac. De todas las distribuciones posibles en la familia, la distribución MHQ es la única que conserva la noción intuitiva de trabajo como la diferencia entre las energías final e inicial del sistema. En contraste, las demás presentan expresiones que involucran combinaciones lineales de los autovalores del Hamiltoniano inicial H , lo que implica un alejamiento del concepto original basado en el protocolo TPM.

En lo que sigue, procederemos a mencionar algunas propiedades generales para la distribución MHQ [31]. Para esto, consideraremos un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ que evoluciona en el tiempo $t \in [0, T]$ donde llamaremos $\mathcal{H}(0) \equiv H$ y $\mathcal{H}(T) \equiv \tilde{H}$. Podemos escribir a H y \tilde{H} en su descomposición espectral de energías $\{E_n\}$ y $\{\tilde{E}_m\}$:

$$H = \sum_n E_n \Pi_n \quad , \quad \tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m \quad (3.51)$$

siendo Π_n y $\tilde{\Pi}_m$ los proyectores de H y \tilde{H} , respectivamente. Además, dado $\mathcal{H}(t)$, tendremos un operador evolución $\mathcal{U}(t, t_0)$ que cumple con la ecuación diferencial:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (3.52)$$

donde t_0 es un tiempo de referencia fijo. Definiremos $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$.

En primer lugar, podemos considerar a la distribución MHQ como una distribución de cuasi-probabilidad conjunta en las energías del Hamiltoniano final \tilde{H} e inicial H . Esto puede visualizarse a partir de la expresión (3.24), la cual podemos reescribir como:

$$P_{\text{MH}}(W) \equiv \sum_{n,m} q_{nm}^{\text{MH}} \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (3.53)$$

donde $q_{nm}^{\text{MH}} \equiv \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right)$. Si sumamos únicamente sobre uno de los índices al factor q_{nm}^{MH} , llegamos a que:

$$\sum_n q_{nm}^{\text{MH}} = \sum_n \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) = \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \right) = \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \quad \checkmark \quad (3.54)$$

$$\sum_m q_{nm}^{\text{MH}} = \sum_m \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) = \Re \left(\text{tr}[\Pi_n \rho] \right) = \text{tr}[\Pi_n \rho] \quad \checkmark \quad (3.55)$$

que representan las *probabilidades marginales* de medir cierto valor de energía en los Hamiltonianos final \tilde{H} e inicial H , respectivamente. Luego, puede verse que $\sum_{n,m} q_{nm}^{\text{MH}} = 1$.

Sorprendentemente, puede obtenerse una cota en los valores que puede adoptar la cuasi-probabilidad

conjunta q_{nm}^{MH} . Para ello, utilizaremos la **desigualdad de Cauchy-Schwarz** que establece que para un espacio vectorial complejo \mathbb{V} con producto escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle$, si tomamos dos vectores $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{V}$ entonces se cumple:

$$|\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle|^2 \leq \langle \vec{u}, \vec{u} \rangle \cdot \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle \quad (3.56)$$

Esto podemos emplearlo para relacionar la magnitud $(q_{nm}^{\text{MH}})^2$ con un producto de trazas:

$$(q_{nm}^{\text{MH}})^2 = \left[\Re \left(\text{tr}[\rho \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n] \right) \right]^2 \leq \left[\Re \left(\text{tr}[\rho \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n] \right) \right]^2 + \left[\Im \left(\text{tr}[\rho \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n] \right) \right]^2 \quad (3.57)$$

$$= \left| \text{tr}[\rho \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n] \right|^2 = \left| \text{tr} \left[\sqrt{\rho} \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \sqrt{\rho} \right] \right|^2 \quad (3.58)$$

$$\leq \text{tr} \left[\sqrt{\rho} \tilde{\Pi}_m^{(H)} \tilde{\Pi}_m^{(H)} \sqrt{\rho} \right] \text{tr} \left[\sqrt{\rho} \Pi_n \Pi_n \sqrt{\rho} \right] \quad (3.59)$$

$$= \underbrace{\text{tr}[\rho \tilde{\Pi}_m^{(H)}]}_{\leq 1} \underbrace{\text{tr}[\rho \Pi_n]}_{\leq 1} \leq 1 \quad (3.60)$$

donde denotamos $\Im(\cdot)$ a la parte imaginaria del argumento y expresamos $\sqrt{\rho}$ al operador tal que $(\sqrt{\rho})^2 \equiv \rho$. Vemos que en el último paso tenemos el producto de dos factores que, por separado, resultan en la regla de Born. Por lo tanto, ambos pueden ser acotados debido a que representan una probabilidad. Esto muestra que q_{nm}^{MH} está incluido en el intervalo $[-1, 1]$, ya que también se le permiten valores negativos por ser una cuasi-probabilidad.

La restricción de valores obtenida para q_{nm}^{MH} puede mejorarse para el caso de las negatividades; esto quiere decir que existe una cota que es más estricta. Para probar esto, definiremos un operador \mathbb{P} tal que:

$$\mathbb{P} \equiv \left(\tilde{\Pi}_m^{(H)} + \Pi_n - \frac{\mathbb{I}}{2} \right) \quad (3.61)$$

donde \mathbb{I} es el operador identidad. Como principal característica, podemos notar que este operador \mathbb{P} es hermítico: $\mathbb{P} = \mathbb{P}^\dagger$. Por lo cual, si calculamos:

$$\text{tr}[\mathbb{P}^2 \rho] = \sum_i c_i \langle \psi_i | \mathbb{P}^\dagger \mathbb{P} | \psi_i \rangle = \sum_i c_i |\mathbb{P} | \psi_i \rangle|^2 \geq 0 \quad (3.62)$$

donde expresamos al estado $\rho = c_i \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ como un ensamble de estados $|\psi_i\rangle$ con ciertos pesos $c_i \geq 0$ tales que $\sum_i c_i = 1$. Pero, por otro lado, el operador \mathbb{P} puede relacionarse con la cuasi-probabilidad q_{nm}^{MH} , de manera que:

$$\text{tr}[\mathbb{P}^2 \rho] = \text{tr} \left[\left(\tilde{\Pi}_m^{(H)} + \Pi_n - \frac{\mathbb{I}}{2} \right)^2 \rho \right] \quad (3.63)$$

$$= \text{tr} \left[\left(\tilde{\Pi}_m^{2(H)} + \Pi_n^2 - \frac{\mathbb{I}}{4} + \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n + \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n - \tilde{\Pi}_m^{(H)} - \Pi_n \right) \rho \right] \quad (3.64)$$

$$= \text{tr} \left[\left(\tilde{\Pi}_m^{(H)} + \Pi_n - \frac{\mathbb{I}}{4} + \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n + \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n - \tilde{\Pi}_m^{(H)} - \Pi_n \right) \rho \right] \quad (3.65)$$

$$= \underbrace{\text{tr} \left[\left(\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n + \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \right) \rho \right]}_{=2q_{nm}^{\text{MH}}} + \frac{1}{4} = 2q_{nm}^{\text{MH}} + \frac{1}{4} \quad (3.66)$$

donde fueron utilizadas las propiedades de los proyectores $\tilde{\Pi}_m^{2(H)} = \tilde{\Pi}_m^{(H)}$ y $\Pi_n^2 = \Pi_n$. Si relacionamos

las expresiones (3.62) y (3.66), llegamos a:

$$2q_{nm}^{\text{MH}} + \frac{1}{4} \geq 0 \quad \Rightarrow \quad q_{nm}^{\text{MH}} \geq -1/8 \quad (3.67)$$

por lo que obtenemos una cota más estricta a la anterior respecto a las negatividades. Así, restringimos el rango de valores a $q_{nm}^{\text{MH}} \in [-1/8, 1]$.

Es importante aclarar que la conmutación entre cualquier par de operadores $\Pi_n, \tilde{\Pi}_m^{(H)}, \rho$ deviene en que la distribución MHQ puede ser tratada como una distribución de probabilidad convencional. Este aspecto es analizado en detalle en el Apéndice E, donde se presenta un ejemplo con dos eventos, el cual resulta análogo al caso de la distribución MHQ.

Se puede mostrar que en el caso donde el estado ρ no commuta con el Hamiltoniano inicial H entonces siempre existe un proyector $\tilde{\Pi}_m^{(H)}$, de un Hamiltoniano final \tilde{H} específico, tal que la distribución MHQ presenta negatividades. Esto puede probarse reescribiendo a la distribución MHQ, a partir de la expresión (3.24), como:

$$P_{\text{MH}}(W) \equiv \sum_{n,m} \frac{1}{2} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho + \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho \Pi_n \right] \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (3.68)$$

$$= \sum_{n,m} \frac{1}{2} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \{ \rho \Pi_n \} \right] \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (3.69)$$

donde $\{ \cdot, \cdot \}$ define el anticonmutador entre los operadores. Luego, definiendo el operador:

$$\mathbb{G} \equiv \{ \rho \Pi_n \} = \rho \Pi_n + \Pi_n \rho \quad (3.70)$$

queremos probar que \mathbb{G} admite autovalores negativos si tenemos la condición $[\rho, \Pi_n] \neq 0$. Esto puede demostrarse si encontramos un estado $|\phi\rangle$ tal que $\langle \phi | \mathbb{G} | \phi \rangle \leq 0$. Este estado $|\phi\rangle$ podemos definirlo como:

$$|\phi\rangle \equiv \Pi_n |\phi_1\rangle + \gamma \Pi_n^\perp |\phi_2\rangle \quad (3.71)$$

donde $\gamma \in \mathbb{R}$ y $\Pi_n^\perp \equiv \mathbb{I} - \Pi_n$. Así, podemos notar que:

$$\langle \phi | \mathbb{G} | \phi \rangle = \left(\langle \phi_1 | \Pi_n + \gamma \langle \phi_2 | \Pi_n^\perp \right) (\rho \Pi_n + \Pi_n \rho) \left(\Pi_n | \phi_1 \rangle + \gamma \Pi_n^\perp | \phi_2 \rangle \right) \quad (3.72)$$

$$= 2 \left[\langle \phi_1 | \Pi_n \rho \Pi_n | \phi_1 \rangle + \gamma \Re \left(\langle \phi_1 | \Pi_n \rho \Pi_n^\perp | \phi_2 \rangle \right) \right] \quad (3.73)$$

donde utilizamos la propiedad $\Pi_n^\perp \Pi_n = \Pi_n \Pi_n^\perp = 0$. Dado que $[\rho, \Pi_n] \neq 0$, podemos afirmar que $\Pi_n \rho \Pi_n^\perp \neq 0$. Consecuentemente, eligiendo los estados $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ adecuadamente, y tomando un valor $|\gamma|$ suficientemente grande, se logra que $\langle \phi | \mathbb{G} | \phi \rangle \leq 0$. Por último, si $\tilde{\Pi}_m^{(H)}$ resulta ser el proyector asociado al autovalor negativo de \mathbb{G} (o también $\tilde{\Pi}_m^{(H)} = |\phi\rangle\langle\phi|$) tenemos que la distribución MHQ presentará negatividades, probando así lo deseado. Cabe notar que en el caso donde ρ commuta con H el segundo término de la expresión (3.73) se anula y obtenemos que $\langle \phi | \mathbb{G} | \phi \rangle$ es no-negativo.

En cuanto a la función característica de la distribución MHQ, podemos partir de la expresión obtenida en (3.48) y particularizar al caso donde $q = 0$. Con ello, tenemos que:

$$\zeta_{\text{MH}}(u) = \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr} [\Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \right) e^{iu(\tilde{E}_m - E_n)} \quad (3.74)$$

donde los k -momentos asociados a la variable W , con esta distribución particular, resultan ser:

$$\langle W^k \rangle_{\text{MH}} \equiv \frac{1}{i^k} \frac{\partial^k \zeta_{\text{MH}}}{\partial u^k} \Big|_{u=0} = \frac{1}{i^k} \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \right) \frac{\partial^k (e^{iu(\tilde{E}_m - E_n)})}{\partial u^k} \Big|_{u=0} \quad (3.75)$$

$$= \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \right) (\tilde{E}_m - E_n)^k \quad (3.76)$$

Para los casos donde $k = 1$ y $k = 2$ obtenemos la verificación de la primera ley y la coincidencia del segundo momento del trabajo con el segundo momento de la diferencia de energía, respectivamente.

Como última propiedad a analizar, veremos cómo es la distribución MHQ cuando estudiamos el proceso en *time-reversal*; es decir, qué consecuencias trae si “pasamos la película hacia atrás”. Para ello, será útil expresar a la distribución MHQ de una manera diferente. A partir de (3.24), podemos reescribir:

$$P_{\text{MH}}(W) \equiv \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (3.77)$$

$$= \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho] \right) \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (3.78)$$

Luego, debemos interpretar que “pasar la película hacia atrás” implica que ahora iniciaremos con el Hamiltoniano \tilde{H} y finalizaremos con el Hamiltoniano H . Consecuentemente, el valor de la primera medición de energía estaría dado por cierto resultado \tilde{E}_m y asociado a su respectivo proyector $\tilde{\Pi}_m$. Posteriormente, se haría *involucionar* y la segunda medición de energía se daría con cierto resultado E_n , asociado a su respectivo proyector Π_n . Además, el estado inicial del sistema correspondería a $\rho^* = \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger$. Por lo tanto, a la expresión de la distribución de probabilidad de la distribución MHQ dada por (3.78) se le deben realizar las siguientes modificaciones:

$$\begin{array}{ll} \rho \longrightarrow \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger & \mathcal{U} \longleftrightarrow \mathcal{U}^\dagger \\ \Pi_n \longleftrightarrow \tilde{\Pi}_m & E_n \longleftrightarrow \tilde{E}_m \end{array}$$

Así, conseguimos que la distribución MHQ en *time-reversal* $P_{\text{MH}}^*(-W)$ resulte ser:

$$P_{\text{MH}}^*(-W) \equiv \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[\mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \rho^*] \right) \delta \left(-W - (E_n - \tilde{E}_m) \right) \quad (3.79)$$

$$= \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[\mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger] \right) \delta \left(-W + (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (3.80)$$

$$= \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \right) \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (3.81)$$

$$= \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \equiv P_{\text{MH}}(W) \quad (3.82)$$

Por lo cual, **la distribución MHQ en *time-reversal* coincide con la distribución MHQ original**. Esta es una propiedad que sólo satisface esta distribución dentro de la serie “*q-class*”.

3.3. Distribución FCQ de trabajo

La distribución FCQ es un caso particular dentro de la familia de distribuciones “ q -class”, correspondiente al valor $q = 1/2$. En este caso, su expresión se reduce a la forma dada en (3.39). Al formar parte del espectro de las distribuciones “ q -class”, la distribución FCQ conserva las mismas propiedades generales, entre ellas: satisfacer la primera ley de la termodinámica, reproducir los resultados del protocolo TPM cuando el estado inicial ρ es diagonal en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H y presentar linealidad respecto al estado ρ . Sin embargo, como en el resto de la familia “ q -class”, el costo de estas propiedades es que la distribución FCQ no es una distribución de probabilidad convencional, sino una distribución de quasi-probabilidad. Además, como se observó en (3.45), el segundo momento en la variable de trabajo W coincide con el segundo momento de la variación de energía experimentada por el sistema ρ .

La propiedad más destacada de esta distribución es la simplicidad con la que puede reconstruirse su función característica, en contraste con el resto de las distribuciones “ q -class”. Esto se debe a que permite implementar un protocolo en el que un sistema auxiliar se acopla al sistema de interés, facilitando así la obtención estadística a partir de mediciones sobre dicho sistema auxiliar, en las fases correspondientes (ver Apéndice F).

Además de las propiedades que ya fueron analizadas, queremos saber qué otras características posee la distribución FCQ de trabajo. Para ello, consideraremos un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ que evoluciona en el tiempo $t \in [0, T]$ donde llamaremos $\mathcal{H}(0) \equiv H$ y $\mathcal{H}(T) \equiv \tilde{H}$. Podemos escribir a H y \tilde{H} en su descomposición espectral de energías $\{E_n\}$ y $\{\tilde{E}_m\}$:

$$H = \sum_n E_n \Pi_n \quad , \quad \tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m \quad (3.83)$$

siendo Π_n y $\tilde{\Pi}_m$ los proyectores de H y \tilde{H} , respectivamente. Además, dado $\mathcal{H}(t)$, tendremos un operador evolución $\mathcal{U}(t, t_0)$ que cumple con la ecuación diferencial:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (3.84)$$

donde t_0 es un tiempo de referencia fijo. Definiremos $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$.

Notemos que, así como sucedía con la distribución MHQ, puede visualizarse a la distribución FCQ como una distribución de quasi-probabilidad conjunta en las energías del Hamiltoniano final \tilde{H} e inicial H . A partir de la expresión (3.39), podemos reescribir:

$$P_{\text{FC}}(W) \equiv \sum_{l,n,m} q_{lnm}^{\text{FC}} \delta \left(W - \left(\tilde{E}_m - \frac{E_l + E_n}{2} \right) \right) \quad (3.85)$$

donde $q_{lnm}^{\text{FC}} \equiv \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right)$. Si sumamos en los índices correspondientes a cada Hamiltoniano sobre el factor q_{lnm}^{FC} , llegamos a que:

$$\sum_{l,n} q_{lnm}^{\text{FC}} = \sum_{l,n} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) = \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \right) = \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \quad \checkmark \quad (3.86)$$

$$\sum_m q_{lnm}^{\text{FC}} = \sum_m \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) = \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \rho] \right) \delta_{ln} = \text{tr}[\Pi_n \rho] \quad \checkmark \quad (3.87)$$

que representan las *probabilidades marginales* de medir cierto valor de energía en los Hamiltonianos final \tilde{H} e inicial H , respectivamente. Luego, se ve que $\sum_{l,n,m} q_{lm}^{\text{FC}} = 1$.

Puede hallarse una restricción a los valores que puede tomar la cuasi-probabilidad conjunta q_{lm}^{FC} . Utilizando la desigualdad de Cauchy-Schwarz dada por (3.56), podemos relacionar:

$$(q_{lm}^{\text{FC}})^2 = \left[\Re \left(\text{tr}[\rho \Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n] \right) \right]^2 \leq \left[\Re \left(\text{tr}[\rho \Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n] \right) \right]^2 + \left[\Im \left(\text{tr}[\rho \Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n] \right) \right]^2 \quad (3.88)$$

$$= \left| \text{tr}[\rho \Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n] \right|^2 = \left| \text{tr} \left[\sqrt{\rho} \Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \sqrt{\rho} \right] \right|^2 \quad (3.89)$$

$$\leq \text{tr} \left[\sqrt{\rho} \Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_l \sqrt{\rho} \right] \text{tr} \left[\sqrt{\rho} \Pi_n \Pi_n \sqrt{\rho} \right] \quad (3.90)$$

$$= \underbrace{\text{tr}[\Pi_l \rho \Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)}]}_{\leq 1} \underbrace{\text{tr}[\rho \Pi_n]}_{\leq 1} \leq 1 \quad (3.91)$$

donde denotamos $\Im(\cdot)$ a la parte imaginaria del argumento y expresamos $\sqrt{\rho}$ al operador tal que $(\sqrt{\rho})^2 \equiv \rho$. En el último paso, tenemos el producto de dos factores: el primer factor representa la selección de los términos diagonales del estado ρ para luego proyectarlos sobre $\tilde{\Pi}_m^{(H)}$, reduciéndose al cálculo de una probabilidad. Por otro lado, el segundo factor se trata de una simple regla de Born. Esto implica que ambos pueden ser acotados debido a que representan una probabilidad. Consecuentemente, q_{lm}^{FC} está restringido a valores $q_{lm}^{\text{FC}} \in [-1, 1]$ por el hecho de tratarse de una cuasi-probabilidad.

Notemos que la commutación entre el par de operadores Π_n, ρ (o, en su defecto, Π_l, ρ) transforma a la distribución FCQ en una distribución de probabilidad convencional. Sin embargo, si esto ocurriese entre los operadores $\tilde{\Pi}_m^{(H)}$ y ρ , entonces no estaría garantizada la no-negatividad en esta distribución. Un análisis más profundo es realizado en el Apéndice E, con un ejemplo de tres eventos, que es análogo al caso de la distribución FCQ.

La función característica de la distribución FCQ puede hallarse a partir de la relación obtenida en (3.48), particularizando al caso donde $q = 1/2$. Con ello, tenemos que:

$$\zeta_{\text{FC}}(u) = \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) e^{iu(\tilde{E}_m - \frac{E_l + E_n}{2})} \quad (3.92)$$

donde los k -momentos asociados a la variable W , con esta distribución particular, resultan ser:

$$\langle W^k \rangle_{\text{FC}} \equiv \frac{1}{i^k} \frac{\partial^k \zeta_{\text{FC}}}{\partial u^k} \Big|_{u=0} = \frac{1}{i^k} \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \frac{\partial^k \left(e^{iu(\tilde{E}_m - \frac{E_l + E_n}{2})} \right)}{\partial u^k} \Big|_{u=0} \quad (3.93)$$

$$= \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \left(\tilde{E}_m - \frac{E_l + E_n}{2} \right)^k \quad (3.94)$$

Así como ocurre con toda la familia de la distribución “ q -class”, para los casos donde $k = 1$ y $k = 2$ obtenemos la verificación de la primera ley y la coincidencia del segundo momento del trabajo con el segundo momento de la diferencia de energía, respectivamente.

Por último, pero no menos importante, exploraremos la distribución FCQ en *time-reversal*. Es decir, analizaremos las consecuencias de “pasar la película hacia atrás” en el proceso. Para ello, resulta conve-

niente reformular la distribución FCQ de una manera distinta. A partir de (3.39), podemos reescribir:

$$P_{\text{FC}}(W) \equiv \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) \delta \left(W - \left(\tilde{E}_m - \frac{E_l + E_n}{2} \right) \right) \quad (3.95)$$

$$= \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho] \right) \delta \left(W - \left(\tilde{E}_m - \frac{E_l + E_n}{2} \right) \right) \quad (3.96)$$

En este contexto, “pasar la película hacia atrás” significa que ahora el proceso comienza con el Hamiltoniano \tilde{H} y finaliza con el Hamiltoniano H . Como resultado, la primera medición de energía arrojará un valor \tilde{E}_m , asociado a su correspondiente proyector $\tilde{\Pi}_m$. A continuación, el sistema *evolucionará en sentido inverso*, y la segunda medición de energía proporcionará un resultado E_n , asociado a su respectivo proyector Π_n . Además, el estado inicial del sistema en este escenario estará dado por $\rho^* = \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger$. Por lo tanto, la expresión de la distribución de probabilidad de la distribución FCQ, dada en (3.96), debe modificarse de la siguiente manera:

$$\begin{array}{ll} \rho \longrightarrow \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger & \mathcal{U} \longleftrightarrow \mathcal{U}^\dagger \\ \Pi_n \longleftrightarrow \tilde{\Pi}_m & E_n \longleftrightarrow \tilde{E}_m \end{array}$$

Así, conseguimos que la distribución FCQ en *time-reversal* $P_{\text{FC}}^*(W)$ resulte ser:

$$P_{\text{FC}}^*(-W) \equiv \sum_{n,m,k} \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_k \mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \rho^*] \right) \delta \left(-W - \left(E_n - \frac{\tilde{E}_k + \tilde{E}_m}{2} \right) \right) \quad (3.97)$$

$$= \sum_{n,m,k} \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_k^{(H)} \Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \right) \delta \left(W - \left(\frac{\tilde{E}_k + \tilde{E}_m}{2} - E_n \right) \right) \neq P_{\text{FC}}(W) \quad (3.98)$$

dando que la distribución FCQ en *time-reversal* no coincide con la distribución FCQ original.

3.4. Distribución KDQ de trabajo

En la Sección 3.1 (y gracias al Apéndice E), desarrollamos formalmente el concepto de cuasi-probabilidades a partir de un conjunto de propiedades razonables que permiten recuperar la interpretación convencional de probabilidad. Como resultado, obtuvimos una distribución general para el trabajo basada en la familia “ q -class”, lo que llevó a una definición de trabajo coherente con la realidad física. No obstante, un análisis más riguroso revela que la distribución “ q -class” no es la forma más general posible para describir el trabajo. Esto se debe a una restricción impuesta sobre los valores que puede tomar dicha distribución. Aunque permitimos que adopte valores en \mathbb{R} , esta condición puede relajarse aún más, permitiendo, por ejemplo, que la distribución se extienda a todo el plano complejo \mathbb{C} .

En este contexto, análogo a como se hizo en la Sección 3.1, queremos dar con una función de cuasi-probabilidad de valores complejos $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$ para un número arbitrario de eventos. Para ello, empezaremos analizando el caso particular para dos eventos E, G y posteriormente generalizaremos su

resultado. Así, la cuasi-probabilidad $\tilde{q}(E, G)$ puede ser definida a partir de las propiedades:

$$\tilde{q}(E, G) \in \mathbb{C} \quad (3.99)$$

$$\tilde{q}(\mathbb{I}, E) \equiv \tilde{q}(E, \mathbb{I}) \equiv p(E) \quad (3.100)$$

$$\tilde{q}(E + F + \dots, G) \equiv \tilde{q}(E, G) + \tilde{q}(F, G) + \dots \quad (3.101)$$

$$\tilde{q}(G, E + F + \dots) \equiv \tilde{q}(G, E) + \tilde{q}(G, F) + \dots \quad (3.102)$$

donde $p(E) \geq 0$ indica la probabilidad de que ocurra el evento E y los operadores E, F, \dots pertenecen al mismo conjunto de operadores de un dado POVM. A través de la relación (3.100) se recupera el concepto de probabilidad. Es evidente que la función compleja $\tilde{q}(E, G)$ ha sido definida de manera análoga a la función de cuasi-probabilidad real $q(E, G)$, como se puede constatar al recordar las propiedades (3.6), (3.7), (3.8) y (3.9). Además, a partir de las expresiones (3.101) y (3.102), se puede demostrar que $\tilde{q}(E, G)$ es lineal en ambas variables, lo que implica que es una función bilineal. Este resultado se obtiene de manera similar a como se demostró en el caso de $q(E, G)$.

Dado que $\tilde{q}(\cdot, \cdot)$ es una función bilineal que debe satisfacer la relación (3.100) para recuperar la probabilidad convencional, podemos formular una definición basada en la traza. Esto conduciría a un análogo del teorema de Gleason [56] para cuasi-probabilidades complejas. Además, la función $q(\cdot, \cdot)$ debe ser un caso particular de $\tilde{q}(\cdot, \cdot)$ cuando toma valores reales. Todo esto sugiere que $\tilde{q}(E, G)$ debe adoptar la forma:

$$\boxed{\tilde{q}(E, G) \equiv \text{tr}[EG\rho]} \quad (3.103)$$

donde ρ indica el estado cuántico del sistema. En esta expresión, se observa que $\tilde{q}(E, G)$ se relaciona con la probabilidad convencional cuando E o G corresponden al operador identidad \mathbb{I} . Asimismo, la conexión con $q(E, G)$ se expresa mediante:

$$q(E, G) \equiv \Re(\tilde{q}(E, G)) \quad (3.104)$$

donde $\Re(\cdot)$ representa la parte real del argumento.

Es importante notar que si se invirtiese el orden de los operadores E, G de la expresión (3.103) entonces la relación dada en (3.104) para $q(E, G)$ permanece inalterada. No obstante, mantendremos la convención en donde el orden en que aparecen los eventos en los argumentos de $\tilde{q}(E, G)$ corresponda al orden en que éstos son multiplicados. Esta elección introduce una diferencia fundamental en la definición de cuasi-probabilidades complejas para dos eventos: su expresión no es única, a diferencia de las cuasi-probabilidades reales, que sí poseen una formulación única [54]. A partir de (3.103), también se obtiene la relación:

$$\tilde{q}(E, G) = [\tilde{q}(G, E)]^* \quad (3.105)$$

donde el operador $*$ denota el conjugado complejo. Esto implica que, a diferencia de $q(\cdot, \cdot)$, la simetría entre las entradas ya no se mantiene en el caso complejo. En consecuencia, la caracterización de los eventos conjuntos pierde relevancia en esta formulación de cuasi-probabilidades, lo que resalta una distinción clave entre ambos enfoques.

Generalizando a la función de cuasi-probabilidad compleja $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$ para un número arbitrario de

eventos, podemos definirla con propiedades análogas a las ya mencionadas para dos eventos:

$$\tilde{q}(E, G, \dots) \in \mathbb{C} \quad (3.106)$$

$$\tilde{q}(\mathbb{I}, E, G, \dots) \equiv \tilde{q}(E, \mathbb{I}, G, \dots) \equiv \dots \equiv \tilde{q}(E, G, \dots) \quad (3.107)$$

$$\tilde{q}(E + F + \dots, G, \dots) \equiv \tilde{q}(E, G, \dots) + \tilde{q}(F, G, \dots) + \dots \quad (3.108)$$

$$\tilde{q}(G, E + F + \dots, \dots) \equiv \tilde{q}(G, E, \dots) + \tilde{q}(G, F, \dots) + \dots \quad (3.109)$$

donde los operadores E, F, \dots pertenecen al mismo conjunto de operadores de un dado POVM. Dadas estas propiedades, también puede deducirse que la función $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$ es lineal en cada una de sus entradas. Por lo cual, $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$ es multilineal.

Extrapolando la relación (3.103), tenemos que la expresión general de esta cuasi-probabilidad compleja $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$ resulta ser:

$$\boxed{\tilde{q}(E, G, \dots) \equiv \text{tr}[EG \dots \rho]} \quad (3.110)$$

Vemos que esta función corrobora ser lineal en todas sus entradas. Además, si a una función de cuasi-probabilidad compleja de N eventos se le incluye al operador \mathbb{I} en uno de sus argumentos, entonces resulta ser una función de cuasi-probabilidad compleja de $(N - 1)$ eventos:

$$\tilde{q}(\underbrace{E, \mathbb{I}, G, H \dots}_{N \text{ eventos}}) \equiv \text{tr}[E \mathbb{I} GH \dots \rho] = \text{tr}[EGH \dots \rho] \equiv \underbrace{\tilde{q}(E, G, H, \dots)}_{(N-1) \text{ eventos}} \quad (3.111)$$

cumpliéndose así la propiedad (3.107). Para el caso donde $N = 2$, recuperamos la noción intuitiva de probabilidad.

Habiendo desarrollado el formalismo de cuasi-probabilidades complejas, nos aventuraremos en dar con una distribución de trabajo que se construya a partir de estas y obtenga los resultados físicos deseados. Con esto en mente, consideremos un sistema cuántico gobernado por la dinámica de un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(\lambda(t))$. El Hamiltoniano depende del tiempo a través de un *protocolo* $\lambda \equiv \lambda(t)$ que realiza trabajo sobre el sistema y que suponemos que podemos controlar externamente. Inicialmente, a $t = 0$, el sistema se encuentra en un estado descrito por ρ . Luego, se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. Más allá de la dependencia de λ , diremos que el sistema está aislado, por lo que evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (con t_0 un tiempo fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (3.112)$$

Además, con el propósito de simplificar la notación, llamaremos $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(t))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$. Vamos a asociarles espectros de energías $\{E_n\}$ y $\{\tilde{E}_m\}$ a estos Hamiltonianos H, \tilde{H} , de manera que podemos escribirlos como:

$$H = \sum_n E_n \Pi_n \quad , \quad \tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m \quad (3.113)$$

siendo Π_n y $\tilde{\Pi}_m$ los proyectores de H y \tilde{H} , respectivamente.

Al igual que en la Sección 3.1.2 para la distribución “ q -class”, exigiremos que la nueva distribución que buscamos reproduzca los resultados de la estadística de trabajo del protocolo TPM en el caso en

que $[\rho, H] = 0$. Esto significa que, cuando el estado inicial del sistema sea $\rho = \bar{\rho}$, con $\bar{\rho} = \sum_n \Pi_n \rho \Pi_n$, la expresión de la distribución de cuasi-probabilidad compleja de trabajo debe coincidir con la ecuación (3.22). De manera análoga al caso real, podemos suponer que la distribución de cuasi-probabilidad compleja del trabajo debe tener una forma similar a la ecuación (3.23). Dejaremos libre el número de eventos involucrados, determinados por los proyectores Π_n y $\tilde{\Pi}_m^{(H)}$. De este modo, proponemos que la distribución buscada debe escribirse como:

$$P(W) = \sum_{n, \dots, l, m, \dots} \tilde{q}(\Pi_n, \dots, \Pi_l, \tilde{\Pi}_m^{(H)}, \dots) \delta \left(W - w \left(E_n, \dots, E_l, \tilde{E}_m, \dots \right) \right) \quad (3.114)$$

donde $w(E_n, \dots, E_l, \tilde{E}_m, \dots)$ es una función que depende de los espectros de energía de los Hamiltonianos inicial y final, y sus eventos involucrados. En este caso, el orden de los eventos que aparecen en la función de cuasi-probabilidad $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$ no refleja exactamente el orden en el que deben ir, sino que sólo es una forma esquemática de representar quiénes forman parte de dicha función.

Con esto dicho, resulta inmediato definir una distribución de la forma:

$$P_{\text{KD}}(W) \equiv \sum_{n, m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (3.115)$$

donde denotamos $\tilde{\Pi}_m^{(H)} \equiv \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U}$ al proyector del Hamiltoniano final \tilde{H} en representación de Heisenberg. Es fácil ver que el reemplazo de $\rho = \bar{\rho}$ recupera la expresión (3.22). Esta distribución se la conoce como la distribución de cuasi-probabilidad de Kirkwood-Dirac, o simplemente **distribución KDQ** (del inglés: “Kirkwood-Dirac Quasiprobability”). Luego, podemos reescribir a (3.115) como:

$$P_{\text{KD}}(W) \equiv \sum_{n, m} \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) \quad (3.116)$$

donde definimos $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} \equiv \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho]$ a la función de cuasi-probabilidad compleja de dos eventos, los cuales son: $\tilde{\Pi}_m^{(H)}$ y Π_n . Esta distribución fue propuesta por primera vez en la década de 1930 por Kirkwood [63] y en la década de 1940 por Dirac [64]. Podemos notar por (3.24) que la parte real de la distribución KDQ coincide con la distribución MHQ:

$$P_{\text{MH}}(W) = \Re(P_{\text{KD}}(W)) \quad , \quad q_{nm}^{\text{MH}} = \Re(\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}) \quad (3.117)$$

Con ello, el argumento que presenta la distribución KDQ en la función delta de Dirac conserva la noción intuitiva de trabajo, trasladada del protocolo TPM, como la diferencia de energías al final y al inicio del proceso. Además, no es la única distribución de cuasi-probabilidad compleja de trabajo que cumple la expresión (3.114) y verifica la reproducción de la estadística del protocolo TPM donde el estado ρ commuta con el Hamiltoniano inicial H , pero a los fines de este trabajo será suficiente el estudio de ella sola.

Cabe destacar que la cuasi-probabilidad $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$ se encuentra relacionada con la correlación que poseen dos operadores a distintos tiempos. De hecho, dados dos observables $A(t)$ y $B(t)$, se define su correlación a dos tiempos distintos bajo una evolución \mathcal{U} y estado ρ en el intervalo $t \in [0, T]$ como:

$$\langle A^{(H)}(T) B(0) \rangle \equiv \text{tr}[A^{(H)}(T) B(0) \rho] \quad (3.118)$$

donde $A^{(H)}(T) \equiv \mathcal{U}^\dagger A(T) \mathcal{U}$ es la representación de Heisenberg del observable $A(T)$. De acá puede verse que si tomamos $A(T) = \tilde{\Pi}_m$ y $B(0) = \Pi_n$, entonces:

$$\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} = \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] = \langle \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rangle \quad (3.119)$$

Si bien para la construcción de la distribución KDQ hemos exigido que se obtengan los resultados del protocolo TPM cuando el estado inicial ρ es diagonal en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H (recuperándose así los teoremas de fluctuación clásicos), esto no es un requerimiento suficiente para que sea una definición de trabajo adecuada. Una de las características que buscamos que satisfaga es la linealidad respecto al estado inicial cuántico. A partir de la expresión (3.115), vemos que la misma es lineal en ρ , corroborándose así otra cualidad que deseamos.

Por otra parte, es importante verificar el cumplimiento de la primera ley de la termodinámica, expresada en la relación (3.30), donde el valor medio de trabajo debe ser igual a la variación media de energía. Si queremos calcular el valor medio de trabajo para esta distribución, basta con:

$$\langle W \rangle_{\text{KD}} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dW W P_{\text{KD}}(W) \quad (3.120)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dW W \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (3.121)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] (\tilde{E}_m - E_n) \quad (3.122)$$

$$= \text{tr}[\tilde{H}_m^{(H)} \rho] - \text{tr}[H \rho] = \langle \Delta E \rangle \quad \checkmark \quad (3.123)$$

donde $\tilde{H}^{(H)} = \sum_m \tilde{E}_m \Pi_m^{(H)}$. Por lo cual, vemos que la distribución KDQ siempre satisface la primera ley. Sin embargo, resulta curioso al estudiar el segundo momento de la variable W en esta distribución:

$$\langle W^2 \rangle_{\text{KD}} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dW W^2 P_{\text{KD}}(W) \quad (3.124)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dW W^2 \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (3.125)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] (\tilde{E}_m - E_n)^2 \quad (3.126)$$

$$= \text{tr}[\tilde{H}^{2(H)} \rho] + \text{tr}[H^2 \rho] - 2 \text{tr}[\tilde{H}^{(H)} H \rho] \quad (3.127)$$

$$= \underbrace{\text{tr}[(\tilde{H}^{(H)} - H)^2 \rho]}_{=\langle(\Delta E)^2\rangle} - \text{tr}[\tilde{H}^{(H)} H \rho] + \text{tr}[H \tilde{H}^{(H)} \rho] \quad (3.128)$$

$$= \langle(\Delta E)^2\rangle - \text{tr}[[\tilde{H}^{(H)}, H] \rho] \quad (3.129)$$

donde se usó la relación dada en (3.40). Es decir, la distribución KDQ no coincide en el segundo momento de trabajo con el segundo momento de la variación de energía, ligado a sus fluctuaciones. Puede mostrarse que el término que involucra al comutador de los Hamiltonianos $\tilde{H}^{(H)}$ y H es una cantidad puramente imaginaria. Esto abre la posibilidad de que $\langle W^2 \rangle_{\text{KD}}$ pueda ser complejo. De todas formas, bastaría quedarse con $\Re(\langle W^2 \rangle_{\text{KD}})$ para obtener la magnitud $\langle(\Delta E)^2\rangle$.

Así como sucedió para las distribuciones de MHQ y FCQ, se tiene que la distribución KDQ también

puede interpretarse como una distribución de cuasi-probabilidad conjunta en las energías del Hamiltoniano final \tilde{H} e inicial H . Esto puede visualizarse a partir de la expresión (3.116), donde definimos $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} \equiv \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho]$. Si sumamos únicamente sobre uno de los índices al factor $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$, llegamos a que:

$$\sum_n \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} = \sum_n \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] = \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \quad \checkmark \quad (3.130)$$

$$\sum_m \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} = \sum_m \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] = \text{tr}[\Pi_n \rho] \quad \checkmark \quad (3.131)$$

que representan las *probabilidades marginales* de medir cierto valor de energía en los Hamiltonianos final \tilde{H} e inicial H , respectivamente. Además, se tiene que $\sum_{n,m} \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} = 1$.

Además, existe una cota en los valores que puede adoptar la cuasi-probabilidad conjunta $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$. Para ello, utilizaremos la desigualdad de Cauchy-Schwarz expresada en (3.56). Entonces:

$$|\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}|^2 = \left| \text{tr}[\rho \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n] \right|^2 = \left| \text{tr} \left[\sqrt{\rho} \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \sqrt{\rho} \right] \right|^2 \quad (3.132)$$

$$\leq \text{tr} \left[\sqrt{\rho} \tilde{\Pi}_m^{(H)} \tilde{\Pi}_m^{(H)} \sqrt{\rho} \right] \text{tr} \left[\sqrt{\rho} \Pi_n \Pi_n \sqrt{\rho} \right] \quad (3.133)$$

$$= \underbrace{\text{tr}[\rho \tilde{\Pi}_m^{(H)}]}_{\leq 1} \underbrace{\text{tr}[\rho \Pi_n]}_{\leq 1} \leq 1 \quad (3.134)$$

donde expresamos $\sqrt{\rho}$ al operador tal que $(\sqrt{\rho})^2 \equiv \rho$. Vemos que, al final, tenemos el producto de dos factores que resultan en la regla de Born. Por lo tanto, ambos pueden ser acotados debido a que representan una probabilidad. Esto muestra que $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$ está incluido dentro del disco unidad (centrado en cero) de los complejos $\{z \in \mathbb{C} : |z| \leq 1\}$. Sin embargo, la restricción adicional obtenida para la expresión q_{nm}^{MH} dada por (3.67) muestra que la parte real de $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$ se encuentra aún más limitada, debido a su vinculación directa por medio de la expresión (3.117). Por lo cual, una mejor definición para los valores de $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$ puede darse con:

$$\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} = \{z \in \mathbb{C} : |z| \leq 1 \quad \wedge \quad \Re(z) \geq -1/8\} \quad (3.135)$$

En lo que concierne a la función característica $\zeta_{\text{KD}}(u)$, esta contiene toda la información de los momentos de la distribución de cuasi-probabilidad. La misma puede calcularse mediante:

$$\zeta_{\text{KD}}(u) \equiv \langle e^{iuW} \rangle_{\text{KD}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dW P_{\text{KD}}(W) e^{iuW} \quad (3.136)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dW \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \delta \left(W - (\tilde{E}_m - E_n) \right) e^{iuW} \quad (3.137)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] e^{iu(\tilde{E}_m - E_n)} \quad (3.138)$$

Es notable destacar que, así como la distribución MHQ resulta ser la parte real de la distribución KDQ, al observar (3.74) vemos que en la función característica sucede lo mismo sobre el factor de la traza. Ambas funciones se encuentran relacionadas por medio de:

$$\zeta_{\text{MH}}(u) = \frac{1}{2} (\zeta_{\text{KD}}(u) + \zeta_{\text{KD}}^*(-u)) \quad (3.139)$$

donde $*$ denota al conjugado complejo. Por otro lado, pueden obtenerse los distintos k -momentos en la variable W para la distribución KDQ con la expresión:

$$\langle W^k \rangle_{\text{KD}} \equiv \frac{1}{i^k} \frac{\partial^k \zeta_{\text{KD}}}{\partial u^k} \Big|_{u=0} = \frac{1}{i^k} \sum_{n,m} \text{tr}[\Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \frac{\partial^k (e^{iu(\tilde{E}_m - E_n)})}{\partial u^k} \Big|_{u=0} \quad (3.140)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] (\tilde{E}_m - E_n)^k \quad (3.141)$$

donde para $k = 1$ y $k = 2$ obtenemos los resultados de (3.123) y (3.129), respectivamente.

Para el caso de la distribución KDQ en *time-reversal* (el proceso donde “pasamos la película hacia atrás”), expresaremos esta distribución de una manera diferente. A partir de (3.115), podemos reescribir:

$$P_{\text{KD}}(W) \equiv \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (3.142)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho] \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (3.143)$$

Luego, vemos que el concepto de “pasar la película hacia atrás” implica iniciar con el Hamiltoniano \tilde{H} y finalizar con el Hamiltoniano H . Entonces, el valor de la primera medición de energía estaría dado por cierto resultado \tilde{E}_m y asociado a su respectivo proyector $\tilde{\Pi}_m$. Seguido a esto, se *involucionaría* y la segunda medición de energía se daría con cierto resultado E_n , asociado a su respectivo proyector Π_n . Si consideramos el estado inicial del sistema como $\rho^* = \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger$, tenemos que la expresión de la distribución de probabilidad de la distribución KDQ dada por (3.143) se le deben realizar las siguientes modificaciones:

$$\begin{array}{ll} \rho \rightarrow \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger & \mathcal{U} \longleftrightarrow \mathcal{U}^\dagger \\ \Pi_n \longleftrightarrow \tilde{\Pi}_m & E_n \longleftrightarrow \tilde{E}_m \end{array}$$

Así, la distribución KDQ en *time-reversal* $P_{\text{KD}}^*(W)$ resulta:

$$P_{\text{KD}}^*(-W) \equiv \sum_{n,m} \text{tr}[\mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \rho^*] \delta(-W - (E_n - \tilde{E}_m)) \quad (3.144)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\mathcal{U} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \rho \mathcal{U}^\dagger] \delta(-W + (\tilde{E}_m - E_n)) \quad (3.145)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho] \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) \neq P_{\text{KD}}(W) \quad (3.146)$$

dando que la distribución KDQ en *time-reversal* no coincide con la distribución KDQ original.

Si queremos profundizar en el estudio de los valores que puede tomar la función de cuasi-probabilidad compleja $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$, definidos más allá de los convencionales, dada en la ecuación (3.110), es posible seguir un enfoque similar al empleado en el Apéndice E para la función de cuasi-probabilidad real $q(\cdot, \cdot, \dots)$. En dicho análisis, se muestra en detalle que, bajo ciertas relaciones de commutación adecuadas, la función de cuasi-probabilidad real $q(\cdot, \cdot, \dots)$ puede transformarse en una distribución de probabilidad convencional, restringida a valores positivos o nulos. Un resultado análogo se obtiene para $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$, dado que su estructura es similar a la de $q(\cdot, \cdot, \dots)$. Por lo tanto, si no es posible reducir $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$ a una interpretación basada en la regla de Born, no puede descartarse que adopte valores negativos o

incluso complejos (no reales), a los cuales llamaremos **valores de no-clasicalidad** para $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$.

Así mismo, en el caso particular donde el estado ρ presenta coherencias en la base de autoestados de todos los eventos involucrados, estos valores de no-clasicalidad son consecuencia directa de los términos de coherencia presentes en el estado ρ respecto a las bases que diagonalizan a, al menos, dos de los eventos. Evidentemente, existe nuevamente una relación intrínseca entre la aparición de valores negativos o complejos (no reales) en la función de cuasi-probabilidad $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$ y las coherencias en el estado ρ . La conclusión de esto último puede extraerse de un resultado análogo al obtenido en el Apéndice E para la función $q(\cdot, \cdot, \dots)$.

Retomando el estudio para la distribución KDQ, solo nos resultará relevante cuando la función de cuasi-probabilidad compleja $\tilde{q}(\cdot, \cdot, \dots)$ está restringida a dos eventos, que es la definida por (3.119). Desde allí, puede verse que la commutación entre cualquier par de operadores $\Pi_n, \tilde{\Pi}_m^{(H)}, \rho$ deviene en que la distribución KDQ es una distribución de probabilidad, adoptando únicamente valores reales no-negativos. Una forma de medir la no-clasicalidad que presenta la distribución KDQ es a través de la **función de no-clasicalidad** $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)]$:

$$\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] \equiv -1 + \sum_{n,m} |\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}| \quad (3.147)$$

donde recordamos que $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} \equiv \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho]$. Esta función $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)]$ es una herramienta útil para detectar comportamientos no-clásicos en sistemas cuánticos. La misma cumple con las siguientes propiedades, las cuales demostramos en el Apéndice G:

- P1. **Se tiene que** $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] = 0 \iff \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$ **es una distribución de probabilidad conjunta.**
- P2. **Se tiene que** $\mathbb{N}[p\tilde{q}_1(\rho) + (1-p)\tilde{q}_2(\rho)] \leq p\mathbb{N}[\tilde{q}_1(\rho)] + (1-p)\mathbb{N}[\tilde{q}_2(\rho)]$ **con** $p \in [0, 1]$, siendo $\tilde{q}_1(\rho), \tilde{q}_2(\rho)$ dos distribuciones KDQ distintas.
- P3. **Si** $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] > 0$ **entonces existe al menos una elección en los índices** n, m **para los cuales** $\Pi_n, \tilde{\Pi}_m^{(H)}$ **y** ρ **no commutan entre sí.**
- P4. **Consideremos la dinámica de decoherencia, definida como** $\mathcal{D}_s \equiv (1-s)\mathbb{I} + s\mathcal{D}$ **donde** $s \in [0, 1]$ **y el operador** \mathcal{D} **es aquel que elimina del estado** ρ **los elementos por fuera de la diagonal (coherencias) respecto a la base** $\{\Pi_n\}$. **Entonces:** $\mathbb{N}[\tilde{q}(\mathcal{D}_s(\rho))] \leq \mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)]$.

La distribución KDQ ha tenido éxito en la descripción de varios fenómenos físicos de interés [33], inclusive en aquellos relacionados con el trabajo realizado por un sistema cuántico aislado y los teoremas de fluctuación que se desprenden de ella. Vale la pena mencionar que existen varios esquemas para los cuales se puede obtener la distribución KDQ, los cuales no entraremos a desarrollar en específico, pero pueden visualizarse en [32]. Sin embargo, queremos mencionar que entre ellos se encuentra un protocolo en el que, mediante una medición similar a las desarrolladas en la Sección 2.2.2 y en el Apéndice F, se busca reconstruir la función característica. Sorprendentemente, esta idea también se basa en el acople de un sistema auxiliar \mathcal{A} (o *ancilla*) al sistema de interés \mathcal{S} , donde se hace interactuar a ambos entre sí (entrelazamiento), con el agregado de ciertas operaciones sobre el sistema auxiliar, para finalmente medir proyectivamente sobre la *ancilla*. Este método también puede utilizarse para el cálculo de la distribución MHQ, ya que se encuentra directamente relacionada con la función característica de la distribución KDQ mediante la ecuación (3.139).

Para terminar con el desarrollo de este capítulo, se dará una descripción de la función de Wigner. Esta distribución es conocida dentro del área de las quasi-probabilidades debido a que permite representar estados cuánticos en un espacio de fase similar al de la mecánica clásica. La función de Wigner será importante debido a que será otra de nuestras herramientas clave para introducir una nueva distribución de quasi-probabilidad de trabajo basada en su formalismo.

3.5. Función de Wigner

La función de Wigner fue introducida por Eugene Wigner [39] para estudiar correcciones cuánticas a la mecánica estadística clásica y provee una forma de representar unívocamente al estado de un sistema cuántico en el espacio de fases. Dada una matriz densidad ρ , se define la respectiva función de Wigner $\mathcal{W}(x, p)$ unidimensional como:

$$\mathcal{W}(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x + \frac{y}{2} \right| \rho \left| x - \frac{y}{2} \right\rangle e^{-ipy/\hbar} \quad (3.148)$$

que, cuando resulta ser positiva, es interpretada como la función de probabilidad de encontrar a mi sistema cuántico en una posición entre $(x, x + dx)$ con momento entre $(p, p + dp)$. Esta función es invertible en el sentido de que, dada la $\mathcal{W}(x, p)$, se puede reconstruir de forma unívoca la matriz densidad ρ correspondiente [39, 71], junto a todas las correlaciones y propiedades estadísticas del estado cuántico. Es decir, la función de Wigner contiene toda la información del sistema cuántico.

Podemos mencionar ciertas propiedades de la función de Wigner, las cuales demostraremos:

P1. **Los valores que adopta son reales:** $\mathcal{W}(x, p) \in \mathbb{R}$.

Demostración:

Para ello, veamos que si calculamos el traspuesto conjugado a la función de Wigner ($\mathcal{W}^\dagger(x, p)$) entonces recuperamos la función original $\mathcal{W}(x, p)$:

$$\mathcal{W}^\dagger(x, p) = \left[\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x + \frac{y}{2} \right| \rho \left| x - \frac{y}{2} \right\rangle e^{-ipy/\hbar} \right]^\dagger \quad (3.149)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x - \frac{y}{2} \right| \rho^\dagger \left| x + \frac{y}{2} \right\rangle e^{ipy/\hbar} \quad (3.150)$$

$$= \frac{-1}{2\pi\hbar} \int_{+\infty}^{-\infty} dy' \left\langle x + \frac{y'}{2} \right| \rho \left| x - \frac{y'}{2} \right\rangle e^{-ipy'/\hbar} \quad (3.151)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dy' \left\langle x + \frac{y'}{2} \right| \rho \left| x - \frac{y'}{2} \right\rangle e^{-ipy'/\hbar} = \mathcal{W}(x, p) \quad \checkmark \quad (3.152)$$

en donde se realizó el cambio de variable $y' = -y$. \square

P2. **La función $\mathcal{W}(x, p)$ se encuentra normalizada:**

Demostración:

Al integrar sobre las variables x, p a la función $\mathcal{W}(x, p)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp \mathcal{W}(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x + \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x - \frac{y}{2} \right\rangle e^{-ipy/\hbar} \quad (3.153)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x + \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x - \frac{y}{2} \right\rangle \delta(y) \quad (3.154)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x | \rho | x \rangle = 1 \quad \checkmark \quad (3.155)$$

donde se utilizó la definición de la función delta de Dirac: $\int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-ipy/\hbar} = 2\pi\hbar \delta(y)$. \square

P3. Al integrar la función $\mathcal{W}(x, p)$ en una de sus variables (distribuciones marginales) recuperamos las densidades de probabilidad de posición y momento del sistema cuántico:

Demostración:

Si integramos en la variable p a la función $\mathcal{W}(x, p)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \mathcal{W}(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x + \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x - \frac{y}{2} \right\rangle e^{-ipy/\hbar} \quad (3.156)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x + \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x - \frac{y}{2} \right\rangle \delta(y) = \langle x | \rho | x \rangle \quad \checkmark \quad (3.157)$$

Por otro lado, si lo hacemos sobre la variable x :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \mathcal{W}(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle x + \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x - \frac{y}{2} \right\rangle e^{-ipy/\hbar} \quad (3.158)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} dv \langle u | \rho | v \rangle e^{-ip(u-v)/\hbar} \quad (3.159)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_i c_i \int_{-\infty}^{+\infty} du \langle u | \psi_i \rangle e^{-ipu/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dv \langle \psi_i | v \rangle e^{ipv/\hbar} \quad (3.160)$$

$$= \sum_i c_i \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} du \langle u | \psi_i \rangle e^{-ipu/\hbar} \right|^2 = \langle p | \rho | p \rangle \quad \checkmark \quad (3.161)$$

donde, para la demostración de la marginal en momento, definimos las variables $u = x + \frac{y}{2}$ y $v = x - \frac{y}{2}$. También, escribimos a $\rho = \sum_i c_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ como un ensamble de funciones de onda, llegando a las transformadas de Fourier de los vectores $|\psi_i\rangle$ en módulo cuadrado, estando en una suma pesada por los coeficientes $c_i \geq 0$ tales que $\sum_i c_i = 1$. \square

Por lo tanto, la función $\mathcal{W}(x, p)$ tiene las características de una distribución de probabilidad en el espacio de fases debido a las propiedades (P1) y (P2), donde se ve reforzada esta intuición por la

propiedad (P3), salvo por el hecho de que puede ser negativa. Notablemente, existen ciertos estados en los cuales $\mathcal{W}(x, p)$ es no-negativa y entonces está bien definida como una función de distribución de probabilidad. Es más, la estadística generada por la función de Wigner es indistinguible de la estadística generada por un ensamble de partículas clásicas distribuidas según la densidad de probabilidad $\mathcal{W}(x, p)$. Por este motivo, la presencia de valores negativos en $\mathcal{W}(x, p)$ es un criterio frecuentemente utilizado para identificar la presencia de efectos puramente cuánticos en el sistema; vemos entonces la conexión de este argumento con lo desarrollado en el Apéndice E, donde es discutido para una distribución de cuasi-probabilidad general. Por ejemplo, el estado coherente $|\alpha\rangle$ de un oscilador armónico, típicamente considerado el estado más parecido a un estado clásico del oscilador (o de la luz en el caso del campo EM) tiene una función de Wigner positiva (efectivamente, la función de Wigner de un estado coherente es una densidad de probabilidad normal en el espacio de fases). En cambio, si se tiene una superposición cuántica de estados coherentes, como por ejemplo $|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle$, entonces aparecen negatividades en la función de Wigner.

Aunque no lo parezca a simple vista, es posible relacionar esta distribución $\mathcal{W}(x, p)$ con la distribución de cuasi-probabilidad real $q(\cdot, \cdot, \dots)$ dada por la expresión (3.15). Reescribiremos la expresión de la función de Wigner en (3.148) haciendo uso del cambio de variable $z = \frac{y}{2}$. Entonces, obtenemos que:

$$\mathcal{W}(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle x + z | \rho | x - z \rangle e^{-2ipz/\hbar} \quad (3.162)$$

$$= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle x + z | \rho | x - z \rangle \frac{e^{ip(x-z)/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-ip(x+z)/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (3.163)$$

donde se reescribió de manera alternativa a la función de Wigner. Luego, recordando las expresiones en las variables posición y momento x, p :

$$\langle x | p \rangle \equiv \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad , \quad \langle p | x \rangle \equiv \frac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (3.164)$$

reescribimos a la ecuación (3.163) como:

$$\mathcal{W}(x, p) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle x + z | \rho | x - z \rangle \langle x - z | p \rangle \langle p | x + z \rangle \quad (3.165)$$

$$= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \text{tr}[|x - z\rangle \langle x - z| |p\rangle \langle p| |x + z\rangle \langle x + z| \rho] dz \quad (3.166)$$

Al ser la función de Wigner real, el argumento de la integral también debe serlo. Por lo tanto:

$$\mathcal{W}(x, p) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\Re(\text{tr}[|x - z\rangle \langle x - z| |p\rangle \langle p| |x + z\rangle \langle x + z| \rho])}_{=q(x-z, p, x+z)} dz \quad (3.167)$$

$$= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} q(x - z, p, x + z) dz \quad \checkmark \quad (3.168)$$

Esto indica que la función de Wigner unidimensional está relacionada con la integral de la función de cuasi-probabilidad real definida en (3.15), pero particularizando a tres eventos [54]. Está claro que la condición de positividad $\mathcal{W}(x, p) \geq 0$ está condicionada por:

$$\mathcal{W}(x, p) \geq 0 \iff \int_{-\infty}^{+\infty} q(x - z, p, x + z) dz \geq 0 \quad (3.169)$$

por lo que no necesariamente $q(x - z, p, x + z)$ debe ser positiva.

Capítulo 4

Distribución WSM de trabajo

El desarrollo de este trabajo evidenció que no podemos describir la estadística de trabajo adecuadamente mediante una distribución de probabilidad [26], requiriéndose así que se desarrollaran alternativas para afrontar este problema; una de ellas es el formalismo basado en las cuasi-probabilidades. En el capítulo anterior, se hizo un análisis exhaustivo en las distribuciones de cuasi-probabilidad reales [54], obteniéndose la distribución “*q*-class” que luego derivó en sus casos más emblemáticos: las distribuciones MHQ [31] y FCQ [32]. Además, pudimos ampliar el concepto de cuasi-probabilidades hacia los complejos, dando así con la distribución KDQ [33]. Estas distribuciones fueron estudiadas en detalle, dejando ver sus pros y contras a la hora de dar con una definición de trabajo acertada y las mismas lograron satisfacer las condiciones principales que pretendemos que cumpla una definición de trabajo adecuada.

En este capítulo, se desarrollará otra distribución de cuasi-probabilidad que fue recientemente definida y que parte de la función de Wigner [42]. Su construcción se basa en el protocolo SM detallado en el Capítulo 2, donde si se mide el trabajo de un sistema acoplándolo coherentemente a un aparato de medición (*ancilla*), entonces el estado final del aparato contiene toda la información sobre la distribución de trabajo. En este caso, se muestra que la presencia de coherencias está vinculada con la aparición de negatividades (no-clasicalidad). Por otro lado, para estados libres de coherencias se tiene que los resultados coinciden con los brindados por el protocolo TPM. Como adicional, se analizará la dinámica de esta nueva distribución de cuasi-probabilidad con un protocolo particular para un sistema de dos en una variedad de procesos, desde aquellos que ocurren fuera del equilibrio hasta en atajos adiabáticos.

4.1. Distribución de cuasi-probabilidad WSM

La imposibilidad de definir una distribución de probabilidad que caracterice de manera satisfactoria el trabajo en sistemas cuánticos llevó, en el capítulo anterior, a la introducción de un formalismo basado en cuasi-probabilidades. El objetivo era encontrar una distribución de cuasi-probabilidad que permitiera una definición clara del trabajo en este contexto. En efecto, logramos desarrollar cuasi-probabilidades que pueden tomar tanto valores reales como complejos (con parte imaginaria no nula) y definimos distintas distribuciones que cumplen con los criterios deseados.

Sin embargo, al tratarse de cuasi-probabilidades, estas no pueden ser *medidas* en el sentido clásico, ya que sus valores no están restringidos al conjunto de los números reales positivos. Por esta razón, la

obtención de estas distribuciones suele requerir esquemas similares al protocolo SM desarrollado en la Sección 2.2.2. En este enfoque, se mide el trabajo de un sistema \mathcal{S} acoplándolo coherentemente a un aparato de medición \mathcal{A} (*ancilla*). De este modo, el estado final del aparato contiene toda la información sobre la distribución del trabajo, la cual se obtiene a partir de mediciones proyectivas sobre él.

Por lo tanto, esta misma idea también será aplicada para obtener nuestra nueva distribución de cuasi-probabilidad. La dinámica del sistema \mathcal{S} estará dada por un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(\lambda(t))$. El Hamiltoniano depende del tiempo a través de un *protocolo* $\lambda \equiv \lambda(t)$ que realiza trabajo sobre el sistema \mathcal{S} y que suponemos que podemos controlar externamente. Inicialmente, a $t = 0$, el sistema \mathcal{S} se encuentra en un estado descrito por $\rho_{\mathcal{S}}$. Luego, se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. Más allá de la dependencia de λ , diremos que el sistema está aislado, por lo que evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (con t_0 un tiempo fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (4.1)$$

Además, con el propósito de simplificar notación, llamaremos $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(T))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$. Vamos a asociarles espectros de energías $\{E_n\}$ y $\{\tilde{E}_m\}$ a estos Hamiltonianos H, \tilde{H} , de manera que podemos escribirlos como:

$$H = \sum_n E_n \Pi_n \quad , \quad \tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m \quad (4.2)$$

siendo Π_n y $\tilde{\Pi}_m$ los proyectores de H y \tilde{H} , respectivamente.

Por otro lado, el sistema auxiliar \mathcal{A} actúa como “aparato de medición” sobre el cual se codificará el valor de trabajo realizado por \mathcal{S} . El estado inicial de la *ancilla* estará dado por $\rho_{\mathcal{A}}$ que tiene dos grados de libertad continuos \mathcal{W}, \mathcal{T} (los cuales son observables). Definimos \mathcal{W} tal que w son sus autovalores y $|w\rangle$ sus respectivos autoestados. Además, diremos que \mathcal{T} es el generador de las traslaciones en la base $\{|w\rangle\}$. Definiendo $\{\tau\}$ y $\{|\tau\rangle\}$ a los autovalores y autoestados de \mathcal{T} , respectivamente, se tiene que \mathcal{W} es el generador de traslaciones en la base $|\tau\rangle$. Entonces, se satisface la relación de conmutación canónica $[\mathcal{W}, \mathcal{T}] = i\hbar$.

Dicho todo esto, la aplicación del protocolo SM sobre el estado global $\rho_{\mathcal{S}} \otimes \rho_{\mathcal{A}}$ resulta en que el sistema auxiliar al final del proceso $\tilde{\rho}_{\mathcal{A}}$ sea el dado por la expresión (2.53). Recordamos que la misma es:

$$\tilde{\rho}_{\mathcal{A}} = \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] D_{nm} \rho_{\mathcal{A}} D_{n'm}^\dagger \quad (4.3)$$

donde habíamos definido $D_{nm} \equiv e^{-iw_{nm}\mathcal{T}/\hbar}$ con $w_{nm} \equiv \tilde{E}_m - E_n$. Si como sistema auxiliar utilizamos estados iniciales puros bien localizados en la variable w , hemos visto que recuperamos la distribución de trabajo del protocolo TPM. Como ya se ha discutido, esto destruye la coherencia entre distintos niveles de energía del sistema a pesar de que la interacción entrelazante del protocolo guarde el registro coherente de los distintos valores de energía. Esto puede inferir que si en lugar de medir un solo estado en específico logramos hacer una medición extensa que tome toda la información del estado del aparato de medición, entonces se logre captar dichas coherencias. Para este fin, resulta conveniente utilizar la función de Wigner definida en la Sección 3.5 que, como se mencionó antes, provee una descripción completa del estado de un sistema cuántico.

Si procedemos a obtener la función de Wigner (definida en la ecuación 3.148) del estado final de la *ancilla* luego de aplicar el protocolo SM (cuya expresión está dada por la ecuación 4.3), haremos un cambio de variable conveniente $(x, p) \rightarrow (w, \tau)$ para trabajar en las variables naturales del sistema auxiliar. Mientras que la variable w se encuentra relacionada con la diferencia de energía del sistema, la variable τ puede ser asociada con el instante en que se hace la primera interacción entre el sistema y la *ancilla*. Así, se llega a que:

$$\mathcal{W}_{\text{SM}}(w, \tau) \equiv \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle w + \frac{y}{2} \right| \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} \left| w - \frac{y}{2} \right\rangle e^{-i\tau y/\hbar} \quad (4.4)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle w + \frac{y}{2} \right| D_{nm} \rho_{\mathcal{A}} D_{n'm}^\dagger \left| w - \frac{y}{2} \right\rangle e^{-i\tau y/\hbar} \quad (4.5)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle w + \frac{y}{2} - w_{nm} \right| \rho_{\mathcal{A}} \left| w - \frac{y}{2} - w_{n'm} \right\rangle e^{-i\tau y/\hbar} \quad (4.6)$$

donde recordamos que los operadores D_{nm} y $D_{n'm}^\dagger$ realizan un desplazamiento en la variable w . Para poder llevar a cabo la integral, debemos suponer alguna forma para el estado inicial de la *ancilla*. En particular, estudiaremos el caso de un estado inicial gaussiano (o más genérico: un estado *squeezed*). Esta elección no sólo permite el cálculo analítico de las integrales de la función de Wigner, sino que además es interesante desde un punto de vista práctico dado que los estados gaussianos (como los estados coherentes) son una buena descripción del estado de muchos sistemas cuánticos disponibles experimentalmente. Es más, estos estados están entre los más parecidos a estados clásicos y, en particular, tienen una función de Wigner positiva [54]. Esto nos garantizará que cualquier negatividad que aparezca en la función de Wigner del estado final de la *ancilla* se deba exclusivamente al protocolo de medición de trabajo; es decir, a las coherencias que presente el sistema.

Definiremos al estado inicial de la *ancilla* inicial $\rho_{\mathcal{A}}$ como un estado *squeezed* de la forma $|\mu, \sigma\rangle\langle\mu, \sigma|$ tal que:

$$\langle w | \mu, \sigma \rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{(w-\mu)^2}{4\sigma^2}} \quad (4.7)$$

donde μ es el valor medio y σ su dispersión en la variable w . Utilizando esto en la expresión (4.6), obtenemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{\text{SM}}(w, \tau) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \cdot \\ &\quad \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\langle w + \frac{y}{2} - w_{nm} \right| \mu, \sigma \rangle \langle \mu, \sigma | w - \frac{y}{2} - w_{n'm} \right\rangle e^{-i\tau y/\hbar} \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_{\mathcal{S}} \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \cdot \\ &\quad \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{(w+\frac{y}{2}-w_{nm}-\mu)^2}{4\sigma^2}} e^{-\frac{(w-\frac{y}{2}-w_{n'm}-\mu)^2}{4\sigma^2}} e^{-i\tau y/\hbar} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Si particularizamos al caso donde $\mu = 0$:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{\text{SM}}(w, \tau) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \cdot \\ &\quad \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{(w+\frac{y}{2}-w_{nm})^2}{4\sigma^2}} e^{-\frac{(w-\frac{y}{2}-w_{n'm})^2}{4\sigma^2}} e^{-i\tau y/\hbar} \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(w-\frac{w_{nm}+w_{n'm}}{2})^2}{2\sigma^2}} \cdot \\ &\quad \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{[y-(w_{nm}-w_{n'm})]^2}{8\sigma^2}} e^{-i\tau y/\hbar} \end{aligned} \quad (4.11)$$

donde podemos definir:

$$\mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(w-\frac{w_{nm}+w_{n'm}}{2})^2}{2\sigma^2}} \quad (4.12)$$

para ahorrar la escritura de ciertos factores, siendo $\mathcal{N}(w|\mu', \sigma')$ una distribución gaussiana en la variable w con media μ' y dispersión σ' .

Al seguir operando sobre la expresión (4.11):

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{\text{SM}}(w, \tau) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) e^{-\frac{i\tau}{\hbar}(w_{nm}-w_{n'm})} e^{-\frac{2\tau^2\sigma^2}{\hbar^2}} \cdot \\ &\quad \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{[y-(w_{nm}-w_{n'm}-\frac{4i\tau\sigma^2}{\hbar})]^2}{8\sigma^2}} \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) e^{-\frac{i\tau}{\hbar}(w_{nm}-w_{n'm})} \cdot \\ &\quad \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}} e^{-\frac{2\tau^2\sigma^2}{\hbar^2}} \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) \mathcal{N} \left(\tau \left| 0, \frac{\hbar}{2\sigma} \right. \right) \cdot \\ &\quad \cdot e^{-\frac{i\tau}{\hbar}(w_{nm}-w_{n'm})} \end{aligned} \quad (4.15)$$

donde fue definida:

$$\mathcal{N} \left(\tau \left| 0, \frac{\hbar}{2\sigma} \right. \right) \equiv \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}} e^{-\frac{2\tau^2\sigma^2}{\hbar^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi \left(\frac{\hbar}{2\sigma} \right)^2}} e^{-\frac{\tau^2}{2 \left(\frac{\hbar}{2\sigma} \right)^2}} \quad (4.16)$$

siendo $\mathcal{N}(\tau|\mu'', \sigma'')$ una distribución gaussiana en la variable τ con media μ'' y dispersión σ'' .

La última expresión desarrollada en (4.15) podemos reescribirla de otra forma. Notando que:

$$w_{nm} - w_{n'm} = E_{n'} - E_n \quad (4.17)$$

conseguimos que la **distribución WSM** (del inglés: “Wigner-Single Measurement”) quede escrita

como:

$$P_{\text{WSM}}(w, \tau) \equiv \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) \mathcal{N} \left(\tau \left| 0, \frac{\hbar}{2\sigma} \right. \right) \cdot e^{i\tau(E_n - E_{n'})/\hbar} \quad (4.18)$$

Es interesante ver que pudimos dejar a la expresión (4.18) en términos de distribuciones gaussianas \mathcal{N} en las variables w y τ , las cuales representan funciones de probabilidad (son positivas). Esto es consecuencia directa de plantear que el estado inicial de la *ancilla* es *squeezed*. Es más, ambas distribuciones gaussianas poseen diferentes dispersiones y saturan la cota de incertezza de Heisenberg.

Esta distribución $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$ toma valores en los reales debido a que viene de la función de Wigner, por lo que los valores de no-clasicalidad se representarán como negatividades. Está claro que estos términos no serán causados por las distribuciones gaussianas, resultando en que debemos prestar especial atención al factor que involucra la traza y la exponencial imaginaria. Si reescribimos de manera diferente al factor de la traza, nos daremos cuenta que:

$$\text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] = \text{tr} \left[\Pi_{n'} \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho_S \right] \quad (4.19)$$

donde $\tilde{\Pi}_m^{(H)} \equiv \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U}$. Comparando con la Sección 3.3, vemos que el factor de la traza es similar a la cuasi-probabilidad $q_{n'n'm}^{\text{FC}}$ de la distribución FCQ. Ya analizamos esta cuasi-probabilidad en detalle y vimos que puede tomar valores dentro del intervalo $[-1, 1]$, corroborando que las negatividades saldrán (por lo menos) de aquí. Es más, otra similitud que podemos establecer con esta distribución es en cuanto al argumento que presenta la función gaussiana en la variable w en la ecuación (4.18):

$$\frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} = \tilde{E}_m - \frac{E_{n'} + E_n}{2} \quad (4.20)$$

que coincide con los valores que permite tomar el trabajo para la distribución FCQ dada por (3.39), encontrándose en el argumento de la función delta de Dirac.

También, podemos analizar las negatividades que tomará la distribución WSM discriminando los términos diagonales ($n = n'$) de los no-diagonales ($n \neq n'$):

$$P_{\text{WSM}}(w, \tau) = P_{\text{WSM}}^{\text{D}}(w, \tau) + P_{\text{WSM}}^{\text{ND}}(w, \tau) \quad (4.21)$$

donde $P_{\text{WSM}}^{\text{D}}(w, \tau)$ y $P_{\text{WSM}}^{\text{ND}}(w, \tau)$ representan los términos diagonales y no-diagonales, respectivamente, de $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$, siendo los mismos:

$$P_{\text{WSM}}^{\text{D}}(w, \tau) = \sum_{n, m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| w_{nm}, \sigma \right. \right) \mathcal{N} \left(\tau \left| 0, \frac{\hbar}{2\sigma} \right. \right) \quad (4.22)$$

$$P_{\text{WSM}}^{\text{ND}}(w, \tau) = \sum_{n \neq n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) \mathcal{N} \left(\tau \left| 0, \frac{\hbar}{2\sigma} \right. \right) e^{i\tau(E_n - E_{n'})/\hbar} \quad (4.23)$$

Desde acá puede verse mejor que los términos diagonales $P_{\text{WSM}}^{\text{D}}(w, \tau)$ son todos positivos debido a que el factor que involucra a la traza es el mismo que para el protocolo TPM, el cual es positivo por tratarse de una distribución de probabilidad (ver ecuación 1.28). Esto quiere decir que las negatividades que

presente la distribución $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$ serán resultado de los términos no-diagonales del estado ρ_S ; es decir, sus coherencias en energía.

Como vimos en la Sección 3.5, la función de Wigner puede interpretarse como una distribución de cuasi-probabilidad conjunta, ya que sus marginales reproducen correctamente las distribuciones de probabilidad de cada una de sus variables. Lo mismo ocurre con la distribución WSM dada por (4.18). Para obtener sus distribuciones marginales, basta con integrar sobre una de sus variables. Por ejemplo, al integrar en la variable w , obtenemos la distribución de probabilidad $P_T(\tau)$:

$$P_T(\tau) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dw P_{\text{WSM}}(w, \tau) \quad (4.24)$$

$$= \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(\tau \left| 0, \frac{\hbar}{2\sigma} \right. \right) e^{i\tau(E_n - E_{n'})/\hbar} \quad (4.25)$$

$$= \mathcal{N} \left(\tau \left| 0, \frac{\hbar}{2\sigma} \right. \right) \quad (4.26)$$

Es decir, la distribución marginal para la variable τ resulta ser una distribución gaussiana centrada en cero y con dispersión $\hbar/(2\sigma)$. Lo sorprendente de este resultado es que no depende del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ por el que sea gobernada la evolución. Tampoco involucra al estado inicial del sistema ρ_S . Lo único que entra en dependencia es la dispersión σ del sistema auxiliar al inicio de la evolución.

Sin embargo, la distribución marginal que más nos interesa es la que tiene que ver con el trabajo w . Si integramos en la variable τ a la expresión (4.18), obtenemos:

$$P_W(w) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau P_{\text{WSM}}(w, \tau) \quad (4.27)$$

$$= \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \mathcal{N} \left(\tau \left| 0, \frac{\hbar}{2\sigma} \right. \right) e^{i\tau(E_n - E_{n'})/\hbar} \quad (4.28)$$

llegándose a que:

$$P_W(w) = \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.29)$$

A este resultado lo denominamos **distribución WSM de trabajo**. Puede verse que, a diferencia de lo que se obtiene con la otra marginal, esta distribución sí depende del proceso involucrado, el estado inicial del sistema ρ_S , de los *gaps* de energías y la dispersión σ que presente el sistema auxiliar al inicio de la evolución en la variable w . Cabe aclarar que, debido a las propiedades de la función de Wigner, esta distribución es **definida positiva**. Por lo tanto, podemos interpretarla como una *distribución de probabilidad para el trabajo*.

Este último resultado puede parecer raro. A lo largo de este trabajo (en particular, en los Capítulos 1 y 2), mostramos que no es posible dar con una distribución de probabilidad para el trabajo que cumpla con tres requisitos claves: el cumplimiento de la primera ley de la termodinámica, la reproducción de los resultados del protocolo TPM cuando el estado inicial no presenta coherencias y la linealidad de la distribución respecto al estado inicial ρ_S . Por ello, es que tuvimos que abordar el tema con el formalismo

que exhiben las quasi-probabilidades. Ahora bien, resulta que a partir de la distribución WSM, que no es más que una particularización a la función de Wigner para un dado estado, obtenemos una distribución de probabilidad $P_W(w)$ para el trabajo. Claramente, la relación dada en (4.29) cumple con la linealidad en el estado ρ_S , pero se debería corroborar si reproduce los resultados del protocolo TPM para estados sin coherencias al inicio y si verifica la primera ley de la termodinámica. La respuesta que esperamos para esto es que **no** cumpla con al menos una de ellas, según estudiamos en la Sección 2.3. Cabe ahora lugar para el análisis de esta distribución y sus propiedades.

4.1.1. Propiedades generales

Hasta el momento, pudimos verificar una de las propiedades básicas que esperamos que cumpla la distribución dada por (4.29) para ser definida como una apropiada definición de trabajo, y tiene que ver con la linealidad de la frente al estado inicial ρ_S del sistema:

Linealidad de la distribución de probabilidad: Sean ρ_1 y ρ_2 dos matrices de densidad y sea $\alpha \in [0, 1]$, podemos definir entonces una nueva matriz $\rho_S = \alpha\rho_1 + (1 - \alpha)\rho_2$ tal que la distribución WSM de trabajo resulte:

$$P_W[\rho_S] = \alpha P_W[\rho_1] + (1 - \alpha) P_W[\rho_2] \quad (4.30)$$

Es decir, la distribución WSM de trabajo es lineal $\forall \rho_S$ y para todo proceso involucrado.

Proseguiremos con estudiar si la distribución $P_W(w)$ obtenida en (4.29) recupera los resultados del protocolo TPM cuando el estado inicial no presenta coherencias respecto a la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . En otras palabras, se tiene que $[\rho_S, \Pi_n] = [\rho_S, \Pi_{n'}] = 0$. Esto indica que $\rho_S = \bar{\rho}_S$, donde $\bar{\rho}_S \equiv \sum_i \Pi_i \rho_S \Pi_i$ es el estado inicial *dephased*, resultando que $\Pi_n \bar{\rho}_S \Pi_{n'} = 0$ para $n \neq n'$. Con esto, podemos ver que:

$$P_W(w|\rho_S = \bar{\rho}_S) = \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \bar{\rho}_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.31)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \bar{\rho}_S \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} (w|w_{nm}, \sigma) \quad (4.32)$$

$$\xrightarrow{\sigma \rightarrow 0} \sum_{n,m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \bar{\rho}_S \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] \delta(w - w_{nm}) = P_{\text{TPM}}(w) \quad \checkmark \quad (4.33)$$

Es decir, la distribución WSM de trabajo reproduce los resultados del protocolo TPM (ver ecuación 1.28) únicamente cuando la dispersión $\sigma \rightarrow 0$; es decir, donde la distribución gaussiana en este límite es tratada como una función delta de Dirac. Esto logra inferir que el parámetro de dispersión σ es más relevante de lo que pensamos para nuestro protocolo, ya que, dependiendo del valor que utilicemos, podremos recuperar los resultados del protocolo TPM o no.

Resulta interesante ver que, inclusive, para estados donde ρ_S presenta coherencias en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H , el límite de dispersión $\sigma \rightarrow 0$ también devuelve el resultado

del protocolo TPM (el cual no reproduce el valor medio de diferencia de energía correcto):

$$P_W(w) = \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.34)$$

$$\xrightarrow{\sigma \rightarrow 0} \sum_{n,m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] \delta(w - w_{nm}) = P_{\text{TPM}}(w) \quad \forall \rho_S \quad (4.35)$$

Esto es debido a la relación entre los valores de σ y la diferencia $(E_n - E_{n'}) \forall n \neq n'$ en la exponencial real; los términos por fuera de la diagonal tendrán mayor o menor peso en función de esto (es decir, serán más notorios los efectos de coherencia). En el límite donde $8\sigma^2 \ll (E_n - E_{n'})^2 \forall n \neq n'$ (o sino $\sigma \rightarrow 0$), la dispersión es mucho menor a los *gaps* que presenta el Hamiltoniano inicial H , resultando en que los términos no-diagonales caigan exponencialmente, coincidiendo bastante bien con los resultados que se obtendrían del protocolo TPM. Si analizamos en detalle esta situación, el sistema auxiliar correspondiente sería un estado puro bien localizado en la variable w , que es exacto al ejemplo desarrollado en la Sección 2.2.2 donde habíamos recuperado la distribución del protocolo TPM. Es decir, con esto acabamos de obtener un resultado que ya conocíamos de antemano. En conclusión a este primer análisis, podemos enunciar que:

Recuperación de los teoremas de fluctuación: La distribución WSM de trabajo recupera la distribución de probabilidad del protocolo TPM, junto a todos sus resultados, cuando la dispersión $\sigma \rightarrow 0$:

$$P_W(w) \xrightarrow{\sigma \rightarrow 0} P_{\text{TPM}}(w) \quad (4.36)$$

verificándose $\forall \rho_S$ y para todo proceso involucrado. En particular, se cumple para aquellos estados que $\rho_S = \bar{\rho}_S$.

Otra característica importante para estudiar es el valor medio que se obtiene con la distribución WSM de trabajo y compararlo con la variación de energía media del sistema; es decir, el cumplimiento de la primera ley. Recordemos que la misma implica que:

$$\langle W \rangle = \text{tr}[\tilde{H} \mathcal{U} \rho_S \mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H \rho_S] \equiv \langle \Delta E \rangle \quad (4.37)$$

Al hacer esto con la distribución WSM de trabajo, vemos que resulta:

$$\langle W \rangle_{\text{WSM}} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dw w P_W(w) \quad (4.38)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dw w \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) \quad (4.39)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.40)$$

por lo que no coincide con el valor medio de la diferencia de energía establecido en (4.37). Sin embargo, es curioso analizar ciertos casos relevantes a esta última expresión. Si se quiere particularizar para aquellos sistemas que inicialmente son diagonales en la base de autoestados del Hamiltoniano H , entonces $\rho_S = \bar{\rho}_S$ que satisface $\Pi_n \bar{\rho}_S \Pi_{n'} = 0$ para $n \neq n'$. Aquí, sólo sobreviven aquellos términos donde $n = n'$,

resultando que la exponencial real de la expresión (4.40) sea igual a 1. Así:

$$\langle W \rangle_{\text{WSM}} \Big|_{\rho_S = \bar{\rho}_S} = \sum_{n,m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \bar{\rho}_S \Pi_n \mathcal{U}^\dagger \right] w_{nm} \quad (4.41)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \bar{\rho}_S \mathcal{U}^\dagger \right] (\tilde{E}_m - E_n) \quad (4.42)$$

$$= \text{tr}[\tilde{H} \mathcal{U} \bar{\rho}_S \mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H \bar{\rho}_S] = \langle \Delta E \rangle \Big|_{\rho_S = \bar{\rho}_S} \quad \checkmark \quad \forall \rho_S = \bar{\rho}_S \quad (4.43)$$

Por lo tanto, a pesar de la expresión obtenida en (4.40), vemos que para estados ρ_S que no presentan coherencias en el estado inicial la primera ley satisface, sin importar el proceso ni el valor de la dispersión σ . Otro caso que es interesante de analizar sucede cuando $\sigma \rightarrow \infty$. Aquí, el valor medio de trabajo para la expresión (4.40) resulta:

$$\langle W \rangle_{\text{WSM}} \xrightarrow{\sigma \rightarrow \infty} \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} \quad (4.44)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \left(\tilde{E}_m - \frac{1}{2} E_n - \frac{1}{2} E_{n'} \right) \quad (4.45)$$

$$= \text{tr}[\tilde{H} \mathcal{U} \rho_S \mathcal{U}^\dagger] - \text{tr}[H \rho_S] = \langle \Delta E \rangle \quad \checkmark \quad \forall \rho_S \quad (4.46)$$

que coincide con el valor medio de la diferencia de energía del sistema de la ecuación (4.37). Es decir, la relación entre la dispersión σ y la diferencia $(E_n - E_{n'}) \forall n \neq n'$ vuelve a tomar un rol fundamental pero, en este caso, para recuperar la primera ley. En el límite donde $8\sigma^2 \gg (E_n - E_{n'})^2 \forall n \neq n'$ (o sino $\sigma \rightarrow \infty$), la dispersión es mucho mayor a los *gaps* que presenta el Hamiltoniano inicial H , resultando en que los términos no-diagonales sean pesados de igual manera frente a los términos diagonales. Esto resulta en un estado auxiliar inicial puro bien localizado en la variable τ . Por lo tanto, se tiene que:

Cumplimiento de la primera ley: Cuando el estado ρ_S es diagonal en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H (es decir, $[\rho_S, H] = 0$), entonces la distribución WSM de trabajo recupera la variación media de energía $\forall \sigma$ y para todo proceso. En cambio, si el estado ρ_S presenta coherencias en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H (es decir, $[\rho_S, H] \neq 0$), la distribución WSM de trabajo recupera el valor medio de la diferencia de energía únicamente en el límite $\sigma \rightarrow \infty$, para todo proceso involucrado.

Con estos resultados, podemos ver que la distribución de trabajo WSM **no** logra cumplir, al mismo tiempo, la primera ley de la termodinámica y la reproducción de los resultados del protocolo TPM cuando el estado inicial no presenta coherencias (como ya habíamos anticipado). Esto ocurre porque para ambos fenómenos se deben utilizar distintos límites de la dispersión σ (la recuperación de los teoremas de fluctuación en $\sigma \rightarrow 0$ y la primera ley en $\sigma \rightarrow \infty$). Sin embargo, esta distribución WSM de trabajo definida en (4.29) resulta ser muy interesante por poseer toda esta información con la modificación del parámetro σ . Además, resulta sorprendente que para obtener cada uno de estos resultados deba utilizarse como *ancilla* estados puros bien definidos, pero en variables distintas.

Este último análisis logra concebir a σ como un parámetro libre donde, dependiendo del valor que adopte, tendremos diferentes distribuciones que coincidirán mejor o no con los resultados del protocolo

TPM y la variación media de energía. Una analogía puede establecerse con la distribución “ q -class” (ver Sección 3.1.2) donde se tiene el parámetro libre $q \in [0, 1/2]$ con el que se obtienen distintas distribuciones de cuasi-probabilidad. La diferencia fundamental es que, sin importar el valor que tomase q , la distribución resultante logra reproducir los teoremas de fluctuación y la primera ley de la termodinámica.

Otra forma de calcular el valor medio de variación de energía es a través del estudio sobre la línea $\tau = 0$ y calculando el valor medio de trabajo sobre esta línea. Es decir, mediante el cálculo:

$$\langle w \rangle_{\tau=0} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dw w \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \delta(\tau) P_{\text{WSM}}(w, \tau) \quad (4.47)$$

Notar que no se trata de una marginalización sobre la variable τ , sino que es utilizada la función delta de Dirac para únicamente visualizar la condición de $\tau = 0$ en la distribución $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$. Usando la expresión dada por (4.18), esto implica:

$$\langle w \rangle_{\tau=0} = \int_{-\infty}^{+\infty} dw w P_{\text{WSM}}(w, 0) \quad (4.48)$$

$$= \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \mathcal{N} \left(0 \middle| 0, \frac{\hbar}{2\sigma} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dw w \mathcal{N} \left(w \middle| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right) \quad (4.49)$$

$$= \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}} \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} \quad (4.50)$$

en donde fue utilizado que $\mathcal{N}(0|0, \frac{\hbar}{2\sigma}) = \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}}$. Si seguimos operando sobre esta última expresión, resulta que:

$$\boxed{\langle w \rangle_{\tau=0} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sigma}{\hbar} \langle \Delta E \rangle} \quad (4.51)$$

Esto muestra que la magnitud $\langle w \rangle_{\tau=0}$ se encuentra relacionada directamente (por medio de una constante multiplicativa) con la variación de energía media del sistema $\langle \Delta E \rangle$. Notar que resulta ser independiente del proceso y del estado ρ_S al inicio de la evolución.

Cuando se quieren estudiar las fluctuaciones de trabajo, podemos relacionarlas con el segundo momento en la variable w de la distribución WSM de trabajo $P_W(w)$. De esta manera, podemos ver si coincide con el segundo momento de la variación media de energía. Es decir, ver si se cumple:

$$\langle W^2 \rangle = \text{tr}[(\tilde{H}^{(H)} - H)^2 \rho] \equiv \langle (\Delta E)^2 \rangle \quad (4.52)$$

donde definimos $\tilde{H}^{(H)} \equiv \mathcal{U}^\dagger \tilde{H} \mathcal{U}$ al Hamiltoniano final \tilde{H} en representación de Heisenberg. Haciendo esto para la distribución WSM de trabajo definida en (4.29), tenemos que:

$$\langle W^2 \rangle_{\text{WSM}} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dw w^2 P_W(w) \quad (4.53)$$

$$= \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dw w^2 \mathcal{N} \left(w \middle| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right) \quad (4.54)$$

Luego, usando que el segundo momento de una distribución gaussiana $\mathcal{N}(x|\mu, \sigma)$ con variable aleatoria

x , media μ y dispersión σ es:

$$\langle x^2 \rangle_{\mathcal{N}} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \mathcal{N}(x|\mu, \sigma) = \mu^2 + \sigma^2 \quad (4.55)$$

tenemos que la expresión (4.54) se convierte en:

$$\langle W^2 \rangle_{\text{WSM}} = \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \left[\left(\frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} \right)^2 + \sigma^2 \right] \quad (4.56)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \left(\frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} \right)^2 e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} + \sigma^2 \quad (4.57)$$

viendo que no cumple la relación (4.52). Notar que, luego de realizar la distributiva, el segundo término se reduce a σ^2 cuando se suma sobre todos los índices. Es curioso ver que la dispersión σ del sistema auxiliar influye en la dispersión de los valores de trabajo. Podría no resultar tan sorprendente debido a que este parámetro tiene gran influencia inclusive en el primer momento de la distribución (la variación de energía). Sin embargo, puede recuperarse el segundo momento en la variación de energía si se reescribe la ecuación (4.57) como:

$$\langle W^2 \rangle_{\text{WSM}} - \sigma^2 = \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \left(\frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} \right)^2 e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.58)$$

$$\xrightarrow{\sigma \rightarrow \infty} \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] \left(\tilde{E}_m - \frac{1}{2}E_n - \frac{1}{2}E_{n'} \right)^2 \quad (4.59)$$

$$= \text{tr}[(\tilde{H}^{(H)} - H)^2 \rho] = \langle (\Delta E)^2 \rangle \quad \checkmark \quad (4.60)$$

Por lo tanto, la distribución WSM de trabajo contiene la información del segundo momento de la variación de energía en el límite de dispersión $\sigma \rightarrow \infty$ (con un *offset* σ^2); notar que, en este límite, también recuperamos la primera ley para todo sistema cuántico y proceso, como fue visto en (4.46).

Como última propiedad relevante, analizaremos la función característica $\zeta_{\text{WSM}}(u)$ de la distribución WSM de trabajo dada por (4.29). Recordemos que puede definirse a partir de la transformada inversa de Fourier:

$$\zeta_{\text{WSM}}(u) \equiv \langle e^{iuw} \rangle_{\text{WSM}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dw P_{\text{W}}(w) e^{iuw} \quad (4.61)$$

De esta manera, obtenemos que:

$$\zeta_{\text{WSM}}(u) = \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dw \mathcal{N} \left(w \left| \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2}, \sigma \right. \right) e^{iuw} \quad (4.62)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} e^{iu \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} - \frac{1}{2}\sigma^2 u^2} \quad (4.63)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[e^{iu\tilde{E}_m} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} e^{-iuE_n/2} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} e^{-iuE_{n'}/2} \mathcal{U}^\dagger \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 u^2} \quad (4.64)$$

$$= \sum_{n,n'} \text{tr} \left[e^{iu\tilde{H}} \mathcal{U} e^{-iuH/2} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} e^{-iuH/2} \mathcal{U}^\dagger \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 u^2} \quad (4.65)$$

A partir de ella, es posible recuperar los k -momentos de la distribución $P_W(w)$. Usando la relación (4.63), tenemos que:

$$\langle W^k \rangle_{\text{WSM}} \equiv \frac{1}{i^k} \frac{\partial^k \zeta_{\text{WSM}}}{\partial u^k} \Big|_{u=0} \quad (4.66)$$

$$= \frac{1}{i^k} \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \rho_S \Pi_{n'} \mathcal{U}^\dagger \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \frac{\partial^k}{\partial u^k} \left(e^{iu \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} - \frac{1}{2}\sigma^2 u^2} \right) \Big|_{u=0} \quad (4.67)$$

donde para $k = 1$ y $k = 2$ recuperamos los resultados obtenidos en (4.40) y (4.56), respectivamente.

A continuación, estudiaremos dos situaciones que serán relevantes cuando queramos estudiar la dinámica de la distribución WSM. Una de ellas estará relacionada con los procesos que pasan por sucesivos estados de equilibrio, lográndose a través de evoluciones que sean cuasiestáticas. Por otro lado, nos interesarán los procesos en *time-reversal*; es decir, la dinámica del proceso si “pasamos la película hacia atrás”.

4.1.2. Comportamiento adiabático

En el Capítulo 1 fuimos capaces de asentar las bases necesarias para el desarrollo de todo este trabajo. Entre los temas tratados, nos enfocamos tanto en procesos fuera del equilibrio (mediante los teoremas de fluctuación) como en aquellos que se realizan de manera cuasiestática y pasan, instante a instante, por sucesivos estados de equilibrio. El teorema adiabático (Sección 1.3) nos ofrece una forma de identificar cuándo podemos hablar de evoluciones que se realizan de manera *suficientemente lenta* que logran este cometido (límite adiabático).

Además, una revelación de la Sección 1.3.2 fue que el protocolo TPM reproduce el valor medio de la diferencia de energía cuando la evolución alcanza el límite adiabático, independientemente de si el sistema presenta coherencias o no respecto a la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . De esta manera, nos parece relevante identificar cómo es el comportamiento adiabático del valor medio de trabajo en la distribución WSM, dada por la ecuación (4.40).

Para ello, expresaremos a la base de autoestados del Hamiltoniano dependiente del tiempo $\mathcal{H}(t)$ que dirige la dinámica del sistema como $|n(t)\rangle$; en particular, denotaremos $|n\rangle \equiv |n(0)\rangle$ y $|\tilde{n}\rangle \equiv |n(T)\rangle$. Por lo cual, quedan expresados los proyectores $\Pi_n = |n\rangle\langle n|$ y $\tilde{\Pi}_m = |\tilde{n}\rangle\langle \tilde{n}|$. Además, escribiremos nuestra matriz densidad inicial en la base de autoestados de H como $\rho_S = \sum_{k,l} c_{kl} |k\rangle\langle l|$, dando la posibilidad de que ρ_S presente coherencias en el estado inicial. Con todo esto, tenemos que, a partir de la ecuación (4.40), el valor medio de trabajo para la distribución WSM es:

$$\langle W \rangle_{\text{WSM(ad)}} = \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[|\tilde{n}\rangle\langle \tilde{n}| \mathcal{U} |n\rangle\langle n| \sum_{k,l} c_{kl} |k\rangle \underbrace{\langle l|n'\rangle}_{=\delta_{ln'}} \langle n'| \mathcal{U}^\dagger \right] \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.68)$$

$$= \sum_{n, n', m, k} \text{tr} \left[c_{kn'} |\tilde{n}\rangle\langle \tilde{n}| \mathcal{U} |n\rangle \underbrace{\langle n|k\rangle}_{=\delta_{nk}} \langle n'| \mathcal{U}^\dagger \right] \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.69)$$

$$= \sum_{n, n', m} \text{tr} \left[c_{nn'} |\tilde{n}\rangle\langle \tilde{n}| \mathcal{U} |n\rangle\langle n'| \mathcal{U}^\dagger \right] \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.70)$$

Luego, en el régimen adiabático, instante a instante el sistema se queda en un autoestado del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$. Por lo cual, se tiene que $\mathcal{U}|n\rangle = |\tilde{n}\rangle$. Entonces:

$$\langle W \rangle_{\text{WSM(ad)}} = \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[c_{nn'} |\tilde{m}\rangle \langle \tilde{m}| \underbrace{\mathcal{U}|n\rangle}_{=|\tilde{n}\rangle} \underbrace{\langle n'| \mathcal{U}^\dagger}_{=\langle \tilde{n}'|} \right] \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.71)$$

$$= \sum_{n,n',m} \text{tr} \left[c_{nn'} |\tilde{m}\rangle \langle \tilde{m}| \underbrace{\langle \tilde{n}|}_{=\delta_{mn}} \right] \frac{w_{nm} + w_{n'm}}{2} e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.72)$$

$$= \text{tr} \left[\sum_{n,n'} c_{nn'} |\tilde{n}\rangle \langle \tilde{n}'| \right] \frac{w_{nn} + w_{n'n}}{2} e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.73)$$

$$= \sum_n \underbrace{c_{nn}}_{=\langle n|\rho|n\rangle} w_{nn} = \sum_n \langle n|\rho|n\rangle w_{nn} = \langle \Delta E \rangle_{\text{(ad)}} \quad \checkmark \quad (4.74)$$

que resulta ser el mismo resultado al que converge la energía $\langle \Delta E \rangle_{\text{(ad)}}$ en el límite adiabático, mostrado en la relación (1.88). Esto significa que tanto la variación media de energía, como el valor medio de trabajo en el protocolo TPM y en la distribución WSM coinciden en el límite adiabático. Es más, este resultado no solo coincide en el final de la evolución, sino que lo hace instante a instante mientras se efectúa el proceso. Daría a entender que las coherencias no toman rol alguno para la distribución WSM en el régimen adiabático, tal como sucedía para el protocolo TPM y con el valor medio de energía.

4.1.3. Distribución WSM de trabajo en *time-reversal*

Como hemos hecho ya reiteradas veces para casos análogos, queremos estudiar la distribución WSM de trabajo cuando se realiza el protocolo inverso. Es decir, queremos ver la dinámica del sistema cuando “pasamos la película hacia atrás”. A este proceso le hemos denominado como *time-reversal*.

Para esto, debemos asegurarnos de que la evolución inicie con el Hamiltoniano \tilde{H} y finalice con el Hamiltoniano H . Consecuentemente, el valor de la primera medición de energía estaría dado por cierto resultado \tilde{E}_m y asociado a su respectivo proyector $\tilde{\Pi}_m$. Posteriormente, se haría *involucionar* y la segunda medición de energía se daría con cierto resultado E_n , asociado a su respectivo proyector Π_n . Además, el estado inicial del sistema correspondería a $\rho_S^* = \mathcal{U}\rho_S\mathcal{U}^\dagger$. Por lo tanto, a la expresión de la distribución de probabilidad de la distribución WSM de trabajo dada por (4.29) se le deben realizar las siguientes modificaciones:

$$\begin{array}{ll} \rho_S \longrightarrow \mathcal{U}\rho_S\mathcal{U}^\dagger & \mathcal{U} \longleftrightarrow \mathcal{U}^\dagger \\ \Pi_n \longleftrightarrow \tilde{\Pi}_m & E_n \longleftrightarrow \tilde{E}_m \end{array}$$

Así, conseguimos que la distribución WSM de trabajo en *time-reversal* $P_W^*(-w)$ resulte ser:

$$P_W^*(-w) \equiv \sum_{m,m',n} \text{tr} \left[\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \rho_S \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_{m'} \mathcal{U} \right] \mathcal{N} \left(-w \left| \frac{w_{mn} + w_{m'n}}{2}, \sigma \right. \right) e^{-\frac{(\tilde{E}_m - \tilde{E}_{m'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.75)$$

$$P_W^*(-w) = \sum_{m,m',n} \text{tr} \left[\Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho_S \tilde{\Pi}_{m'}^{(H)} \right] \mathcal{N} \left(-w \left| \frac{w_{mn} + w_{m'n}}{2}, \sigma \right. \right) e^{-\frac{(\tilde{E}_m - \tilde{E}_{m'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.76)$$

donde $\tilde{\Pi}_m^{(H)} \equiv \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U}$. Puede verse que no coinciden las expresiones dadas para la distribución WSM de trabajo (4.29) y su misma expresión en *time-reversal* (4.76). Con esto, podemos concluir que **la distribución WSM de trabajo en *time-reversal* no coincide con la distribución WSM de trabajo original**.

Podemos llevar a cabo un análisis similar al hecho para la distribución WSM de trabajo. Por ejemplo, si tomamos el límite $\sigma \rightarrow 0$ para la distribución *time-reversal* dada por (4.76), los términos no-diagonales ($m \neq m'$) caerán exponencialmente y solo sobrevivirán los términos diagonales ($m = m'$). Por otro lado, la función gaussiana pasará a ser una función delta de Dirac. Todo esto da indicio a que recuperaremos la distribución *time-reversal* del protocolo TPM:

$$P_W^*(-w) = \sum_{m,m',n} \text{tr} \left[\Pi_n \tilde{\Pi}_m^{(H)} \rho_S \tilde{\Pi}_{m'}^{(H)} \right] \mathcal{N} \left(-w \left| \frac{w_{mn} + w_{m'n}}{2}, \sigma \right. \right) e^{-\frac{(\tilde{E}_m - \tilde{E}_{m'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.77)$$

$$\xrightarrow{\sigma \rightarrow 0} \sum_{m,n} \text{tr} \left[\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \rho_S \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \right] \delta(-w - w_{mn}) \quad (4.78)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr} [\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \rho_S^* \tilde{\Pi}_m \mathcal{U}] \delta \left(-w - (E_n - \tilde{E}_m) \right) \equiv P_{\text{TPM}}^*(-w) \quad \checkmark \quad (4.79)$$

que puede ser comparada con la expresión (1.62). Esto ocurre independientemente del proceso llevado a cabo y del sistema ρ_S . Notar que la condición $\sigma \rightarrow 0$ quiere decir que se cumple el límite $8\sigma^2 \ll (\tilde{E}_m - \tilde{E}_{m'})^2 \forall m \neq m'$, donde el *gap* con que debe compararse la dispersión σ es ahora respecto al del Hamiltoniano \tilde{H} (ya que, en el protocolo inverso, \tilde{H} es ahora el Hamiltoniano inicial).

Por otro lado, podemos ver qué se obtiene al calcular el primer momento relacionado a la distribución WSM en *time-reversal*. Para esto, nos referiremos a $w^* \equiv -w$ para evitar confusiones con la notación. Así, tenemos que:

$$\langle W \rangle_{\text{WSM}}^* \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dw^* w^* P_W^*(w^*) \quad (4.80)$$

$$= \sum_{m,m',n} \text{tr} \left[\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \rho_S^* \tilde{\Pi}_{m'} \mathcal{U} \right] e^{-\frac{(\tilde{E}_m - \tilde{E}_{m'})^2}{8\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dw^* w^* \mathcal{N} \left(w^* \left| \frac{w_{mn} + w_{m'n}}{2}, \sigma \right. \right) \quad (4.81)$$

$$= \sum_{m,m',n} \text{tr} \left[\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \rho_S^* \tilde{\Pi}_{m'} \mathcal{U} \right] \frac{w_{mn} + w_{m'n}}{2} e^{-\frac{(\tilde{E}_m - \tilde{E}_{m'})^2}{8\sigma^2}} \quad (4.82)$$

que resulta ser una expresión muy similar a la obtenida en (4.40) del protocolo directo. Si queremos particularizar este valor medio de trabajo obtenido en el proceso inverso al caso donde la dispersión $\sigma \rightarrow \infty$, vemos que:

$$\langle W \rangle_{\text{WSM}}^* \xrightarrow{\sigma \rightarrow \infty} \sum_{m,m',n} \text{tr} \left[\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \rho_S^* \tilde{\Pi}_{m'} \mathcal{U} \right] \frac{w_{mn} + w_{m'n}}{2} \quad (4.83)$$

$$= \sum_{m,m',n} \text{tr} \left[\Pi_n \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \rho_S \mathcal{U}^\dagger \tilde{\Pi}_{m'} \mathcal{U} \right] \left(E_n - \frac{1}{2} \tilde{E}_m - \frac{1}{2} \tilde{E}_{m'} \right) \quad (4.84)$$

$$= \text{tr} [H \rho_S] - \text{tr} [\tilde{H} \mathcal{U} \rho_S \mathcal{U}^\dagger] = -\langle \Delta E \rangle \quad \checkmark \quad \forall \rho_S \quad (4.85)$$

que coincide con el valor medio de la diferencia de energía del sistema de la ecuación (4.37) pero en signo opuesto. Es decir, se trataría de un proceso en donde el intercambio de energía obtenido luego es perdido (o viceversa). Aquí, la condición $\sigma \rightarrow \infty$ hace referencia a que se cumple el límite $8\sigma^2 \gg (\tilde{E}_m - \tilde{E}_{m'})^2 \ \forall m \neq m'$.

4.2. Dinámica de la distribución WSM en un sistema de dos niveles

Hasta aquí hemos desarrollado las propiedades y características más importantes que interesan para la distribución $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$ y su marginal de trabajo $P_{\text{W}}(w)$ en el contexto de la mecánica cuántica para sistemas aislados. En lo que sigue, expondremos el estudio de un sistema de dos niveles para evidenciar los resultados y conclusiones hechos para estas distribuciones.

Consideraremos un sistema cuántico de dos niveles $\{|e\rangle, |g\rangle\}$ donde $|e\rangle$ describe el estado excitado (*excited*) y $|g\rangle$ describe el estado fundamental (*ground*) en la base que diagonaliza a la matriz de Pauli σ_z . El Hamiltoniano $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\lambda(t))$ depende del tiempo a través de un **protocolo** $\lambda \equiv \lambda(t)$ (que supondremos que se trata de una función continua) que realiza trabajo sobre el sistema y que podemos controlar externamente. Inicialmente, a $t = 0$, el sistema se encuentra en un estado descrito por ρ_S . Luego, se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. Más allá de la dependencia de λ , diremos que el sistema está aislado, por lo que evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (siendo t_0 un parámetro fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (4.86)$$

Además, con el propósito de simplificar la notación, llamaremos $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(T))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$. Vamos a asociarles espectros de energías $\{E_n\}$ y $\{\tilde{E}_m\}$ a estos Hamiltonianos H, \tilde{H} , de manera que podemos escribirlos como:

$$H = \sum_n E_n \Pi_n \quad , \quad \tilde{H} = \sum_m \tilde{E}_m \tilde{\Pi}_m \quad (4.87)$$

siendo Π_n y $\tilde{\Pi}_m$ los proyectores de H y \tilde{H} , respectivamente. Queda claro que, en general, podemos escribir el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ como:

$$\mathcal{H}(t) = \sum_i E_i(t) \Pi_i(t) \quad (4.88)$$

donde es inmediato que, relacionando la notación usada para H y \tilde{H} , se tiene que $E_i(0) = E_i$, $E_i(T) = \tilde{E}_i$, $\Pi_i(0) = \Pi_i$ y $\Pi_i(T) = \tilde{\Pi}_i$.

El Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ que proponemos para el estudio del sistema será uno que depende del protocolo λ de la forma:

$$\mathcal{H}(t) = (1 - \lambda)H + \lambda \tilde{H} \quad (4.89)$$

donde consideraremos que $\lambda(0) = 0$ y $\lambda(T) = 1$ para que se cumpla la condición $H = \mathcal{H}(\lambda(0))$ y $\tilde{H} = \mathcal{H}(\lambda(T))$. Optaremos para que H, \tilde{H} sean proporcionales a alguna de las matrices de Pauli y se respetará que el *gap* de \tilde{H} sea el doble del que presenta H . En particular, tomamos el caso donde

$H \propto \sigma_z$ y $\tilde{H} \propto \sigma_x$:

$$H = E\sigma_z \quad , \quad \tilde{H} = 2E\sigma_x \quad \text{con} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} , \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.90)$$

siendo E un valor real. Así, tenemos que el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ es:

$$\mathcal{H}(t) = E(1 - \lambda)\sigma_z + 2E\lambda\sigma_x \quad (4.91)$$

o sino, escrito en su forma matricial:

$$\mathcal{H}(t) = \begin{pmatrix} E(1 - \lambda) & 2E\lambda \\ 2E\lambda & -E(1 - \lambda) \end{pmatrix} \quad (4.92)$$

4.2.1. Caracterización del sistema

Podemos obtener el espectro de energías $\{E_i(t)\}$ para nuestro Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ dependiente del tiempo buscando los autovalores de la expresión matricial (4.92):

$$\det [\mathcal{H}(t) - E(t)\mathbb{I}] = \det \begin{pmatrix} E(1 - \lambda) - E(t) & 2E\lambda \\ 2E\lambda & -E(1 - \lambda) - E(t) \end{pmatrix} \quad (4.93)$$

Con esto, obtenemos que:

$$0 = -[E(1 - \lambda) - E(t)][E(1 - \lambda) + E(t)] - 4E^2\lambda^2 \quad (4.94)$$

$$= -[E^2(1 - \lambda)^2 - E^2(t)] - 4E^2\lambda^2 \quad (4.95)$$

$$= E^2(t) - E^2[1 - 2\lambda + 5\lambda^2] \quad (4.96)$$

teniéndose que el espectro de energía $\{E_i(t) \equiv E_{\pm}(t)\}$ es:

$$E(t) = \pm E\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} \equiv E_{\pm}(t) \quad (4.97)$$

o sino, de manera más compacta, definiendo:

$$f(\lambda) \equiv 5\lambda^2 - 2\lambda + 1 \quad (4.98)$$

podemos reescribir a la expresión (4.97) como:

$$\boxed{E_{\pm}(t) = \pm E\sqrt{f(\lambda)}} \quad (4.99)$$

Se puede interpretar al factor $\sqrt{f(\lambda)}$ que acompaña al valor E como aquel que modifica los posibles valores de energía del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ tiempo a tiempo. Además, resulta que:

$$f(\lambda) > 0 \quad (4.100)$$

para todo protocolo $\lambda \equiv \lambda(t)$ que se elija y, por lo tanto, resulta estar bien definido cada valor de energía de $\mathcal{H}(t) \forall t \in [0, T]$.

Verifiquemos que recuperamos lo esperado para la expresión (4.97) en los límites de tiempo del intervalo $[0, T]$. Cuando $t = 0$, esperamos que los autovalores de energía correspondan a $E_{\pm}(0) = \pm E$ debido a que $\mathcal{H}(0) = E\sigma_z$. Para corroborar esto, sabiendo que nuestro protocolo cumple $\lambda(0) = 0$, entonces:

$$E_{\pm}(0) = \pm E\sqrt{5\lambda^2(0) - 2\lambda(0) + 1} = \pm E\sqrt{0 - 0 + 1} \quad (4.101)$$

$$= \pm E \quad \checkmark \quad (4.102)$$

Lo mismo podemos hacer para $t = T$ donde $E_{\pm}(T) = \pm 2E$ debido a que $\mathcal{H}(T) = 2E\sigma_x$; sabiendo que nuestro protocolo cumple $\lambda(T) = 1$:

$$E_{\pm}(T) = \pm E\sqrt{5\lambda^2(T) - 2\lambda(T) + 1} = \pm E\sqrt{5 - 2 + 1} \quad (4.103)$$

$$= \pm 2E \quad \checkmark \quad (4.104)$$

También, podemos obtener los autoestados instantáneos $|\pm(t)\rangle$ de nuestro sistema correspondientes a los valores de energías $E_{\pm}(t)$. Resolviendo el sistema de autovectores (soluciones no triviales) para el caso de energía $E_+(t)$, tenemos que:

$$\begin{pmatrix} E \left[1 - \lambda - \sqrt{f(\lambda)} \right] & 2E\lambda \\ 2E\lambda & -E \left[1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)} \right] \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{2\lambda}{1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)}} \end{pmatrix} \quad (4.105)$$

que, normalizando, obtenemos:

$$|+(t)\rangle = \sqrt{\frac{1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)}}{2\sqrt{f(\lambda)}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{2\lambda}{1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)}} \end{pmatrix} \quad (4.106)$$

De la misma manera, resolviendo el sistema de autovectores para el caso donde la energía es $E_-(t)$, llegamos a:

$$|-(t)\rangle = \sqrt{\frac{1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)}}{2\sqrt{f(\lambda)}}} \begin{pmatrix} -\frac{2\lambda}{1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.107)$$

Puede mostrarse que la expresión:

$$1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)} > 0 \quad (4.108)$$

para todo protocolo $\lambda \equiv \lambda(t)$ que se elija y, por lo tanto, resulta estar bien definido cada autoestado del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$.

Verifiquemos que se cumple lo esperado para (4.106) y (4.107) en los límites de tiempo del intervalo $[0, T]$. Cuando $t = 0$, los autoestados $|\pm(0)\rangle$ deben coincidir con los autoestados $\{|e\rangle, |g\rangle\}$ de σ_z debido a que $\mathcal{H}(0) = E\sigma_z$ donde, en particular, $|+(0)\rangle = |e\rangle$ y $|-(0)\rangle = |g\rangle$. Sabiendo que nuestro protocolo

cumple $\lambda(0) = 0$:

$$|+(0)\rangle = \sqrt{\frac{1-0+\sqrt{1}}{2\sqrt{1}}}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{0}{1-0+\sqrt{1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |e\rangle \quad \checkmark \quad (4.109)$$

$$|-(0)\rangle = \sqrt{\frac{1-0+\sqrt{1}}{2\sqrt{1}}}\begin{pmatrix} \frac{0}{1-0+\sqrt{1}} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |g\rangle \quad \checkmark \quad (4.110)$$

Luego, a tiempo $t = T$ nuestros autoestados $|\pm(T)\rangle$ deben ser los autoestados de σ_x debido a que $\mathcal{H}(T) = 2E\sigma_x$. Sabiendo que nuestro protocolo cumple $\lambda(T) = 1$, entonces:

$$|+(T)\rangle = \sqrt{\frac{1-1+\sqrt{4}}{2\sqrt{4}}}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{2}{1-1+\sqrt{4}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{|e\rangle + |g\rangle}{\sqrt{2}} \quad \checkmark \quad (4.111)$$

$$|-(T)\rangle = \sqrt{\frac{1-1+\sqrt{4}}{2\sqrt{4}}}\begin{pmatrix} -\frac{2}{1-1+\sqrt{4}} \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = -\frac{|e\rangle - |g\rangle}{\sqrt{2}} \quad \checkmark \quad (4.112)$$

recuperando así lo deseado.

Habiendo definido los autovalores de energía $E_{\pm}(t)$ en la relación (4.97) para el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$, podemos obtener los valores de trabajo del sistema en función del tiempo $w(t)$. A tratarse de un sistema de dos niveles, *a priori* tendremos cuatro valores distintos de trabajo $w_{\pm\pm}(t) \equiv E_{\pm}(t) - E_{\pm}(0)$. Sabiendo que $E_{\pm}(0) = \pm E$, tenemos que:

$$\begin{aligned} w_{++}(t) &= E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} - 1 \right] \\ w_{+-}(t) &= E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} + 1 \right] \\ w_{-+}(t) &= -E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} + 1 \right] = -w_{+-}(t) \\ w_{--}(t) &= -E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} - 1 \right] = -w_{++}(t) \end{aligned} \quad (4.113)$$

donde se evidencia que $w_{--}(t) = -w_{++}(t)$ y $w_{+-}(t) = -w_{-+}(t)$ independientemente del protocolo $\lambda \equiv \lambda(t)$ usado y $\forall t \in [0, T]$. Podemos notar que esta simetría se respeta de manera muy particular: mientras que los trabajos w_{++} y w_{--} representan los trabajos realizados por un estado que inicialmente se encuentra en el *excited/ground* y se encuentra allí cuando vuelve a medírselo al final, los valores de trabajo w_{+-} y w_{-+} son aquellos en donde el sistema se encontraba inicialmente en el *excited/ground* y al medírselo nuevamente se encuentra en el estado opuesto.

Resulta curioso analizar si algunos de estos valores de trabajo w coinciden entre ellos para algún tiempo $t \in [0, T]$. Por ejemplo:

1. Caso $w_{++}(t) = w_{--}(t)$: debido a la relación que obtuvimos donde $w_{--}(t) = -w_{++}(t)$, la única manera en que este caso particular se cumpla es si $w_{--}(t) = w_{++}(t) = 0$:

$$w_{++}(t) = E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} - 1 \right] = 0 \quad (4.114)$$

$$\Rightarrow \quad 5\lambda^2 - 2\lambda = 0 \quad (4.115)$$

desprendiendo dos soluciones: $\lambda = 0$ y $\lambda = 2/5$. Es decir, todos aquellos $t = t_w \in [0, T]$ tales que

hagan que el protocolo $\lambda \equiv \lambda(t)$ tome esos valores, son en los cuales $w_{++}(t_w) = w_{--}(t_w) = 0$. Sabemos que una solución trivial (por como definimos nuestro protocolo) es en $t_w = 0$ ya que $\lambda(0) = 0$, lo cual tiene sentido ya que en el instante inicial toma trabajo nulo permanecer en el mismo estado que se encuentra el sistema. Sin embargo, esto no excluye otras posibles soluciones; es más, sabemos que debe existir al menos un t_w tal que $\lambda(t_w) = 2/5$ dado que λ es definida como un función continua en $t \in [0, T]$ y cumple $\lambda(0) = 0$ y $\lambda(T) = 1$.

2. Caso $w_{+-}(t) = w_{-+}(t)$: análogo a lo discutido anteriormente, debido a la relación que obtuvimos donde $w_{+-}(t) = -w_{-+}(t)$, la única manera en que este caso particular se cumpla es si $w_{+-}(t) = w_{-+}(t) = 0$:

$$w_{+-}(t) = E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} + 1 \right] = 0 \quad (4.116)$$

$$\Rightarrow \sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} = -1 \quad (4.117)$$

donde vemos que esta ecuación no tiene solución alguna. Es decir, no es posible este caso.

3. Caso $w_{++}(t) = w_{+-}(t)$: al igualar ambas expresiones tenemos que:

$$w_{++}(t) = w_{+-}(t) \quad (4.118)$$

$$E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} - 1 \right] = E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} + 1 \right] \quad (4.119)$$

$$0 = 2 \quad (4.120)$$

llegando a un absurdo y mostrando que este cruce de valores no es posible.

4. Caso $w_{++}(t) = w_{-+}(t)$: al igualar ambas expresiones tenemos que:

$$w_{++}(t) = w_{-+}(t) \quad (4.121)$$

$$E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} - 1 \right] = -E \left[\sqrt{5\lambda^2 - 2\lambda + 1} + 1 \right] \quad (4.122)$$

lo que es equivalente a plantear:

$$5\lambda^2 - 2\lambda + 1 = 0 \quad (4.123)$$

donde en la expresión (4.100) vemos que esto solo es posible si $\lambda \notin \mathbb{R}$, teniéndose que este caso tampoco es posible.

El resto de casos a analizar son análogos a estos mostrados y se llegan a resultados similares, donde el único cruce posible de valores de trabajo w en función del tiempo ocurre entre w_{++} y w_{--} (cuando ambos se anulan).

La función $f(\lambda)$ definida en la ecuación (4.98) presenta un mínimo $f_{min} \equiv f(\lambda_{min})$ para cierto valor que toma $\lambda_{min} \equiv \lambda(t_{min})$ el cual es:

$$\left. \frac{df}{d\lambda} \right|_{\lambda_{min}} = 0 \quad \Rightarrow \quad 10\lambda_{min} - 2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\lambda(t_{min}) \equiv \lambda_{min} = \frac{1}{5}} \quad (4.124)$$

Es decir, definimos t_{min} al tiempo en el cual el protocolo toma valor $\lambda(t_{min}) = 1/5$ y resulta ser el mínimo valor que toma la función $f(\lambda)$; este resultado resulta ser independiente para el tipo de protocolo

que se está tratando, desencadenando en que la función en este valor sea:

$$f_{min} = f(\lambda_{min}) = 5\lambda_{min}^2 - 2\lambda_{min} + 1 \quad (4.125)$$

$$= 5\left(\frac{1}{5}\right)^2 - 2\frac{1}{5} + 1 = \frac{4}{5} \quad \Rightarrow \quad \boxed{f_{min} = \frac{4}{5}} \quad (4.126)$$

Sabiendo este valor de λ_{min} , está asegurado que lo tomará para algún $t \in [0, T]$ ya que λ es definida como una función continua en ese intervalo que cumple $\lambda(0) = 0$ y $\lambda(T) = 1$.

¿Por qué resulta importante esto último? Es de utilidad cuando queremos estudiar cuál es el *gap* $G(t)$ que existe tiempo a tiempo entre los autovalores posibles del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$. A partir de (4.99) tenemos:

$$G(t) \equiv E_+(t) - E_-(t) = 2E\sqrt{f(\lambda)} \quad (4.127)$$

Sin embargo, el valor de $G(t)$ toma su mínimo cuando $f(\lambda)$ también lo hace; es decir:

$$G_{min} \equiv G(t_{min}) = 2E\sqrt{f_{min}} \quad (4.128)$$

$$\boxed{G_{min} = \frac{4E}{\sqrt{5}}} \quad (4.129)$$

Por lo tanto, lo que podemos sacar en conclusión de esto es que a un tiempo t_{min} se logra que el protocolo tome valor $\lambda = 1/5$ y, con ello, se consigue que el *gap* existente entre los autovalores del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ sea mínimo, resultando ser $G_{min} = \frac{4E}{\sqrt{5}}$. Notar que, cuando el *gap* es mínimo, $E_{\pm}(t)$ alcanza su valor mínimo/máximo.

Este último análisis permite ver que siempre existe un salto no nulo entre los autovalores de energía $E_{\pm}(t)$ para todo tipo de protocolo λ y $\forall t$ (no hay cruces de energías), pudiendo aplicar el teorema adiabático de la Sección 1.3 para este sistema particular. Podemos estudiar qué restricciones impone esto sobre nuestro protocolo para que el sistema cumpla el límite adiabático y, con ello, que se comporte de acuerdo al teorema adiabático. A partir de (4.92), podemos obtener $\dot{\mathcal{H}}(t)$:

$$\dot{\mathcal{H}}(t) = \begin{pmatrix} -E\dot{\lambda} & 2E\dot{\lambda} \\ 2E\dot{\lambda} & E\dot{\lambda} \end{pmatrix} = E\dot{\lambda} \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.130)$$

Por lo tanto, el límite adiabático impone que, mediante la relación (1.76):

$$\beta_{+-}(t) = \frac{\langle +| \dot{\mathcal{H}}(t) | - \rangle}{E_+(t) - E_-(t)} \quad (4.131)$$

$$= \frac{\dot{\lambda} \left(1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)} \right)}{4f(\lambda)} \left[\frac{2\lambda}{1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)}} - \frac{8\lambda^2}{(1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)})^2} + 2 + \frac{2\lambda}{1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)}} \right] \quad (4.132)$$

$$= \frac{\dot{\lambda}}{2f(\lambda) \left(1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)} \right)} \left[-5\lambda^2 + 1 + f(\lambda) + 2\sqrt{f(\lambda)} \right] \longrightarrow 0 \quad \forall t \quad (4.133)$$

pero, usando la definición de $f(\lambda)$, dada por la expresión (4.98), podemos llegar a:

$$\beta_{+-}(t) = \frac{\dot{\lambda}}{2f(\lambda)(1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)})} \left[-5\lambda^2 + 1 + 5\lambda^2 - 2\lambda + 1 + 2\sqrt{f(\lambda)} \right] \quad (4.134)$$

$$= \frac{2\dot{\lambda}}{2f(\lambda)(1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)})} \cancel{(1 - \lambda + \sqrt{f(\lambda)})} = \frac{\dot{\lambda}}{f(\lambda)} \rightarrow 0 \quad \forall t \quad (4.135)$$

que es la condición que debe cumplirse para el protocolo. Por lo cual, para ser más claros, si aplicamos un dado protocolo $\lambda = \lambda(t)$ que sea una función continua y tenga que $\lambda(0) = 0$ y $\lambda(T) = 1$, para que el límite adiabático se cumpla debe pasar que:

$$\boxed{\beta_{+-}(t) = \frac{\dot{\lambda}}{f(\lambda)} \rightarrow 0} \quad \forall t \quad (4.136)$$

donde $f(\lambda)$ es como la definimos anteriormente. En cuanto al coeficiente $\beta_{-+}(t)$, recordemos que se cumple $\beta_{-+}(t) = -\beta_{+-}^*(t)$. Sin embargo, se tiene que $\dot{\lambda}(t)$ y $f(\lambda) \in \mathbb{R}$, por lo que: $\beta_{-+}(t) = -\beta_{+-}(t)$.

A partir de la expresión (4.136) podemos obtener una cota para facilitar esta última relación. Si tenemos el caso donde $\dot{\lambda}(t) > 0 \forall t$ y retomamos el resultado en (4.126), vemos que:

$$\beta_{+-}(t) = \frac{\dot{\lambda}}{f(\lambda)} \leq \frac{\dot{\lambda}}{f_{min}} = \frac{5\dot{\lambda}}{4} \quad (4.137)$$

por lo que el límite adiabático se cumple si

$$\boxed{\frac{5}{4}\dot{\lambda}(t) \rightarrow 0} \quad \forall t \quad (4.138)$$

quitándonos así la dependencia directa con el protocolo $\lambda(t)$ y relacionándolo solo con su derivada temporal $\dot{\lambda}(t)$. Notar que esta restricción se traduce en una tasa de cambio lenta para el protocolo.

Siguiendo la idea de la Sección 1.3.1, se puede obtener el Hamiltoniano contradiabático $\mathcal{H}_{CD}(t)$ asociado a nuestro Hamiltoniano original $\mathcal{H}(t)$ para así obtener el Hamiltoniano por atajo adiabático $\mathcal{H}_{AA}(t)$ que permite que los autoestados instantáneos $|+(t)\rangle$ y $|-(t)\rangle$ no presenten transiciones energéticas para cualquier duración T del protocolo. Entonces, recordemos que la relación (1.80) nos presenta que:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = \mathcal{H}(t) \overbrace{-i\hbar \sum_n \sum_{m \neq n} \beta_{mn}(t) |m(t)\rangle\langle n(t)|}^{=\mathcal{H}_{CD}(t)} \quad (4.139)$$

donde $\beta_{mn}(t)$ toma índices $m, n \equiv +, -$. Así, tenemos que para este caso:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = \mathcal{H}(t) - i\hbar (\beta_{+-}(t) |+(t)\rangle\langle -(t)| + \beta_{-+}(t) |-(t)\rangle\langle +(t)|) \quad (4.140)$$

Si escribimos a $\mathcal{H}(t)$ en la base que lo diagonaliza y usamos la propiedad $\beta_{-+}(t) = -\beta_{+-}(t)$ junto a la relación (4.136), podemos escribir al Hamiltoniano $\mathcal{H}_{AA}(t)$ como:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = E\sqrt{f(\lambda)} (|+(t)\rangle\langle +(t)| - |-(t)\rangle\langle -(t)|) + i\hbar \frac{\dot{\lambda}}{f(\lambda)} (|-(t)\rangle\langle +(t)| - |+(t)\rangle\langle -(t)|) \quad (4.141)$$

o en su forma matricial:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = \begin{pmatrix} E\sqrt{f(\lambda)} & -i\hbar\frac{\dot{\lambda}}{f(\lambda)} \\ i\hbar\frac{\dot{\lambda}}{f(\lambda)} & -E\sqrt{f(\lambda)} \end{pmatrix} \quad \text{en base } \{|+(t)\rangle, |-(t)\rangle\} \quad (4.142)$$

4.2.2. Uso de un protocolo lineal

Todo el desarrollo para la caracterización del sistema fue hecho para un protocolo arbitrario $\lambda \equiv \lambda(t)$. Sin embargo, en este trabajo queremos particularizar para un protocolo determinado. Como dijimos anteriormente, $\lambda(t)$ debe ser una función continua $\forall t \in [0, T]$ la cual cumpla $\lambda(0) = 0$ y $\lambda(T) = 1$. Con este criterio, se ha propuesto estudiar el caso más simple posible: un **protocolo lineal** tal que $\lambda(t) = \frac{t}{T}$ con $t \in [0, T]$.

Definido este protocolo $\lambda = \lambda(t)$, podemos realizar un gráfico de los valores de trabajo $w(t)$ que hallamos en la expresión (4.113) en función de los valores que puede adoptar el protocolo. Para este caso, puede verse que el protocolo se encuentra acotado por $0 < \lambda < 1$, teniéndose entonces que los distintos valores $w(t)$ pueden representarse como indica la Figura 4.1. Allí, podemos ver que el comportamiento de los distintos $w(t)$ es tal como lo predijimos: solo logran cruzarse $w_{++}(t)$ y $w_{--}(t)$ (cuando ambos son nulos) y lo hacen para dos valores particulares que adopta el protocolo: $\lambda = 0$ y $\lambda = 2/5$. Con esto, podemos hallar los valores de $t = t_w \in [0, T]$ tales que se produce el cruce de los valores de trabajo w_{++} y w_{--} . Para nuestra suerte, existe un único t_w para cada valor buscado, siendo estos:

$$\lambda(t_w) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{t_w}{T} = 0 \quad \Rightarrow \quad t_w = 0 \quad (4.143)$$

$$\lambda(t_w) = 2/5 \quad \Rightarrow \quad \frac{t_w}{T} = \frac{2}{5} \quad \Rightarrow \quad t_w = \frac{2}{5}T \quad (4.144)$$

Es decir, tenemos que $t_w \in \{0, \frac{2}{5}T\}$ para los cuales $w_{++}(t_w) = w_{--}(t_w) = 0$ (para este protocolo particular).

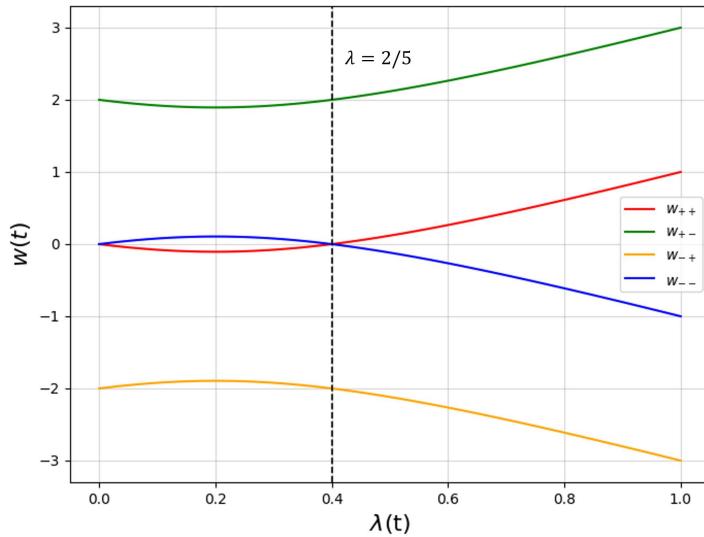


Figura 4.1: Valores de $w(t)$ en función del protocolo $\lambda(t)$. La recta vertical de trazo corto indica el valor $\lambda = 2/5$. Puede verse que los valores de $w_{++}(t)$ y $w_{--}(t)$ son los únicos que logran cruzarse y lo hacen cuando el protocolo toma valores $\lambda = 0$ y $\lambda = 2/5$. Para graficar, se consideró $E = 1$.

Por otra parte, podemos obtener el valor de $t = t_{min} \in [0, T]$ para el cual tenemos que la función del *gap* $G(t)$ entre los valores de energía $E_{\pm}(t)$ es mínima; es decir, aquel donde tenemos $G_{min} = \frac{4E}{\sqrt{5}}$ que coincide cuando $E_{\pm}(t)$ toma su valor mínimo/máximo. Habíamos concluido que el valor de t_{min} en el que ocurre esto es donde el protocolo $\lambda(t)$ resulta $\lambda(t_{min}) = 1/5$. Entonces, tenemos:

$$\lambda(t_{min}) = 1/5 \quad \Rightarrow \quad \frac{t_{min}}{T} = \frac{1}{5} \quad \Rightarrow \quad \boxed{t_{min} = \frac{1}{5}T} \quad (4.145)$$

En la Figura 4.2 se muestra el gráfico de los autovalores de energía $E_{\pm}(t)$ en función de los valores que puede adoptar el protocolo. Allí, corroboramos que el *gap* mínimo ocurre cuando $\lambda = 1/5$ y coincide cuando $E_{\pm}(t)$ alcanza su valor mínimo/máximo.

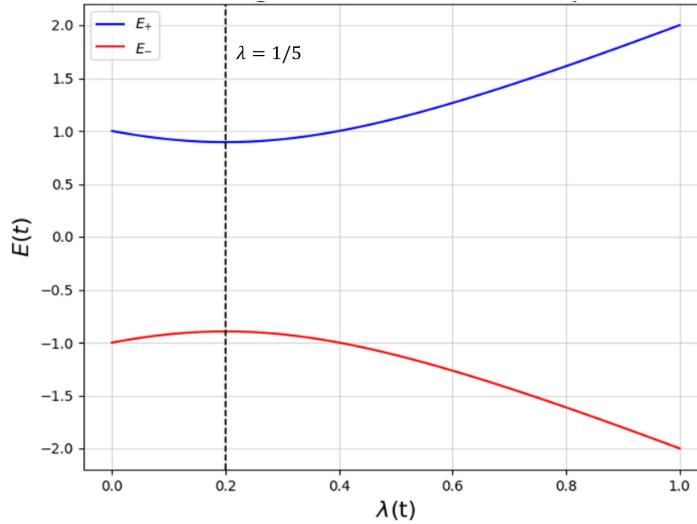


Figura 4.2: Valores de $E_{\pm}(t)$ en función del protocolo $\lambda(t)$. La recta vertical de trazo corto indica el valor $\lambda = 1/5$. Puede verse que el *gap* mínimo entre los niveles de energía ocurre cuando $\lambda = 1/5$ y coincide cuando E_{\pm} consigue su valor mínimo/máximo. Para graficar, se consideró $E = 1$.

Como se cumple que $\dot{\lambda}(t) = \frac{1}{T} > 0 \ \forall t$ para este protocolo en particular, de la expresión hallada en (4.136) tenemos que $\beta_{+-}(t) > 0$ y, por lo tanto, $\beta_{-+}(t) < 0$ debido a la relación $\beta_{-+}(t) = -\beta_{+-}(t)$. En la Figura 4.3 puede observarse los gráficos de los coeficientes β_{+-}, β_{-+} en función de t/T (de manera que queda normalizado el tiempo entre 0 y 1) para distintos T elegidos. Se ve que se respetan los signos de ambos y que resultan ser opuestos entre sí, corroborando lo antes dicho.

A fines prácticos, viendo esta relación existente entre β_{+-} y β_{-+} , nos limitaremos a trabajar únicamente sobre $\beta_{+-}(t)$. En la Figura 4.4 pueden observarse distintas curvas (a distintos T) para β_{+-} en función de t/T . Puede verse que el máximo valor que alcanza ocurre para $t/T = \frac{1}{5}$; es decir, ocurre cuando $t = t_{min}$ (minimización del *gap* de energía). Esto lo habíamos obtenido en (4.137) cuando quisimos acotar $\beta_{+-}(t)$ tomando el valor f_{min} , que también coincide en $t = t_{min}$:

$$\beta_{+-}(t) \leq \frac{5}{4} \dot{\lambda}(t) = \frac{5}{4T} \quad (4.146)$$

Es más, la línea punteada horizontal corresponde al valor máximo acotado obtenido para cada una de las curvas, corroborándose esta cota.

Si queremos ver qué condiciones impone el límite adiabático sobre la derivada temporal $\dot{\lambda}(t)$ de

nuestro protocolo elegido, a partir de la condición (4.138) tenemos que:

$$\dot{\lambda}(t) = \frac{1}{T} \Rightarrow \boxed{\frac{5}{4T} \rightarrow 0} \quad (4.147)$$

que es equivalente a pedir que $T \rightarrow +\infty$. Notar que, justamente, pedir que $T \rightarrow +\infty$ significa que la evolución es infinitamente lenta, que es la condición que necesitamos en el límite adiabático. Para ello, podemos considerar uno o dos órdenes de magnitud superiores a $5/4$ ($T \sim 10$ ó $T \sim 100$) y probar si resulta ser apreciable el límite adiabático para nuestro sistema.

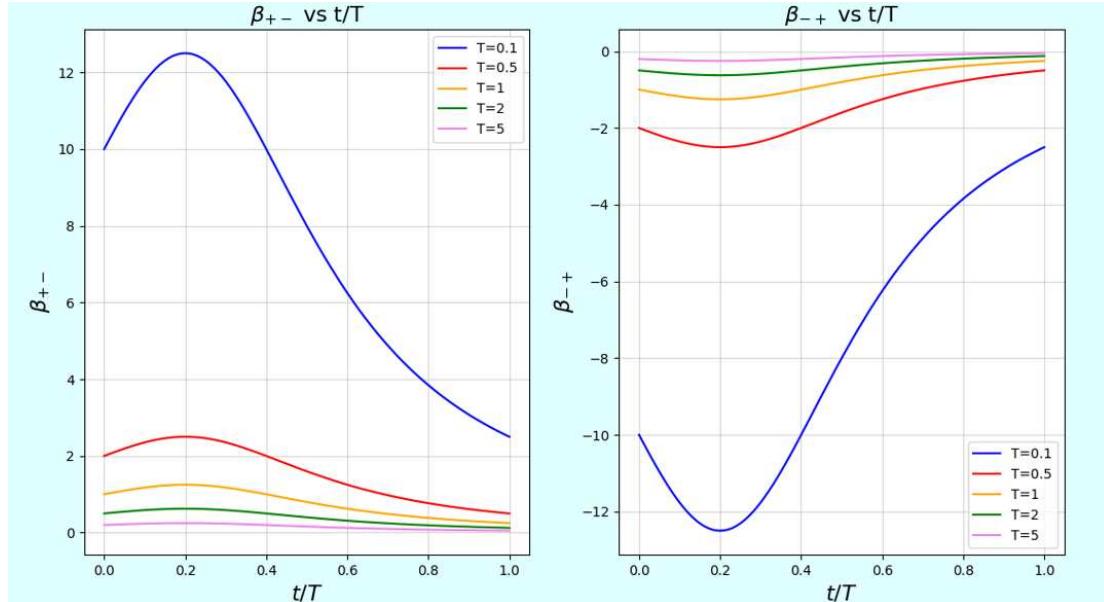


Figura 4.3: Coeficientes β_{+-}, β_{-+} en función de t/T para distintos T elegidos. Puede verse que $\beta_{+-}(t) > 0$ y $\beta_{-+}(t) < 0$, siendo además $\beta_{-+}(t) = -\beta_{+-}(t)$.

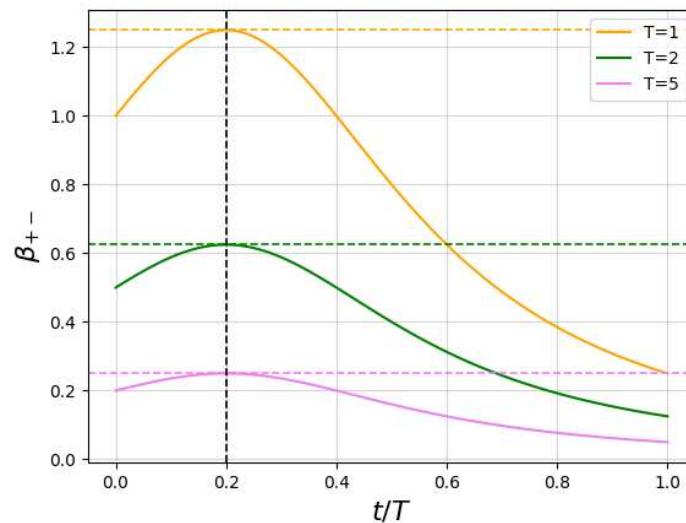


Figura 4.4: Coeficiente β_{+-} en función de t/T para distintos T elegidos. Puede verse que los máximos de las curvas son alcanzados en $t = t_{min}$ (recta vertical de trazo corto), y sus valores máximos coinciden con la cota correspondiente a cada curva (rectas horizontales de trazo corto).

Otra cosa interesante a analizar es la probabilidad de transición que hay entre los niveles de energía

a lo largo de la evolución. Se define la probabilidad de transición de un estado inicial $|a\rangle$ a un estado $|b(t)\rangle$ como:

$$\text{Prob}(|a\rangle \rightarrow |b(t)\rangle) \equiv |\langle b(t) | \mathcal{U} |a\rangle|^2 \quad (4.148)$$

siendo $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(t, 0)$ el operador evolución del sistema. Para el sistema de dos niveles que presentamos, nos interesa en particular estudiar cómo son las probabilidades de transición de niveles $\text{Prob}(|e\rangle \rightarrow |-(t)\rangle)$ y $\text{Prob}(|g\rangle \rightarrow |+(t)\rangle)$ y analizar cómo se comportan en un proceso donde vale (o no) el límite adiabático. Sin embargo, puede probarse que ambos son equivalentes:

$$\text{Prob}(|e\rangle \rightarrow |-(t)\rangle) = 1 - \text{Prob}(|e\rangle \rightarrow |+(t)\rangle) = 1 - |\langle +| \mathcal{U} |e\rangle|^2 \quad (4.149)$$

$$= \langle +| \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger |+(t)\rangle - \langle +| \mathcal{U} |e\rangle \langle e| \mathcal{U}^\dagger |+(t)\rangle \quad (4.150)$$

$$= \langle +| \mathcal{U} (\mathbb{I} - |e\rangle \langle e|) \mathcal{U}^\dagger |+(t)\rangle \quad (4.151)$$

$$= \langle +| \mathcal{U} |g\rangle \langle g| \mathcal{U}^\dagger |+(t)\rangle = \text{Prob}(|g\rangle \rightarrow |+(t)\rangle) \quad \checkmark \quad (4.152)$$

donde \mathbb{I} es el operador identidad. Por lo cual, nos enfocaremos en el estudio de uno de ellos.

En la Figura 4.5 puede apreciarse la magnitud $\text{Prob}(|e\rangle \rightarrow |-(t)\rangle)$ en función del tiempo normalizado t/T . Allí, vemos que para una duración del protocolo corta ($T = 0.1$ ó $T = 1$) la probabilidad de transición adopta valores no despreciables durante la evolución, permitiendo que se produzca fácilmente una transición entre niveles de energía. Esto deviene en que, para estos valores de T , el límite adiabático no se cumpla. Por otro lado, para tiempos largos ($T = 10$ ó $T = 100$) la probabilidad de transición cae a valores de varios órdenes de magnitud por debajo, siendo imposible (en el sentido estadístico) que se produzca un salto entre niveles de energía. Estos valores de T permitirían, *a priori*, que se logre bastante bien el límite adiabático.

Si queremos implementar el atajo adiabático que se obtiene por medio del Hamiltoniano dado en (4.142), la dinámica logrará que no exista probabilidad de transición alguna (exactamente cero) entre los niveles de energía estudiados aquí. Mediante el protocolo propuesto, el Hamiltoniano por atajo adiabático $\mathcal{H}_{AA}(t)$ que se obtiene resulta ser:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = \begin{pmatrix} E\sqrt{f(\lambda)} & -\frac{i\hbar}{Tf(\lambda)} \\ \frac{i\hbar}{Tf(\lambda)} & -E\sqrt{f(\lambda)} \end{pmatrix} \quad (4.153)$$

donde acá podemos dejar explícita la dependencia de $f(\lambda)$ con el tiempo t ya que conocemos nuestro protocolo particular; en este caso:

$$f(\lambda) \equiv f(\lambda(t)) = \frac{5t^2}{T^2} - \frac{2t}{T} + 1 \quad (4.154)$$

Habiendo estudiado la caracterización del sistema para nuestro protocolo lineal, procederemos a analizar la dinámica de la distribución WSM definida en (4.18) y su marginalización de trabajo dada por (4.29) para distintos estados (por medio de simulaciones numéricas). Particularmente, utilizaremos tres estados ρ_{S_1} , ρ_{S_2} y ρ_{S_3} definidos (en la base que diagonaliza a σ_z) como:

$$\rho_{S_1} \equiv \frac{\mathbb{I} + \sigma_z}{2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.155)$$

$$\rho_{S_2} \equiv \frac{\mathbb{I} + \sigma_z/4}{2} = \begin{pmatrix} \frac{5}{8} & 0 \\ 0 & \frac{3}{8} \end{pmatrix} \quad (4.156)$$

$$\rho_{S_3} \equiv \frac{\mathbb{I} + \sigma_x/2 + \sigma_y/2 + \sigma_z/4}{2} = \begin{pmatrix} \frac{5}{8} & \frac{1-i}{4} \\ \frac{1+i}{4} & \frac{3}{8} \end{pmatrix} \quad (4.157)$$

Los estados ρ_{S_1} y ρ_{S_2} resultan ser diagonales en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H , por lo que ellos no presentan coherencias al inicio de la evolución. La diferencia entre ellos es que ρ_{S_1} representa un estado puro que inicialmente se encuentra en $|e\rangle$ (con energía E), mientras que ρ_{S_2} es un estado mixto con probabilidad $5/8$ de comenzar en $|e\rangle$ (con energía E) y probabilidad $3/8$ de comenzar en $|g\rangle$ (con energía $-E$). Por otra parte, el estado ρ_{S_3} no es diagonal respecto a la base que diagonaliza al Hamiltoniano inicial H , por lo que presenta coherencias al inicio de la evolución. Puede verse que, en los términos de la diagonal, ρ_{S_2} y ρ_{S_3} valen lo mismo. Por lo tanto, la diferencia que exista entre la dinámica de estos dos estados se deberá a la incorporación de las coherencias.

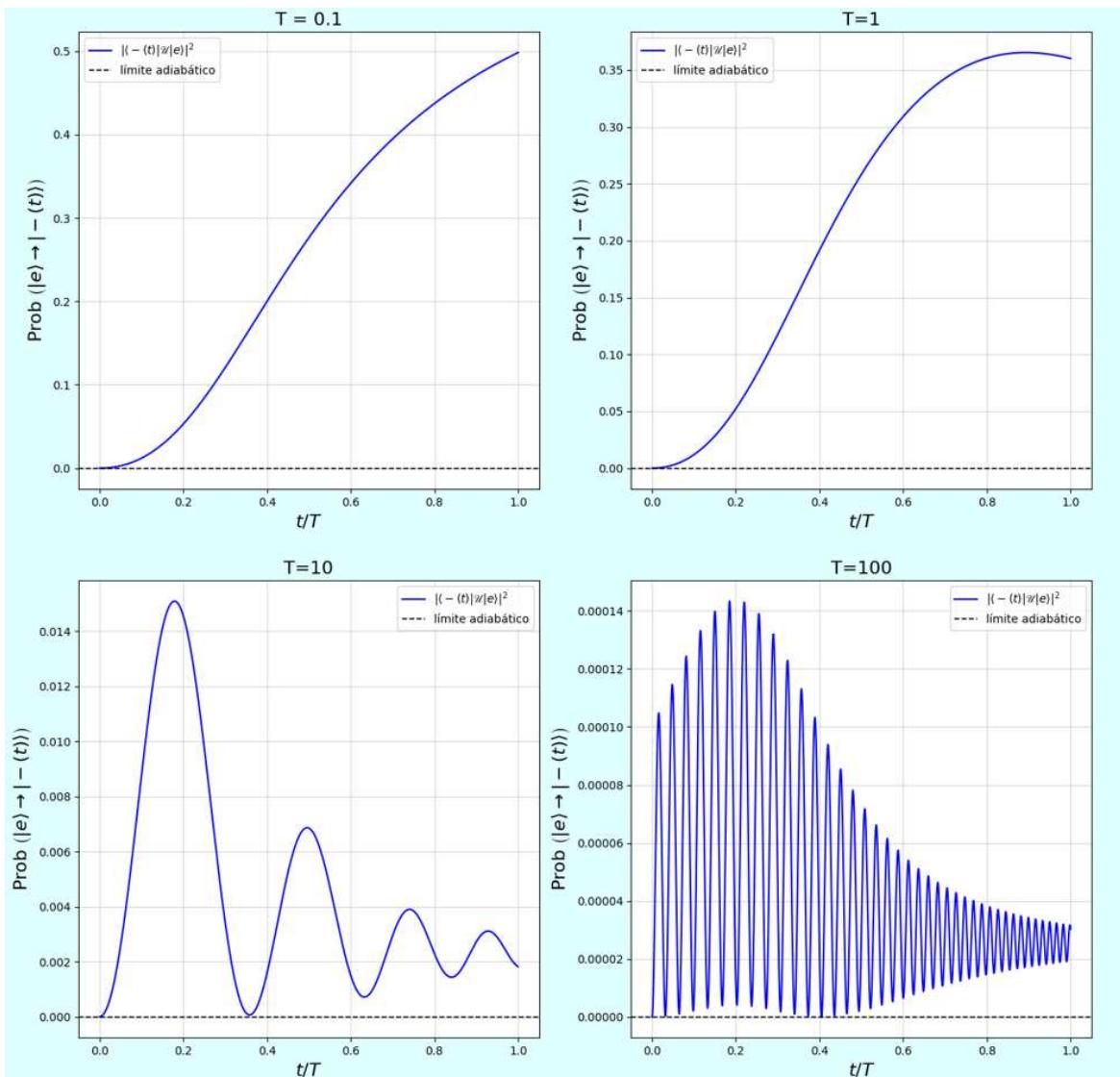


Figura 4.5: Probabilidades de transición $\text{Prob}(|e\rangle \rightarrow |-(t)\rangle)$ en función del tiempo normalizado t/T para distintas duraciones del protocolo T . La línea de trazo corto representa lo esperado en el límite adiabático, siendo $T = 10$ y $T = 100$ los que mejor cumplen dicha aproximación.

En todos los gráficos que mostraremos a continuación, hasta el final del capítulo, se tomó $E = 1$ y $\hbar = 1$ a fines prácticos de una mejor visualización de los resultados. Además, se variaron los parámetros T y σ en un rango donde puedan apreciarse diferencias visuales.

4.2.3. Evolución de la distribución WSM

Comenzaremos analizando procesos que se llevan a cabo fuera del equilibrio para el estado ρ_{S_1} dado por (4.155). En la Figura 4.6 se estudió el caso en donde la dinámica tiene un tiempo de duración $T = 1$. Se puede visualizar la evolución de la distribución $P_{WSM}(w, \tau)$ en los paneles superiores y, en los paneles inferiores, cómo varía la distribución marginalizada $P_W(w)$ para una dispersión $\sigma = 0,5$, en comparación con la distribución TPM.

Puede observarse que se obtiene lo esperado: dos valores de trabajo definidos debido a la única opción de medir energía E al proyectar sobre el Hamiltoniano inicial H . También, puede notarse que uno de esos picos emerge teniendo una probabilidad nula al inicio de la evolución. Este pico es correspondiente al valor de trabajo que se obtiene cuando el sistema produce una transición energética. Esto puede pensarse de la siguiente manera: si inicialmente el estado se encuentra en el estado $|e\rangle$, y el sistema no evoluciona, entonces el estado no se verá modificado. Por lo cual, es debido a la dinámica del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ que pueden producirse los cruces energéticos.

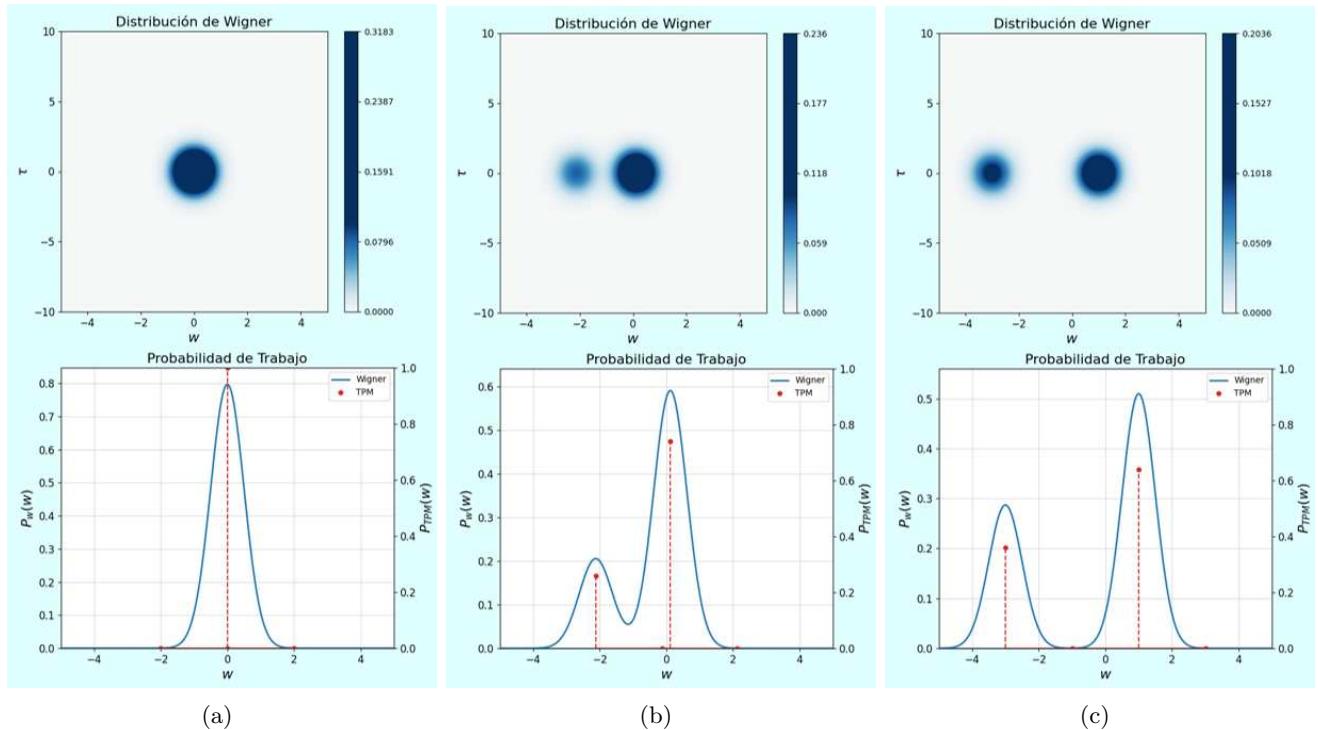


Figura 4.6: Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_1} con $T = 1$ y $\sigma = 0,5$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{2}T$; (c) $t = T$.

Como adicional, debido a la ausencia de coherencias en el estado inicial, notamos que no se presentan negatividades en la distribución WSM y existe una simetría respecto a la recta $\tau = 0$. Además, los picos son coincidentes con los valores del protocolo TPM. Si se modifica el parámetro σ , se obtiene una

evolución análoga a la mostrada en la Figura 4.6 para las distribuciones $P_{WSM}(w, \tau)$ y $P_W(w)$, pero cambiarán la dispersión de sus picos.

Al estudiar el valor medio de la diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y comparándolo con los valores de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM, se esperaría que coincidieran en todo momento debido a la ausencia de coherencias cuánticas en el estado inicial. En la Figura 4.7 puede verse este fenómeno para el caso presentado antes con $T = 1$ y $\sigma = 0,5$. Este último gráfico resulta análogamente coincidente para toda dispersión σ implementada en la *ancilla* y tiempo de duración T , como ya se había demostrado en la relación obtenida por (4.43) para estados que inicialmente son diagonales en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H .

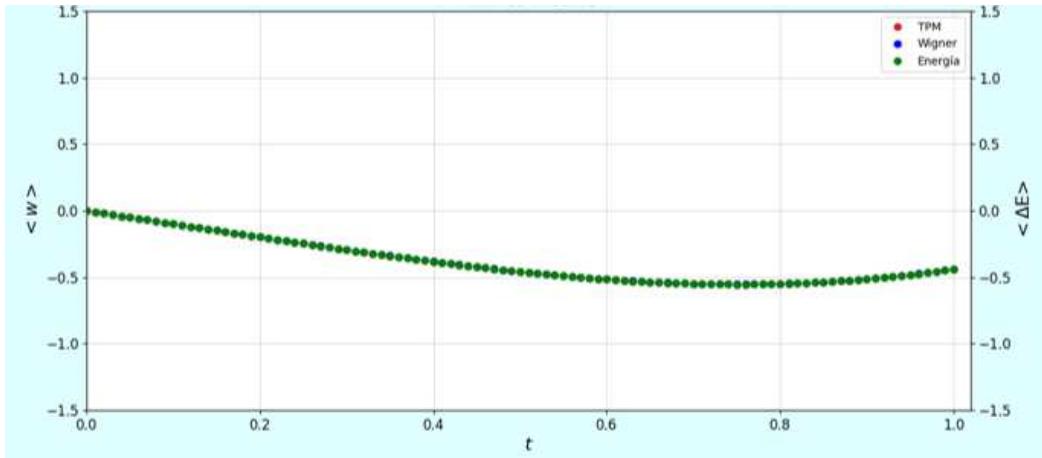


Figura 4.7: Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_1} . Estos tres valores coinciden entre sí debido a la ausencia de coherencias cuánticas en el estado inicial. Se tomó como ejemplo $T = 1$ y $\sigma = 0,5$.

Análogamente, se puede estudiar la dinámica de la distribución WSM y su marginal de trabajo para el estado ρ_{S_2} dado por (4.156). En la Figura 4.8, se visualiza la evolución de $P_{WSM}(w, \tau)$ en los paneles superiores y, en los paneles inferiores, cómo varía la distribución marginalizada $P_W(w)$ para una dispersión $\sigma = 0,5$, en comparación con la distribución del protocolo TPM. Nuevamente, utilizamos un tiempo de duración $T = 1$. A diferencia del caso anterior, nos encontramos con cuatro valores de trabajo definidos debido a que ahora puede obtenerse en el inicio una energía E o $-E$ al proyectar sobre el Hamiltoniano inicial H . Por este motivo, se hace una muestra más detallada de la evolución.

Como primer detalle a analizar, debido a la falta de coherencia en el estado inicial, mencionamos que no se presentan negatividades en la distribución WSM y existe, nuevamente, una simetría respecto a la recta $\tau = 0$. Además, los picos son coincidentes con los valores que ofrece el protocolo TPM. En cuanto a los valores de trabajo que cambian en el tiempo, a medida que el sistema evoluciona, emergen dos picos que inician con probabilidad nula. Estos picos son los correspondientes a los trabajos obtenidos en la transición de niveles, tal como fue desarrollado para el caso de ρ_{S_1} . En esta ocasión, se presentan dos valores de trabajos posibles, ya que se puede presentar la transición $|e\rangle \rightarrow |-(t)\rangle$ o, si no, $|g\rangle \rightarrow |+(t)\rangle$.

Otra característica a distinguir es que a tiempos $t = 0$ y $t = \frac{2}{5}T$ se produce un cruce entre dos valores de trabajo. No es difícil ver que este cruce debe ser entre los valores de trabajo w_{++} y w_{--} , donde estos tiempos coinciden con los hallados en las relaciones (4.143) y (4.144). Esto corrobora parte del análisis previo para la caracterización del sistema bajo este protocolo.

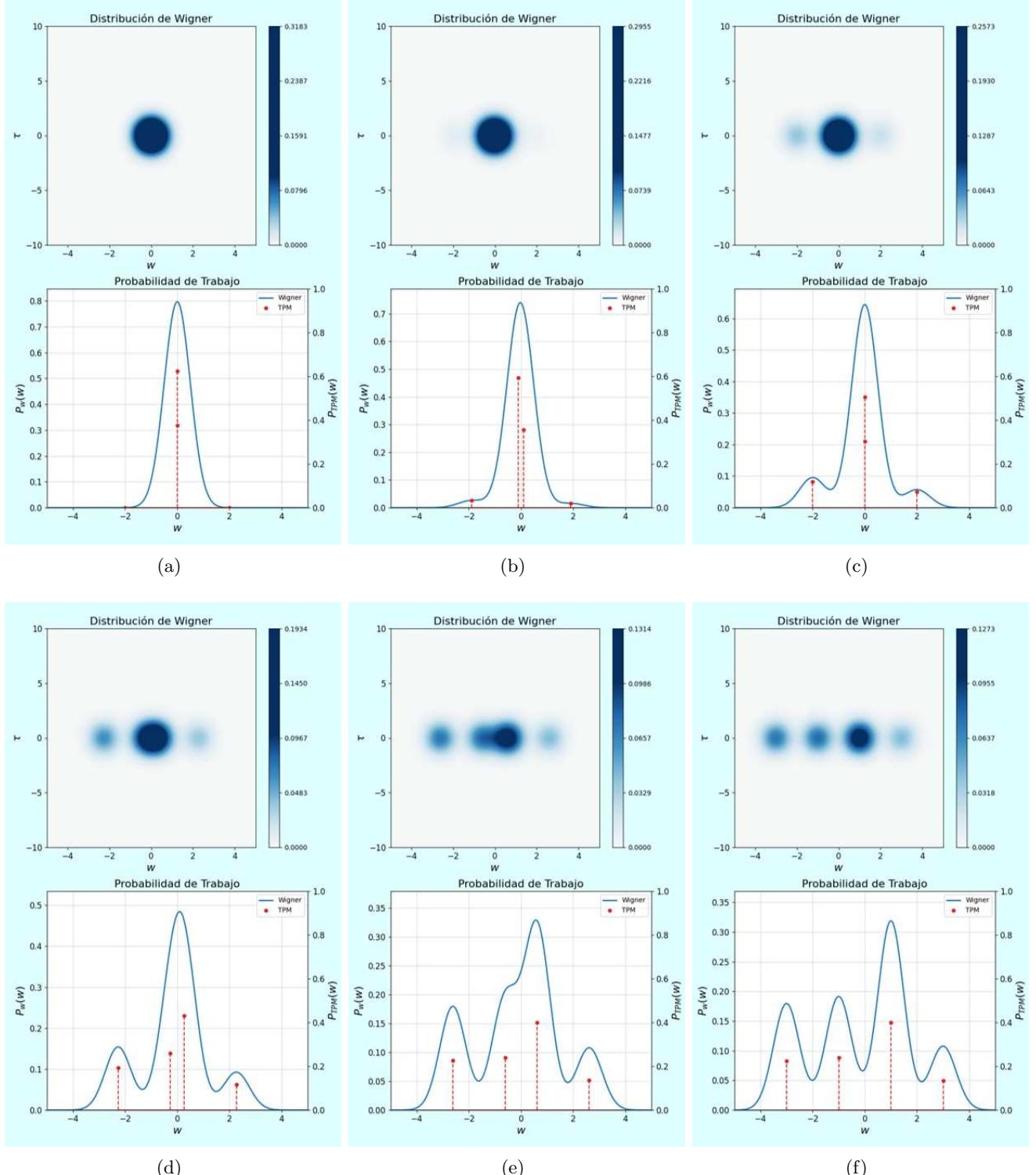


Figura 4.8: Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_2} con $T = 1$ y $\sigma = 0.5$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{5}T$; (c) $t = \frac{2}{5}T$; (d) $t = \frac{3}{5}T$; (e) $t = \frac{4}{5}T$; (f) $t = T$.

Al estudiar el valor medio de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y comparándolos con los valores medios de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM, vemos que estos coinciden en todo momento debido a la ausencia de coherencias cuánticas en el estado inicial.

En la Figura 4.9 puede corroborarse para el caso presentado donde $T = 1$ y $\sigma = 0,5$. Esto resulta independiente del σ implementado en la *ancilla* y de la duración del proceso T .

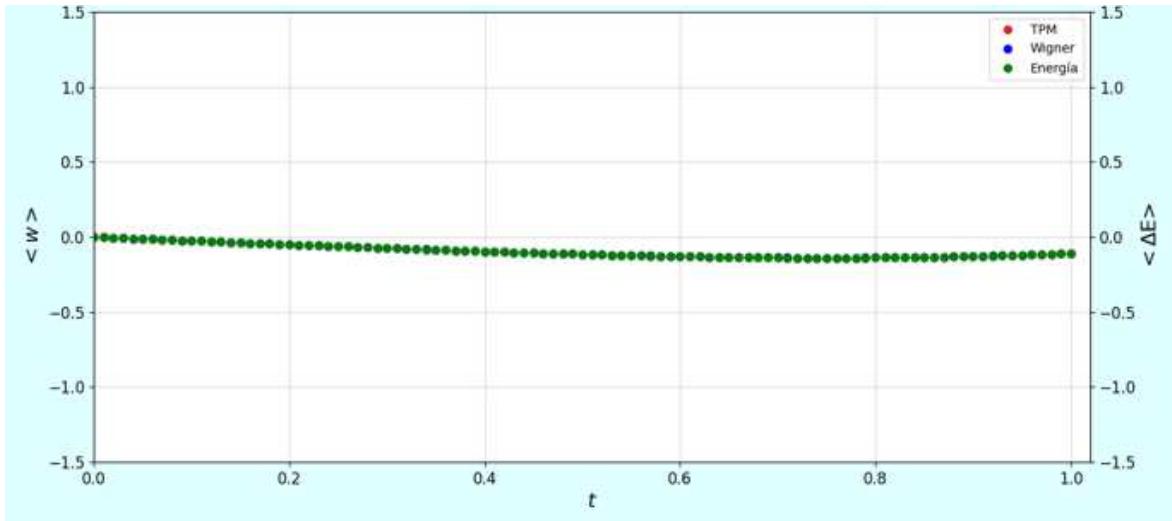


Figura 4.9: Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_2} . Estos tres valores coinciden entre sí debido a la ausencia de coherencias cuánticas en el estado inicial. Se tomó como ejemplo $T = 1$ y $\sigma = 0,5$.

Pasando a la parte interesante, veamos qué ocurre cuando el estado inicial es el dado por ρ_{S_3} de la expresión (4.157), donde ahora las coherencias están presentes en el inicio de la dinámica. En la Figura 4.10, se visualiza la evolución de $P_{WSM}(w, \tau)$ en los paneles superiores y, en los paneles inferiores, cómo varía la distribución marginalizada $P_W(w)$ para una dispersión $\sigma = 0,5$, en comparación con la distribución del protocolo TPM. El tiempo de duración utilizado es de $T = 1$. Como sucedía anteriormente, tendremos cuatro valores de trabajo definidos ya que, en el inicio, puede medirse energías E o $-E$ al proyectar sobre el Hamiltoniano inicial H .

Vemos que, esta vez, la distribución WSM presenta negatividades, siendo una evidencia de que el estado inicial introducido presenta coherencias respecto a la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . De hecho, la gráfica deja de ser simétrica respecto a la recta $\tau = 0$. Esto puede reforzar la idea de que la variable τ juega el rol del instante en que se realiza la primera medición de energía, donde para estados diagonales en la base de autoestados de H no se pierde esta característica. Sin embargo, la inclusión de coherencia implicaría que ahora es afectado el estado cuando se quiere obtener el valor de energía al inicio de la evolución, produciendo este fenómeno. Por otro lado, a medida que el sistema evoluciona, emergen dos picos que inician con probabilidad nula, los cuales representan los trabajos obtenidos debido a una transición de niveles. Además, vemos que a tiempos $t = 0$ y $t = \frac{2}{5}T$ se produce el cruce entre los valores de trabajo w_{++} y w_{--} .

Es evidente que el hecho de haber utilizado como estado inicial a ρ_{S_3} , el cual se diferencia de ρ_{S_2} por incluir coherencias, hizo que $P_{WSM}(w, \tau)$ presente cambios en su comportamiento, marcando diferencias sustanciales en la dinámica del sistema. Inclusive, puede notarse que en la Figura 4.8 se presentaban cuatro picos positivos, mientras que en la Figura 4.10 se encuentra una superposición de picos positivos y negativos. Sin embargo, por otro lado, vemos que la distribución $P_W(w)$ no varía considerablemente tiempo a tiempo entre estas dos situaciones, si bien no resultan ser idénticas. Esto conlleva a que el valor medio de trabajo obtenido para esta distribución en los estados ρ_{S_2} y ρ_{S_3} sea, *a priori*, distintos.

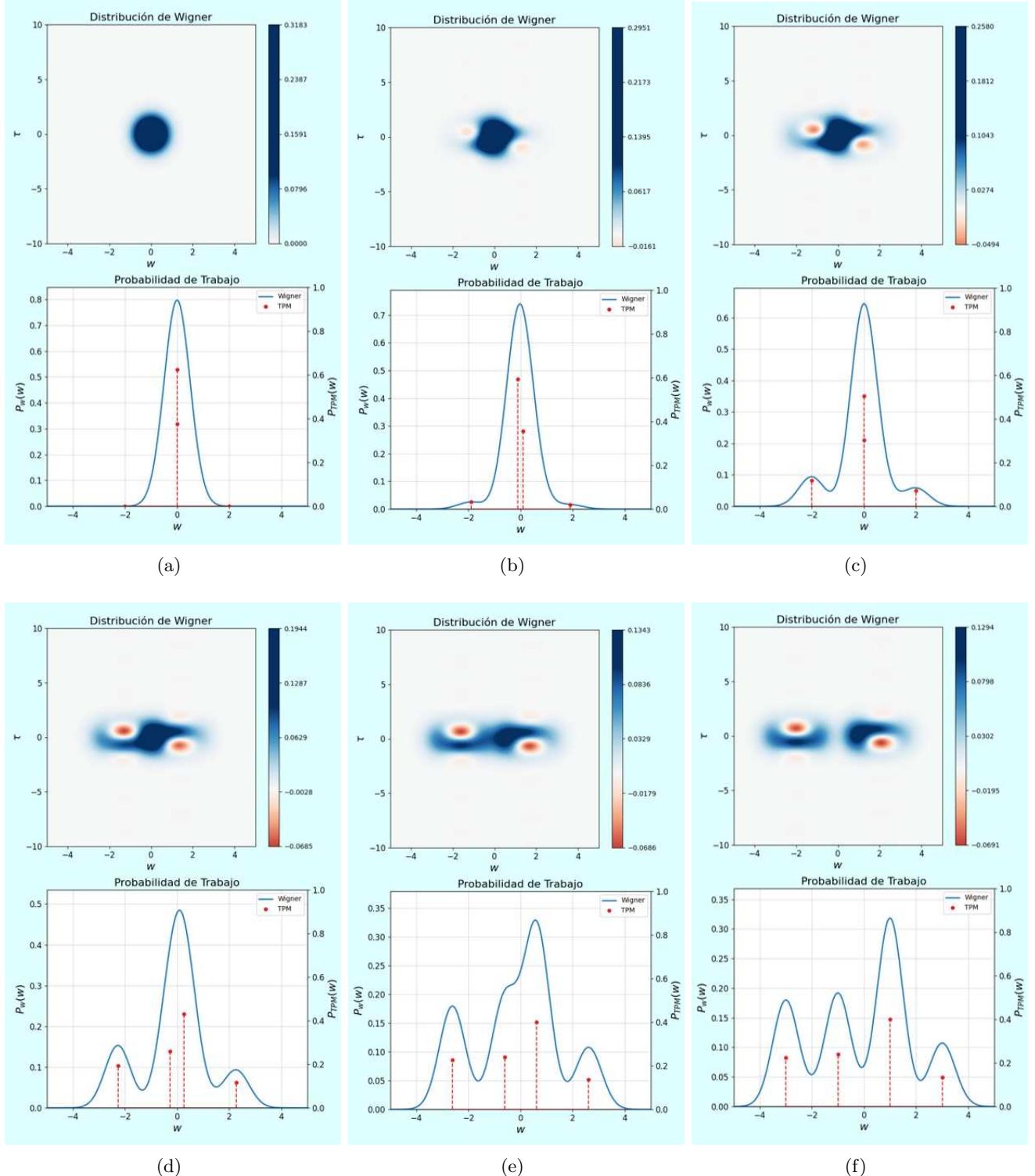


Figura 4.10: Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_3} con $T = 1$ y $\sigma = 0.5$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{5}T$; (c) $t = \frac{2}{5}T$; (d) $t = \frac{3}{5}T$; (e) $t = \frac{4}{5}T$; (f) $t = T$.

Al estudiar el valor medio de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y comparándolos con los valores medios de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM, notaremos que, en general, estos no coinciden en todo momento debido a la presencia de coherencias cuánticas en el

estado inicial. En la Figura 4.11 puede corroborarse esto para el caso donde $T = 1$ y $\sigma = 1,0$.

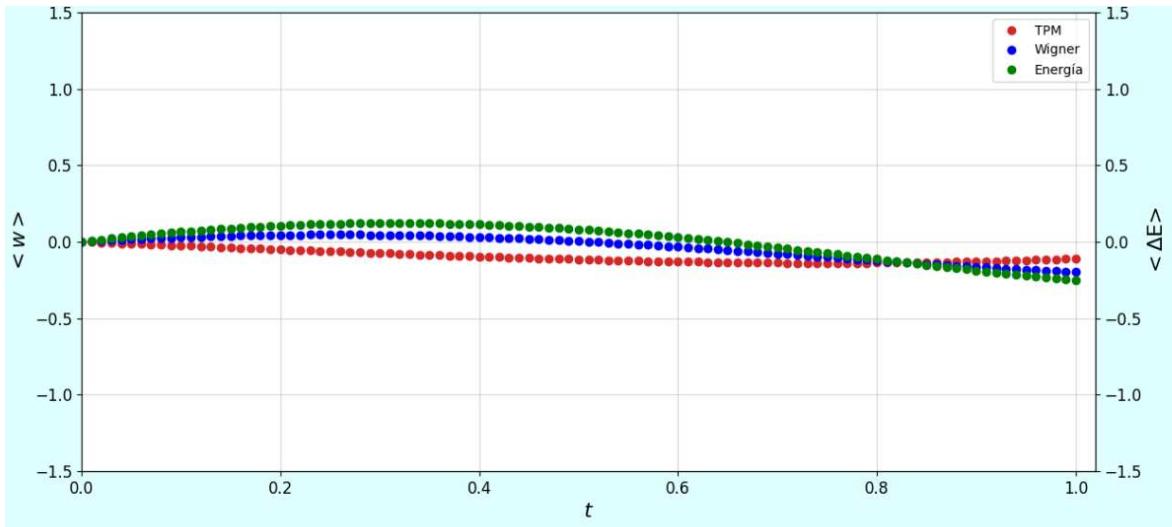


Figura 4.11: Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_3} . Estos tres valores no coinciden entre sí debido a la presencia de coherencias cuánticas en el estado inicial. Se tomó como ejemplo $T = 1$ y $\sigma = 1,0$.

Por un lado, sabemos que la presencia de coherencias cuánticas en el estado inicial hará que el valor medio de trabajo conseguido por el protocolo TPM no coincida con el valor medio de energía $\langle \Delta E \rangle$. Para ser más claros, el valor medio de trabajo que representa el protocolo TPM para los sistemas ρ_{S_2} y ρ_{S_3} debería ser el mismo dado que comparten los mismos términos diagonales. Esto se verifica al observar las Figuras 4.9 y 4.11. Por otro lado, estas mismas permiten ver que el valor medio de la diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ varía al usarse un estado u otro al inicio de la evolución (con o sin coherencias), así como lo hace el valor medio de trabajo $\langle W \rangle_{WSM}$. Según lo analizado para la distribución $P_W(w)$ en las relaciones (4.43) y (4.46), esta magnitud coincidirá mejor con el valor medio de la distribución TPM o con el valor medio de la variación de energía según sea la relación existente entre la dispersión σ y el *gap* de energía del Hamiltoniano inicial H .

Cuando se tiene el caso donde $8\sigma^2 \ll (E_n - E_{n'})^2 \forall n \neq n'$, es esperable que el valor medio de trabajo $\langle W \rangle_{WSM}$ coincida mejor con el proporcionado por el TPM que con la diferencia media de energía. Esto puede verse en la Figura 4.12 donde se ha elegido un tiempo $T = 1$ y dispersión $\sigma = 0,1$. Al mantener el mismo valor de T y aumentar la dispersión, el valor medio de trabajo $\langle W \rangle_{WSM}$ se encontrará en un intermedio entre el ofrecido por el protocolo TPM y la variación media de energía; esto es apreciable en la Figura 4.11. Para un caso más extremo donde se cumple el límite $8\sigma^2 \gg (E_n - E_{n'}) \forall n \neq n'$, se tiene que el valor medio de trabajo de la distribución $P_W(w)$ coincide mejor con la diferencia media de energía del sistema $\langle \Delta E \rangle$. Esto puede verse en la Figura 4.13, tomando una dispersión $\sigma = 2,0$.

Un fenómeno que resulta interesante mostrar es la forma que adopta la distribución $P_{WSM}(w, \tau)$ cuando se tiene una dispersión $\sigma \rightarrow 0$ en los casos donde el estado presenta coherencias al inicio de la evolución frente a uno que no. Podemos notar que, en estas condiciones, se cumple el límite $8\sigma^2 \ll (E_n - E_{n'})^2 \forall n \neq n'$, dando que la distribución de trabajo $P_W(w)$ coincide muy bien con la distribución de trabajo del protocolo TPM instante a instante, como se mostró en la relación (4.35). Sin embargo, esto ocurre independientemente del estado ρ_S que se utilice. Por lo tanto, la diferencia entre utilizar un estado con coherencias al inicio del proceso (donde el protocolo TPM no da la estadística

correcta) o sin ellas debe estar codificada en la distribución $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$ en forma de negatividades.

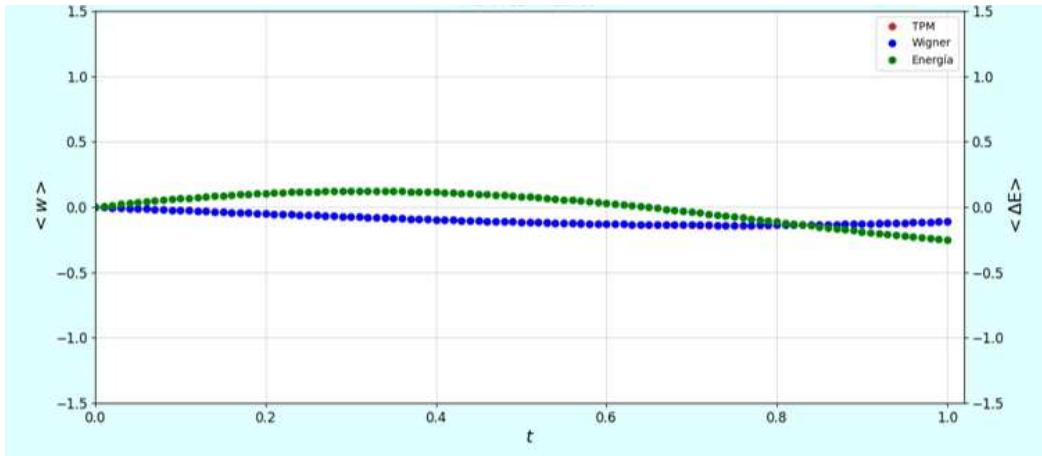


Figura 4.12: Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_3} con parámetros $T = 1$ y $\sigma = 0,1$. Debido a que se cumple el límite $8\sigma^2 \ll (E_n - E_{n'})^2 \forall n \neq n'$, los valores medios de trabajo del protocolo TPM y de la distribución $P_W(w)$ coinciden bastante bien. Sin embargo, el valor medio de la diferencia de energía queda distante de estos dos.

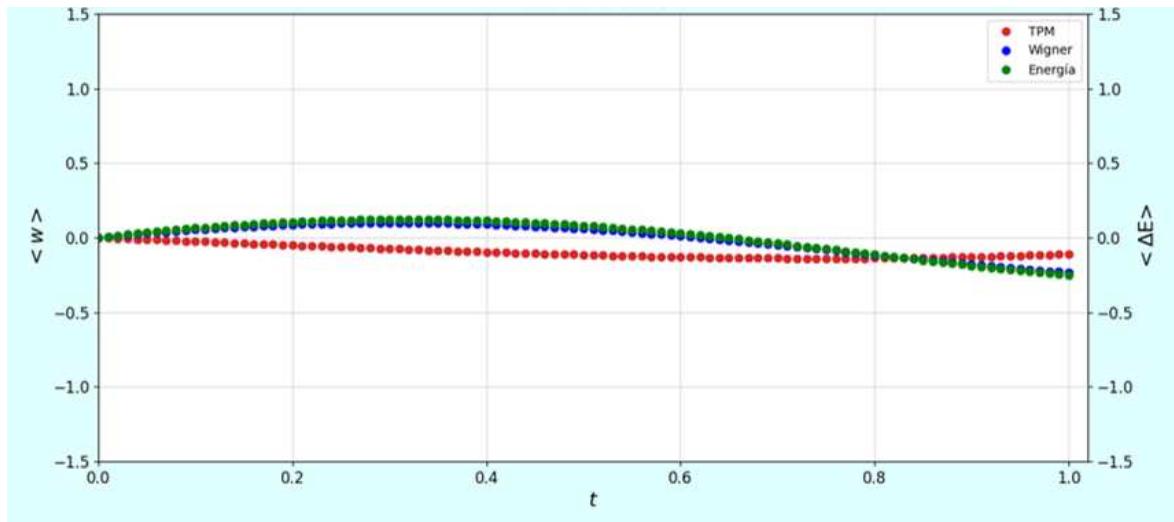


Figura 4.13: Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_3} con parámetros $T = 1$ y $\sigma = 2,0$. Debido a que se cumple el límite $8\sigma^2 \gg (E_n - E_{n'})^2 \forall n \neq n'$, los valores medios de trabajo de la distribución $P_W(w)$ y la variación media de energía coinciden bastante bien. Sin embargo, el valor medio de trabajo del protocolo TPM queda distante de estos dos.

En la Figura 4.14 se muestra el estado final del proceso llevado a cabo para los estados ρ_{S_2} y ρ_{S_3} con parámetros $T = 1$ y $\sigma = 0,1$. Como se dijo anteriormente, las distribuciones de trabajo brindadas por $P_W(w)$ y el protocolo TPM coinciden bastante bien, donde las campanas gaussianas tienden a formar funciones delta de Dirac. Es más, la distribución de trabajo que se obtiene para ambos casos es muy similar entre sí. La diferencia ponderante surge al analizar las negatividades de la función $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$. Para el caso de ρ_{S_2} , se tiene una distribución WSM completamente positiva debido a que commuta con el Hamiltoniano inicial H . En cambio, el estado ρ_{S_3} presenta coherencias, evidenciándose estas

negatividades en forma de *franjas de interferencia*, cuyas contribuciones son anuladas en el cálculo de la distribución de trabajo $P_W(w)$.

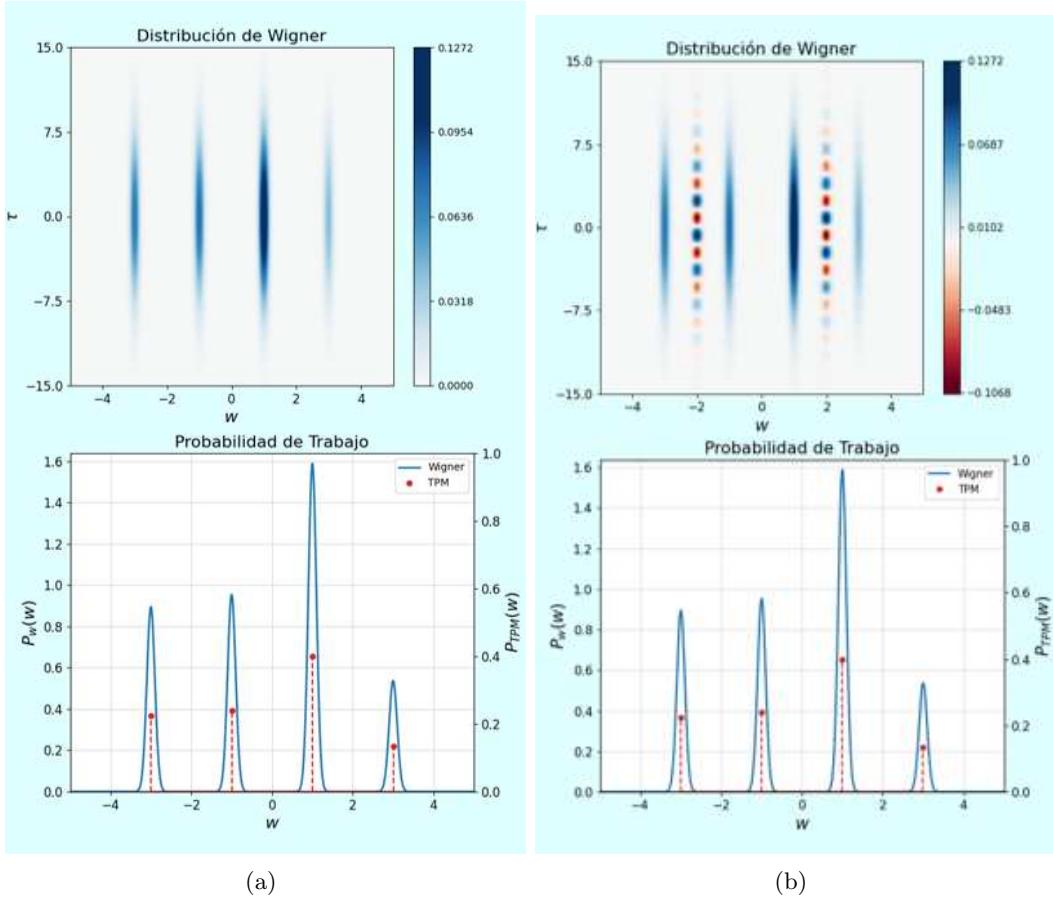


Figura 4.14: Estado final de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para los estados: (a) ρ_{S_2} (sin coherencias); (b) ρ_{S_3} (con coherencias). Los parámetros utilizados son $T = 1$ y $\sigma = 0,1$.

Como comentario final, recordemos la expresión dada por la ecuación (4.51) que relaciona la variación media de energía $\langle \Delta E \rangle$ con el valor medio de trabajo $\langle w \rangle_{\tau=0}$ sobre la recta $\tau = 0$. Este resultado debería ser independiente del proceso y del estado ρ_S elegido. Para corroborar esto, puede realizarse un gráfico de la forma $\sqrt{\frac{\pi}{2}} \langle w \rangle_{\tau=0}$ vs. σ y, si corresponde a una recta, ver que la pendiente coincide con la variación de energía media $\langle \Delta E \rangle$. En la Figura 4.15, analizamos el caso para el estado ρ_{S_3} con un tiempo de duración del proceso $T = 1$. Vemos que se corresponde a una relación lineal y su pendiente verifica ser el valor medio de la diferencia de energía. Es más, haciendo este mismo análisis para cualquier estado ρ_S y tiempo T se verifica esta relación, comprobándose así (numéricamente) la ecuación (4.51).

El análisis que haremos en la siguiente parte tiene que ver con los procesos que se llevan de forma adiabática. Es decir, analizaremos la dinámica de la distribución WSM cuando se tienen tiempos T lo suficientemente grandes para no permitir las transiciones energéticas entre niveles (de manera que el proceso se lleva a cabo infinitamente lento). De acuerdo al análisis hecho en la Figura 4.5, llegamos a la conclusión de que $T \sim 10$ ó inclusive $T \sim 100$ son suficientes para nuestro propósito. Por medio de distintas simulaciones numéricas, lograremos verificar estos hechos y luego recurrir a un atajo adiabático que permita obtener los mismos resultados, pero en un tiempo finito.

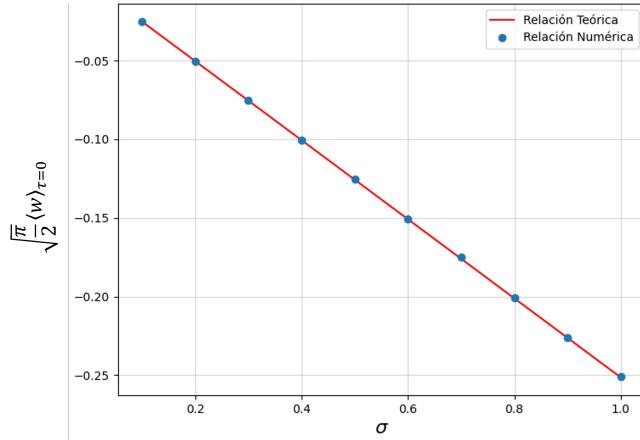


Figura 4.15: Relación $\sqrt{\frac{\pi}{2}} \langle w \rangle_{\tau=0}$ vs. σ cuya pendiente está relacionada con la variación media de energía del sistema $\langle \Delta E \rangle$. Se tomó como ejemplo $T = 1$ y el estado ρ_{S_3} .

4.2.4. Régimen adiabático de la distribución WSM

Iniciaremos con el estudio del estado ρ_{S_1} definido por (4.155). En primer lugar, debemos asegurar qué tiempos T de duración del protocolo son considerados *suficientemente grandes* para que este sistema tenga un comportamiento muy similar al régimen adiabático. Para ello, resulta conveniente analizar cómo es la forma que adopta la distribución WSM al final de la evolución. En la Figura 4.16 se puede visualizar, para distintos tiempos T , el estado final de la distribución $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$ (paneles superiores) y la distribución marginalizada $P_w(w)$ en comparación con la distribución del protocolo TPM (paneles inferiores). Se ilustran los casos $T = 0$, $T = 1$ y $T = 10$, manteniendo una dispersión $\sigma = 0,5$ constante.

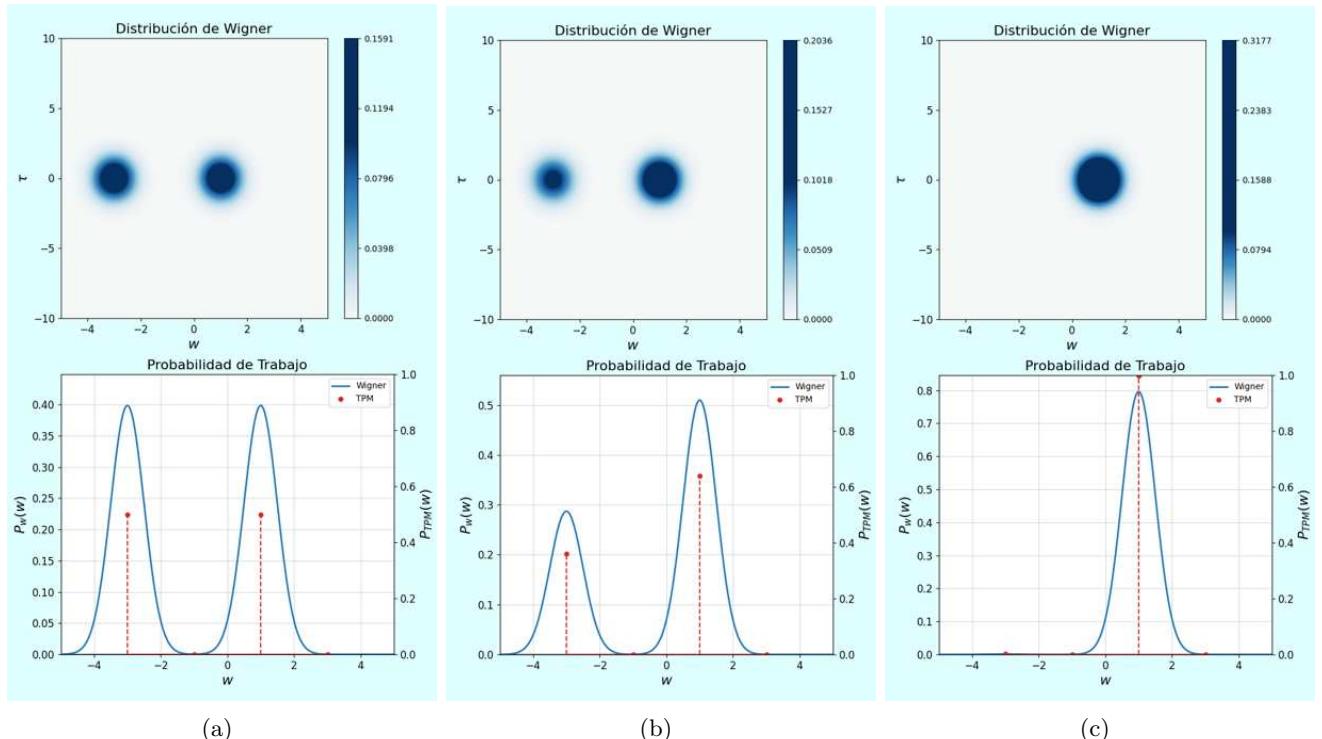


Figura 4.16: Estado final de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_1} . Se usó una dispersión $\sigma = 0,5$ y un tiempo total: (a) $T = 0$; (b) $T = 1$; (c) $T = 10$.

Vemos que la posición de los picos en las distribuciones de trabajo coincide y no se encuentran negatividades en la distribución WSM por tratarse de un estado sin coherencias al inicio de la dinámica. Por otra parte, la evolución correspondiente a $T = 0$ indica que no interviene protocolo alguno; es decir, se realiza una proyección en σ_z del estado ρ_{S_1} para, inmediatamente después, hacer una proyección en σ_x . Esto evidencia dos picos equiprobables en las distribuciones TPM y $P_W(w)$, lo cual tiene sentido ya que la primera medición no afecta al sistema (por ya estar en un autoestado de $H \propto \sigma_z$), mientras que la segunda medición tiene probabilidad $1/2$ de proyectarse en cada uno de los autoestados correspondientes a $\tilde{H} \propto \sigma_x$.

A medida que se aumenta el valor de T (es decir, el protocolo se realiza con mayor lentitud), uno de los picos va decreciendo en probabilidad y, por ende, el otro aumenta. Tal es este fenómeno que para un tiempo *suficientemente grande* (en este caso, alcanza con $T \sim 10$) el estado final del sistema tiene como único resultado un trabajo realizado $w = E$, que correspondería al caso donde se inicia con energía E para terminar con energía $2E$. Estas energías están asociadas al mismo autoestado $|+(t)\rangle$, definido en (4.106), para tiempos $t = 0$ y $t = T$, respectivamente; en particular, recordemos que $|e\rangle = |+(0)\rangle$. Como el estado inicial utilizado puede ser expresado también como $\rho_{S_1} = |e\rangle\langle e|$, vemos que se evidencia el comportamiento adiabático del sistema.

Otra manera de verificar esto es mediante la variación media de energía $\langle \Delta E \rangle$ y el valor medio de trabajo de las distribuciones $P_W(w)$ y del protocolo TPM obtenidos al final del proceso. A través de las relaciones halladas en (1.93) y (4.74), se concluyó que estas tres magnitudes deben coincidir cuando se llevan a cabo tiempos T de duración del protocolo que corroboran el límite adiabático. En la Figura 4.17 se visualiza que estos tres valores coinciden al final de la evolución para cualquier T debido a que el estado inicial del sistema no presenta coherencias en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . Por lo cual, este argumento no sería de gran ayuda dado que ocurre para cualquier tiempo T empleado. Sin embargo, con un análisis más detallado, veremos que estos tres valores convergen a un cierto valor para tiempos $T \rightarrow \infty$; en particular, ya lo hacen para tiempos $T \sim 10$. El valor al que convergen para este caso de estudio es $\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle = E$. Notar que esto tiene sentido ya que recuperamos el mismo resultado obtenido para las simulaciones mostradas en la Figura 4.16, corroborándose así el límite adiabático para tiempos $T \sim 10$.

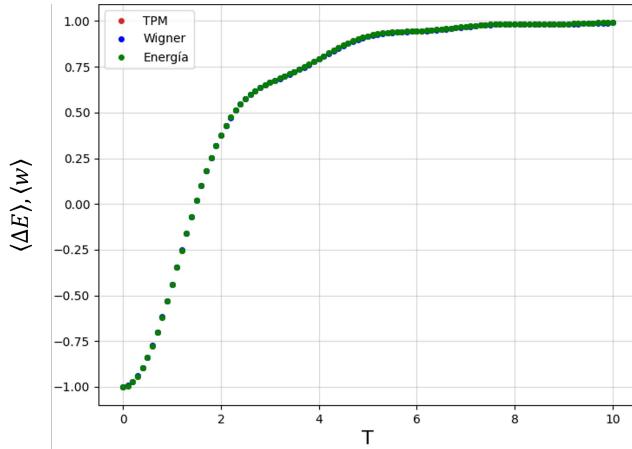


Figura 4.17: Valores medios de energía $\langle \Delta E \rangle$ y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM al final de la evolución en función de la duración del protocolo T para el estado inicial ρ_{S_1} . Esta gráfica es independiente de la dispersión σ utilizada. Podemos ver que la misma converge al valor $\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle = E$ para $T \rightarrow \infty$.

Debe quedar claro que, hasta el momento, solo analizamos el final de la evolución para un cierto estado inicial ρ_{S_1} con el objetivo de tener una verificación (o una primera idea) de cuáles son las condiciones para el cumplimiento del límite adiabático. Sin embargo, no sería un análisis completo si no se estudiara qué ocurre durante la implementación del protocolo. Para ello, resulta útil el cálculo de las probabilidades de no-transición entre niveles energéticos del sistema (es decir, la probabilidad de permanecer en el mismo estado a lo largo del proceso) esperando que a tiempos de duración T , donde se tenga el límite adiabático, estos valores permanezcan constantes. En la Figura 4.18 puede corroborarse que para $T = 0,1$ y $T = 1$ la variación de la probabilidad de no-transición entre niveles es apreciable, mientras que para $T = 10$ y $T = 100$ las mismas permanecen (prácticamente) constantes, teniéndose una nueva verificación del límite adiabático para $T \sim 10$.

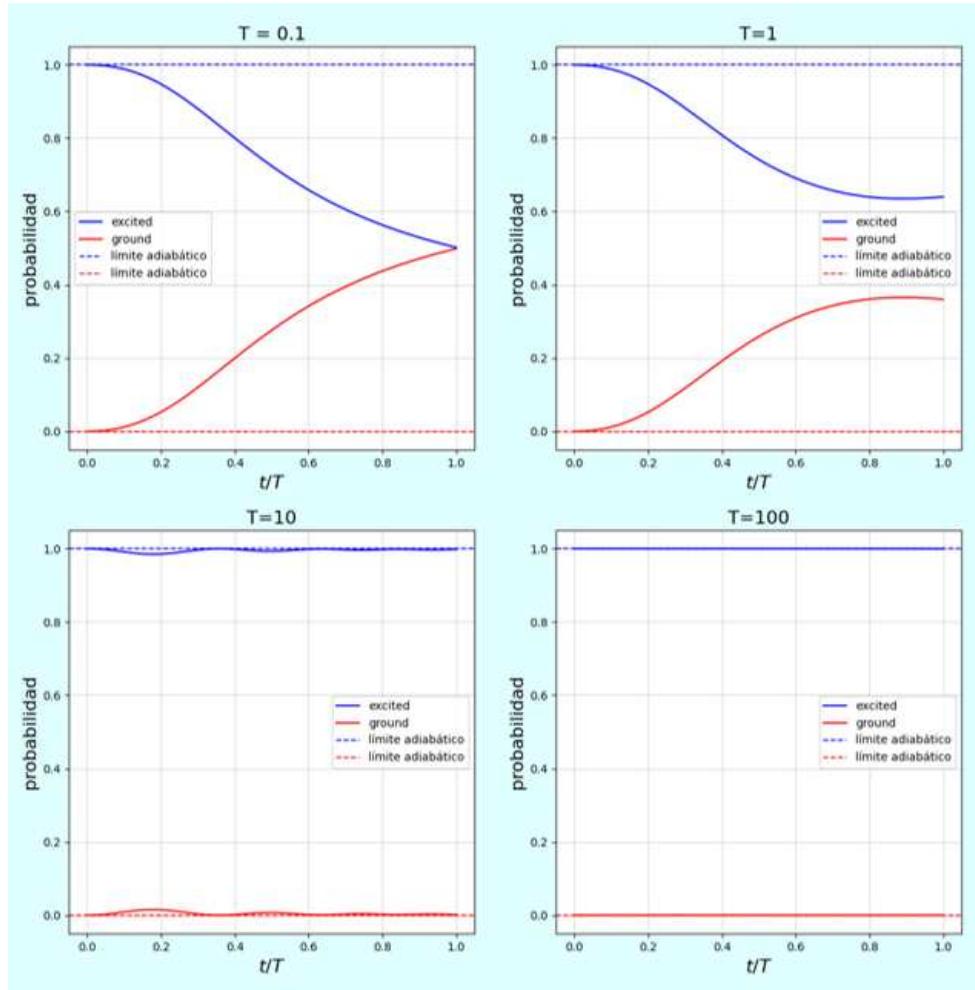


Figura 4.18: Probabilidades de no-transición para el estado ρ_{S_1} en función del tiempo normalizado t/T para distintos tiempos T de duración del protocolo. En línea de trazo corto se muestra cómo deberían comportarse, en el límite adiabático, cada uno de los estados.

Dada toda la certificación que recolectamos, puede hacerse un análisis en base a la evolución de la distribución $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$ y la distribución marginalizada $P_W(w)$ para un tiempo $T = 10$. Si en verdad estuviésemos bajo las condiciones del límite adiabático, deberíamos observar que el sistema se queda en el autoestado $|+(t)\rangle \forall t \in [0, T]$. En la Figura 4.19 puede verse cómo ocurre el desplazamiento (casi) rígido de la campana gaussiana, que verifica este fenómeno. Vemos que para un tiempo $t = \frac{1}{5}T$ se produce un pequeño alzamiento (casi despreciable) de un valor de trabajo no correspondiente al límite

adiabático (probabilidad de transición entre niveles), siendo estas las consecuencias de estar en las aproximaciones del régimen adiabático (y no en un proceso infinitamente lento). Si se aumentara el valor T , se observaría un mejor comportamiento del desplazamiento rígido de la campana.

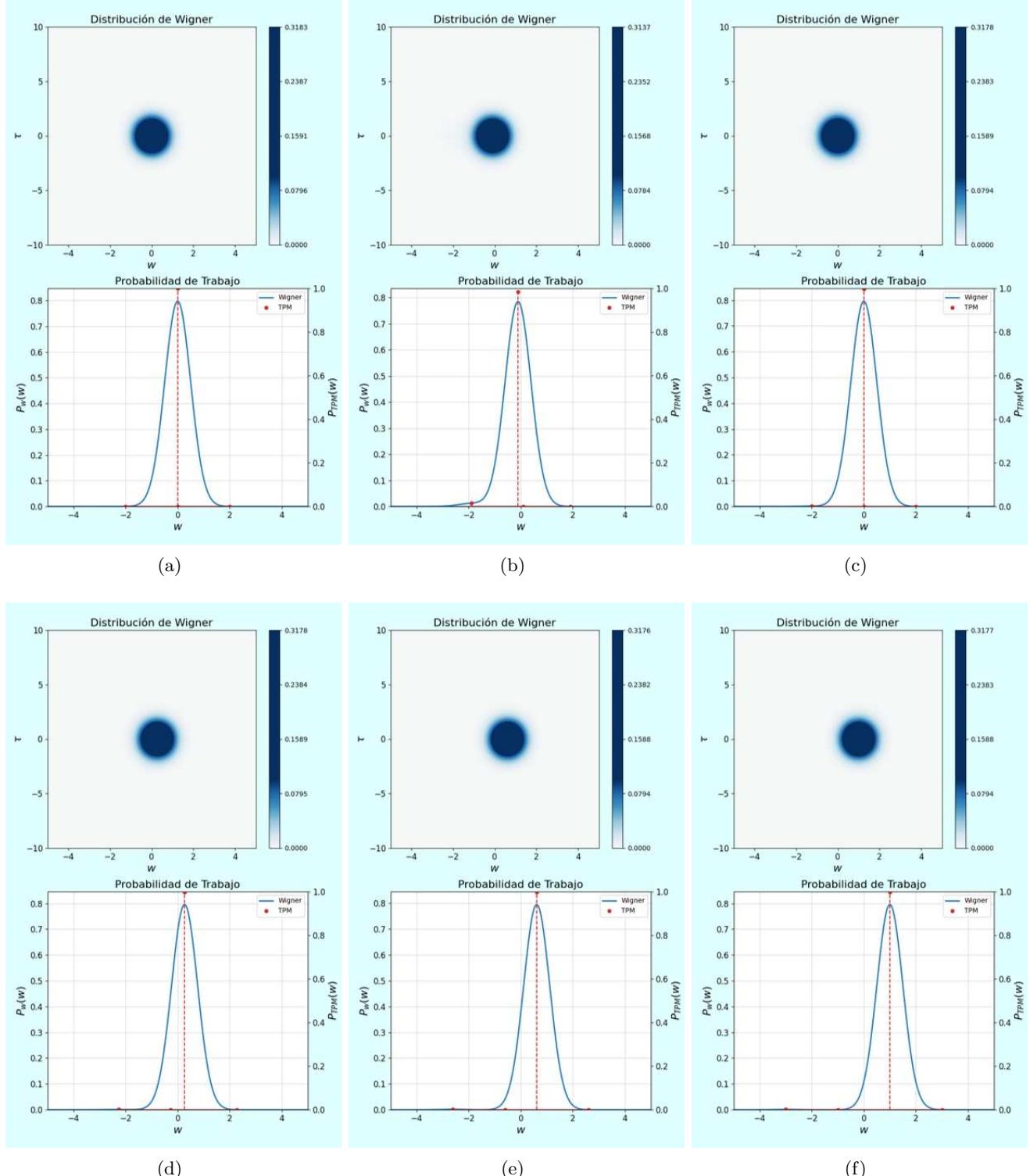


Figura 4.19: Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_1} con $T = 10$ y $\sigma = 0.5$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{5}T$; (c) $t = \frac{2}{5}T$; (d) $t = \frac{3}{5}T$; (e) $t = \frac{4}{5}T$; (f) $t = T$.

Además, podemos analizar la evolución temporal de los valores medios de la diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ y de trabajo para el protocolo TPM y para la distribución WSM, donde deben coincidir los tres por no presentar ρ_{S_1} coherencias en el estado inicial. En la Figura 4.20 se muestra esto para el caso donde $T = 10$ y $\sigma = 0,5$; puede verse que la forma que presenta la curva de energía/trabajo es la misma a la presentada por $w_{++}(t)$ en la Figura 4.1 (debido a la expresión funcional del protocolo $\lambda(t)$), que corresponde al trabajo que realiza un sistema que se mantiene en $|+(t)\rangle \forall t \in [0, T]$. Es decir, nuevamente verificamos que el sistema presenta un comportamiento adiabático para este T elegido. Cabe destacar que si el protocolo tuviese una forma funcional distinta a la de un protocolo lineal, la curva energía/trabajo en función del tiempo no coincidiría del todo bien en su forma respecto a la exhibida por $w_{++}(t)$ en la Figura 4.1. Esto es debido a que esta última se grafica en función del protocolo. Sin embargo, puede optarse por comparar la evolución de estos valores medios con la gráfica de $w_{++}(t)$ explícitamente en función del tiempo y no del protocolo $\lambda(t)$.

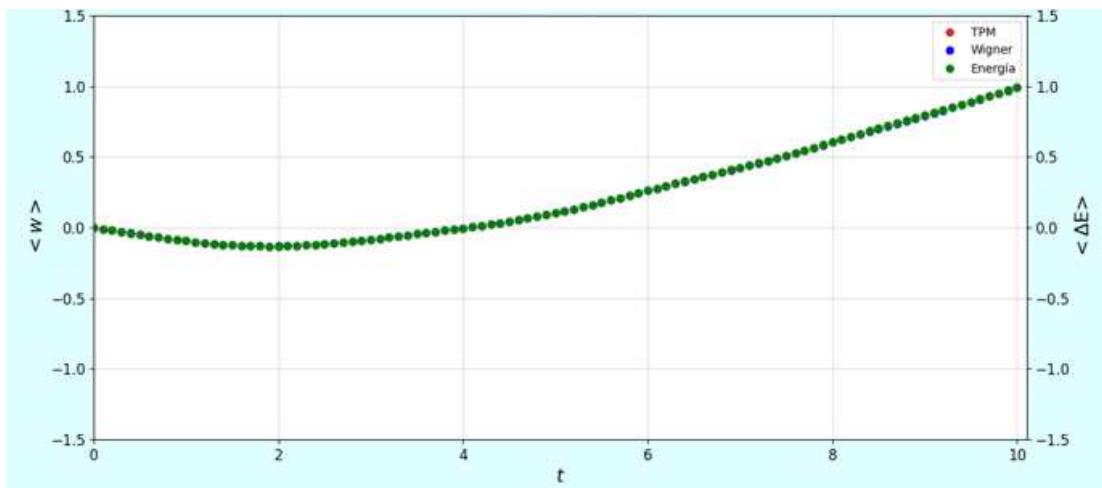


Figura 4.20: Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_1} con parámetros $T = 10$ y $\sigma = 0,5$. Se observa que estas tres magnitudes coinciden, a todo tiempo, con la forma de $w_{++}(t)$, evidenciando el comportamiento adiabático.

Proseguiremos con el mismo análisis hecho para el estado ρ_{S_2} definido por (4.156). Nuevamente, debemos averiguar qué tiempos T de duración del protocolo son considerados los *suficientemente grandes* para que el sistema tenga un comportamiento similar al régimen adiabático. Para ello, estudiaremos la forma que adopta la distribución WSM al final de la evolución. En la Figura 4.21 se visualiza, para distintos tiempos T , el estado final de la distribución $P_{WSM}(w, \tau)$ (paneles superiores) y la distribución marginalizada $P_W(w)$ en comparación con la distribución del protocolo TPM (paneles inferiores). Los casos mostrados corresponden a $T = 0$, $T = 1$ y $T = 10$, manteniendo una dispersión $\sigma = 0,1$ constante.

Puede apreciarse que la posición de los picos en las distribuciones de trabajo coincide y no se encuentran negatividades en la distribución WSM por tratarse de un estado sin coherencias al inicio de la dinámica. Por otra parte, la evolución correspondiente a $T = 0$ indica que no interviene protocolo alguno; es decir, se realiza una proyección en σ_z del estado ρ_{S_2} para, inmediatamente después, hacer una proyección en σ_x . Esto refleja la aparición de cuatro picos en las distribuciones TPM y $P_W(w)$, implicando que el trabajo tiene la posibilidad de tener cuatro valores diferentes. Esto es así porque nuestro estado puede iniciar con energía E ó $-E$ para luego finalizar con energía $2E$ ó $-2E$.

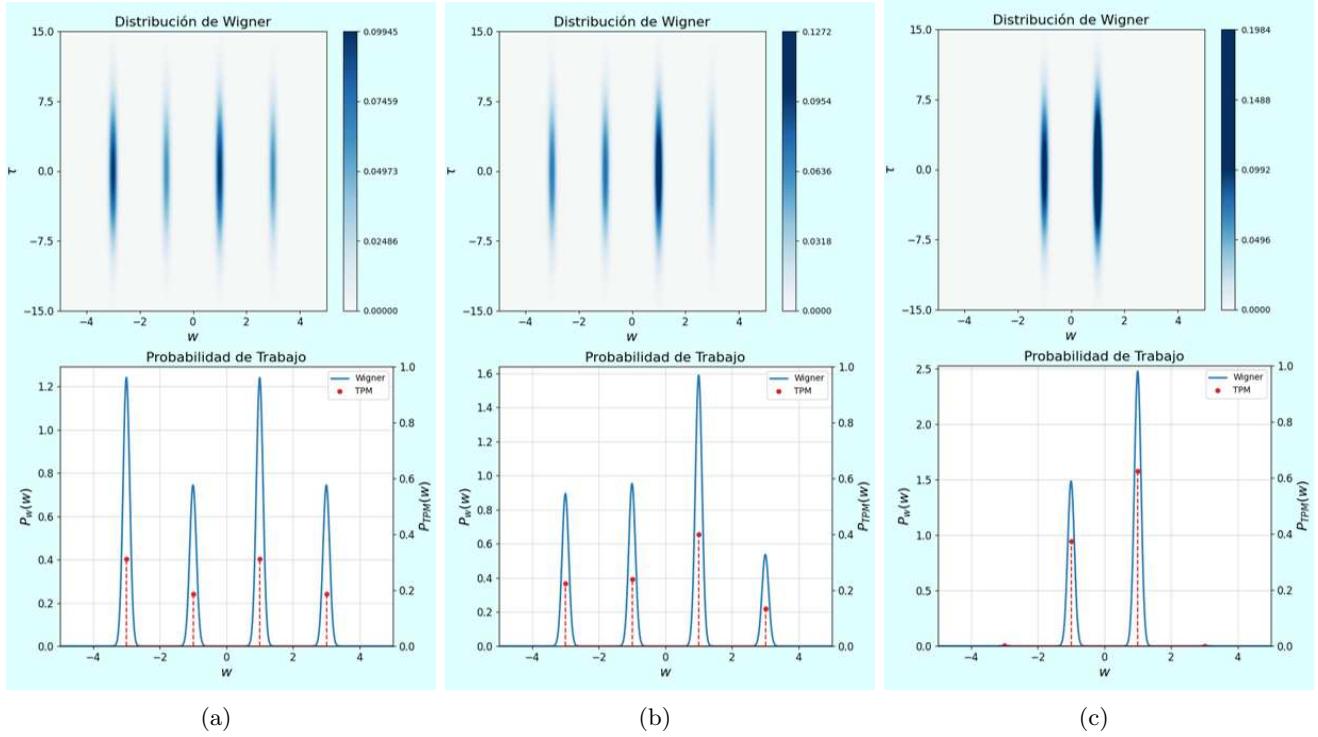


Figura 4.21: Estado final de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_2} . Se usó una dispersión $\sigma = 0,1$ y un tiempo total: (a) $T = 0$; (b) $T = 1$; (c) $T = 10$.

A medida que se aumenta el valor de T (por lo tanto, el protocolo se realiza con mayor lentitud), dos de los picos presentados van decreciendo en probabilidad y, por ende, los otros dos aumentan. Desde aquí, se tiene que para un tiempo *suficientemente grande* (en este caso, alcanza con $T \sim 10$) el estado final del sistema puede tener dos resultados de trabajo posibles: $w = \pm E$. Puede verse que si $w = \pm E$ entonces corresponde al caso donde se inicia la dinámica con energía $\pm E$ para finalizar con energía $\pm 2E$. Es decir, cada valor de trabajo encuentra sus mediciones de energía asociadas al mismo autoestado $|\pm(t)\rangle$, definidos en (4.106) y (4.107), para tiempos $t = 0$ y $t = T$, respectivamente; en particular, recordemos que $|e\rangle = |+(0)\rangle$ y $|g\rangle = |-(0)\rangle$. Como el estado inicial utilizado puede ser expresado como una combinación lineal de los estados $|e\rangle\langle e|$ y $|g\rangle\langle g|$ entonces queda en evidencia el comportamiento adiabático del sistema. Es más, se aprecia que, en este límite, ambos picos dados por la distribución TPM tienen probabilidad $5/8$ y $3/8$ para los valores de trabajo E y $-E$, respectivamente, siendo estos coincidentes con los términos diagonales del estado inicial ρ_{S_2} .

Una forma alternativa de comprobar que nos encontramos en el régimen adiabático es mediante la variación media de energía $\langle \Delta E \rangle$ y el valor medio de trabajo de las distribuciones $P_w(w)$ y del protocolo TPM obtenidos al final del proceso. Por medio de las expresiones (1.93) y (4.74), se tiene que estas tres magnitudes deben coincidir cuando se llevan a cabo tiempos T de duración del protocolo que corroboran el límite adiabático. En la Figura 4.22 se visualiza que estos tres valores coinciden al final de la evolución para cualquier T debido a que el estado inicial del sistema no presenta coherencias en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . Esto repercute en que este criterio no resulte de gran ayuda para la identificación de si estamos o no en el régimen adiabático. Sin embargo, podremos ver que estos tres valores convergen a un cierto valor para tiempos $T \rightarrow \infty$; en particular, ya lo hacen para tiempos $T \sim 10$. El valor al que convergen para este caso de estudio es $\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle = E/4$. Notemos

que este resultado coincide con lo obtenido en las simulaciones mostradas de la Figura 4.21, ya que la probabilidad de $5/8$ y $3/8$ para los valores de trabajo E y $-E$, respectivamente, que lanza el protocolo TPM conduce a que el valor medio de trabajo en el régimen adiabático para este estado resulta ser $E/4$.

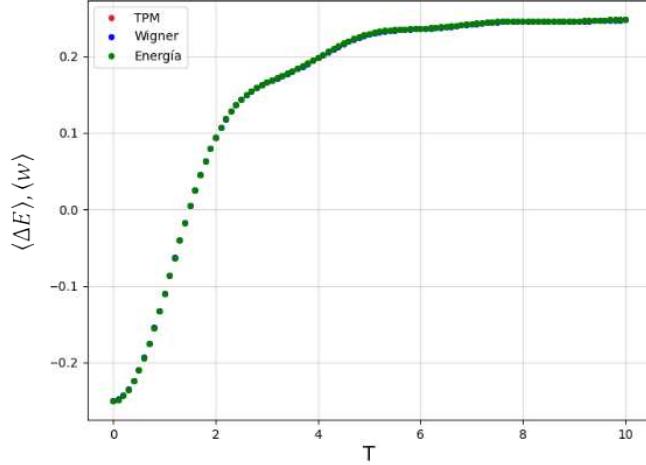


Figura 4.22: Valores medios de energía $\langle \Delta E \rangle$ y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM al final de la evolución en función de la duración del protocolo T para el estado inicial ρ_{S_2} . Esta gráfica es independiente de la dispersión σ utilizada. Podemos ver que la misma converge al valor $\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle = E/4$ para $T \rightarrow \infty$.

Por el momento, no hicimos más que estudiar el final de la evolución para un dado estado inicial ρ_{S_2} con el propósito de obtener una verificación (o clarificación) de las condiciones para el cumplimiento del límite adiabático. A continuación, analizaremos la dinámica durante la aplicación del protocolo, con lo que resulta útil el cálculo de las probabilidades de no-transición entre niveles energéticos del sistema. Esta magnitud debe ser nula para tiempos de duración T donde se consiga el límite adiabático. En la Figura 4.23 puede verse que para $T = 0.1$ y $T = 1$ la variación en la probabilidad de no-transición entre niveles es apreciable, mientras que para $T = 10$ y $T = 100$ las mismas permanecen (prácticamente) constantes. Así, llegamos a que para un tiempo de protocolo $T \sim 10$ se obtiene una aproximación bastante buena del límite adiabático del sistema.

Podemos ver que, con esta información, los resultados obtenidos para los estados iniciales ρ_{S_1} y ρ_{S_2} no difieren mucho entre sí. Ambos sistemas parecieran lograr el régimen adiabático para un tiempo de protocolo $T \sim 10$, siendo que ambos no presentan coherencias en el estado inicial. La única diferencia que es visible (pero parece no importar en la condición del régimen adiabático) es que uno admite un único valor de trabajo cuando la evolución es lo suficientemente lenta, mientras que el otro tiene dos posibles.

En lo que sigue, haremos un estudio en base a la evolución de la distribución $P_{WSM}(w, \tau)$ y la distribución marginalizada $P_W(w)$ para un tiempo $T = 10$. Si se cumpliesen las condiciones para el régimen adiabático, deberíamos observar que el sistema permanece en los autoestados $|\pm(t)\rangle \forall t \in [0, T]$. En la Figura 4.24 puede verse cómo el sistema evoluciona mediante el desplazamiento (casi) rígido de los picos gaussianos, corroborándose este fenómeno. Vemos que para un tiempo $t = \frac{1}{5}T$ se produce un pequeño alzamiento (casi despreciable) de los valores de trabajo correspondientes a las transiciones entre niveles, tal como sucedía para el caso de ρ_{S_1} . Si se aumentara el valor T , se observaría un mejor

comportamiento en el desplazamiento rígido de los picos.

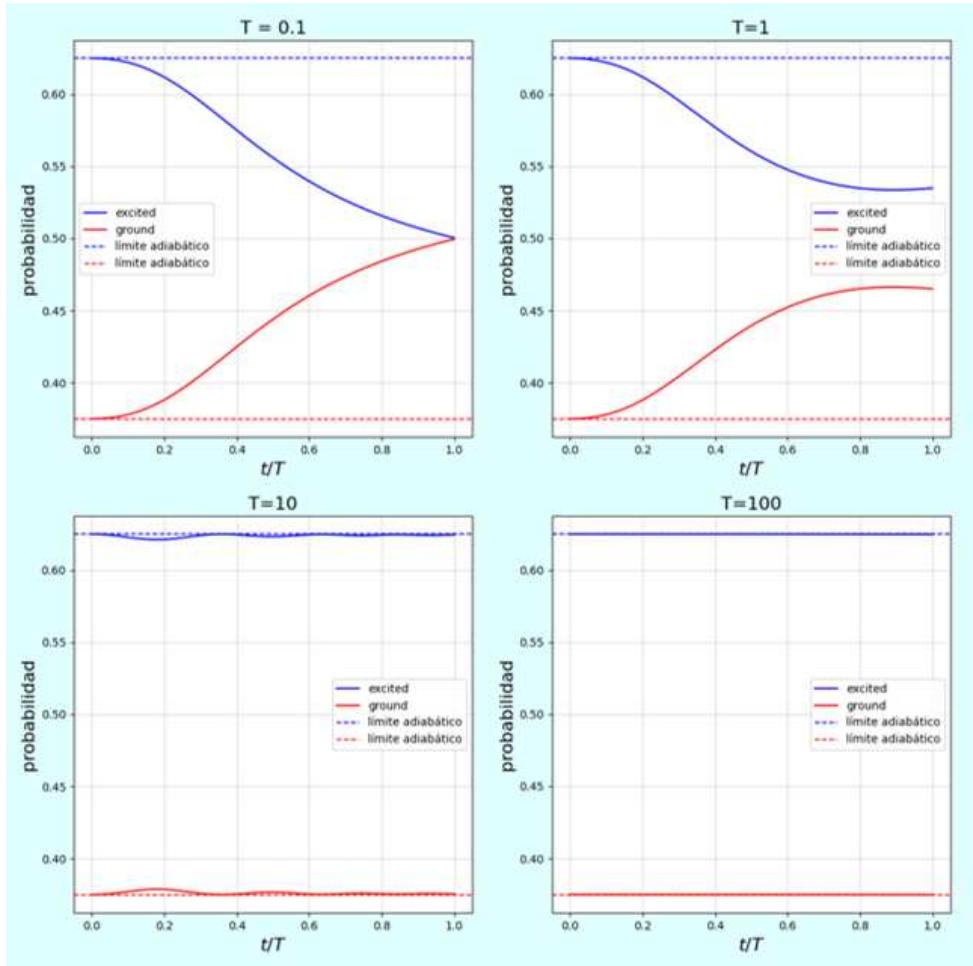


Figura 4.23: Probabilidades de no-transición para el estado ρ_{S_2} en función del tiempo normalizado t/T para distintos tiempos T de duración del protocolo. En línea de trazo corto se muestra cómo deberían comportarse, en el límite adiabático, cada uno de los estados.

No puede ser coincidencia que para un tiempo $t = \frac{1}{5}T$, bajo las condiciones del límite adiabático, tanto para ρ_{S_1} como para ρ_{S_2} se observara un pequeño alzamiento en los valores de trabajo que no corresponden a este comportamiento. Si analizamos esto con precaución, este valor de tiempo coincide con el momento en que el *gap* entre niveles de energía se minimiza cuando usamos el protocolo lineal $\lambda(t) = \frac{t}{T}$, como mostramos en (4.145). Esto recobra mucho más sentido, debido a que el coeficiente $\beta_{+-}(t)$, definido originalmente en (1.76), tiene que ser muy chico para visualizar un comportamiento adiabático en el sistema, pero su forma funcional depende inversamente del *gap* existente entre los niveles de energía. Por este motivo, vemos que el “peor momento” de adiabaticidad se tiene en este valor particular de tiempo.

Para ya concluir el análisis para el estado dado por ρ_{S_2} , estudiaremos la evolución temporal de los valores medios de la diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ y de trabajo para el protocolo TPM y para la distribución WSM, donde deben coincidir los tres por no presentar ρ_{S_2} coherencias en el estado inicial. En la Figura 4.25 se muestra esto para el caso donde $T = 10$ y $\sigma = 0,1$; se ve que, a diferencia de cómo ocurría para ρ_{S_1} , la curva de energía/trabajo no es idéntica a ninguna de las presentadas en la Figura 4.1 debido a la participación simultánea de los valores $w_{++}(t)$ y $w_{--}(t)$. Por otro lado, puede verse que

el valor que toma la curva energía/trabajo al final de la evolución corresponde a $E/4$, siendo una nueva comprobación de que el límite adiabático se alcanza satisfactoriamente.

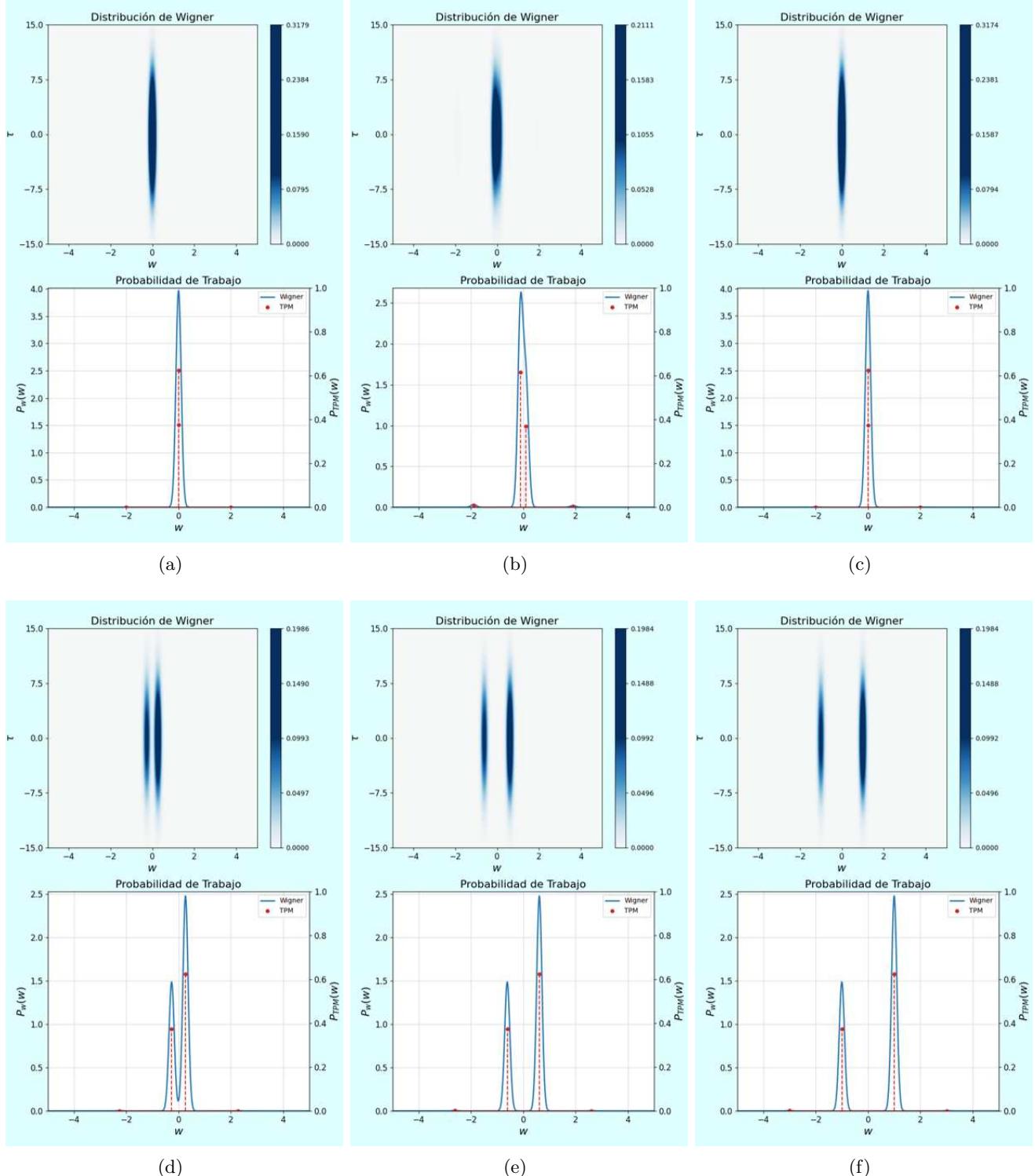


Figura 4.24: Evolución de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S2} con $T = 10$ y $\sigma = 0.1$. Las imágenes corresponden a tiempos: (a) $t = 0$; (b) $t = \frac{1}{5}T$; (c) $t = \frac{2}{5}T$; (d) $t = \frac{3}{5}T$; (e) $t = \frac{4}{5}T$; (f) $t = T$.

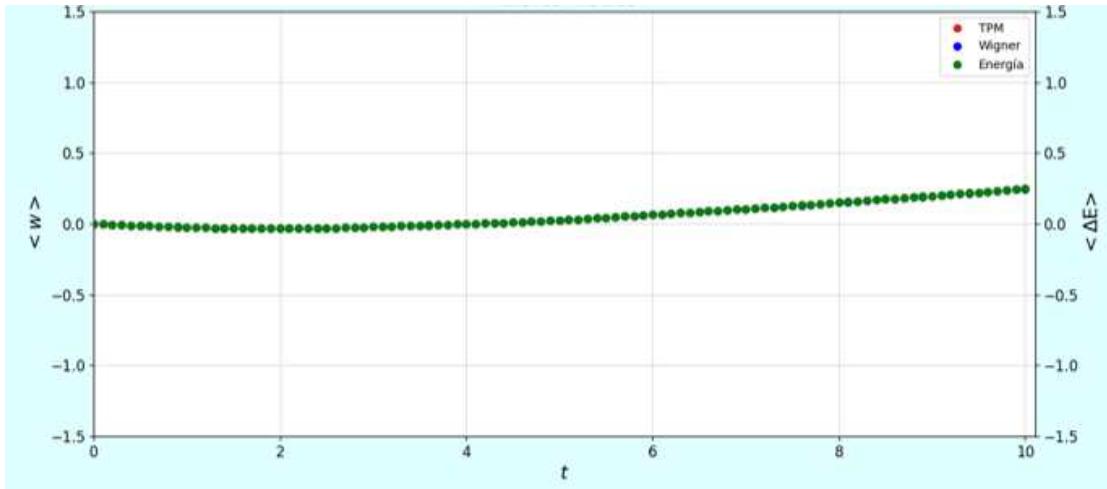


Figura 4.25: Valores medios de diferencia de energía $\langle \Delta E \rangle$ del sistema y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM a lo largo de la evolución para el estado ρ_{S_2} con parámetros $T = 10$ y $\sigma = 0,1$. Se observa que estas tres magnitudes coinciden a todo tiempo (debido a que el estado inicial no presenta coherencias) adoptando al final de la evolución el valor $E/4$ (debido al comportamiento adiabático).

Desarrollaremos el estudio para el estado ρ_{S_3} definido por (4.157), el cual presenta coherencias en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . Analizaremos si esto lleva a un cambio en el tiempo T necesario para que el sistema tenga un comportamiento comparable al régimen adiabático, estudiando la forma que adopta la distribución WSM al final de la evolución. En la Figura 4.22 se aprecia, para distintos tiempos T , el estado final de la distribución $P_{\text{WSM}}(w, \tau)$ (paneles superiores) y la distribución marginalizada $P_W(w)$ en comparación con la distribución del protocolo TPM (paneles inferiores). Los casos mostrados corresponden a $T = 0$, $T = 4$ y $T = 100$, manteniendo una dispersión $\sigma = 0,1$ constante.

Puede establecerse como principal diferencia, respecto a los estados ρ_{S_1} y ρ_{S_2} anteriormente analizados, que se muestran negatividades en la distribución WSM. Esto es únicamente debido a las coherencias presentes al inicio de la dinámica. Entrando en detalle, la evolución correspondiente a $T = 0$ implica que no hay intervención alguna del protocolo; es decir, se realiza una proyección en σ_z del estado ρ_{S_3} para, inmediatamente después, hacer una proyección en σ_x . Esto refleja la aparición de cuatro picos en las distribuciones TPM y $P_W(w)$, derivando en que el trabajo tiene la posibilidad de tener cuatro valores diferentes, así como sucedía con ρ_{S_2} . Esto es así porque nuestro estado puede iniciar con energía E ó $-E$ para luego finalizar con energía $2E$ ó $-2E$.

A medida que se aumenta el valor de T (por lo tanto, el protocolo se realiza con mayor lentitud), dos de los picos presentados van decreciendo en probabilidad y, por ende, los otros dos aumentan. Es más, podemos ver que incluso las franjas de interferencia (las cuales delatan las coherencias del estado inicial) también van desapareciendo. Por lo cual, se tiene que para un tiempo *suficientemente grande* (en este caso, alcanza con $T \sim 100$) el estado final del sistema puede tener dos resultados de trabajo posibles: $w = \pm E$. Esto podría resultar sorprendente, ya que los términos de coherencia que presenta el estado ρ_{S_3} parecieran no influir en el valor medio de trabajo cuando nos encontramos en el límite adiabático. Sin embargo, esto fue probado en (4.74), de donde podemos concluir que el comportamiento adiabático de ρ_{S_2} y ρ_{S_3} resultan ser idénticos por poseer los mismos términos en su diagonal. Lo mismo ocurre con el valor medio de trabajo dado por la distribución del protocolo TPM (ver ecuación 1.93).

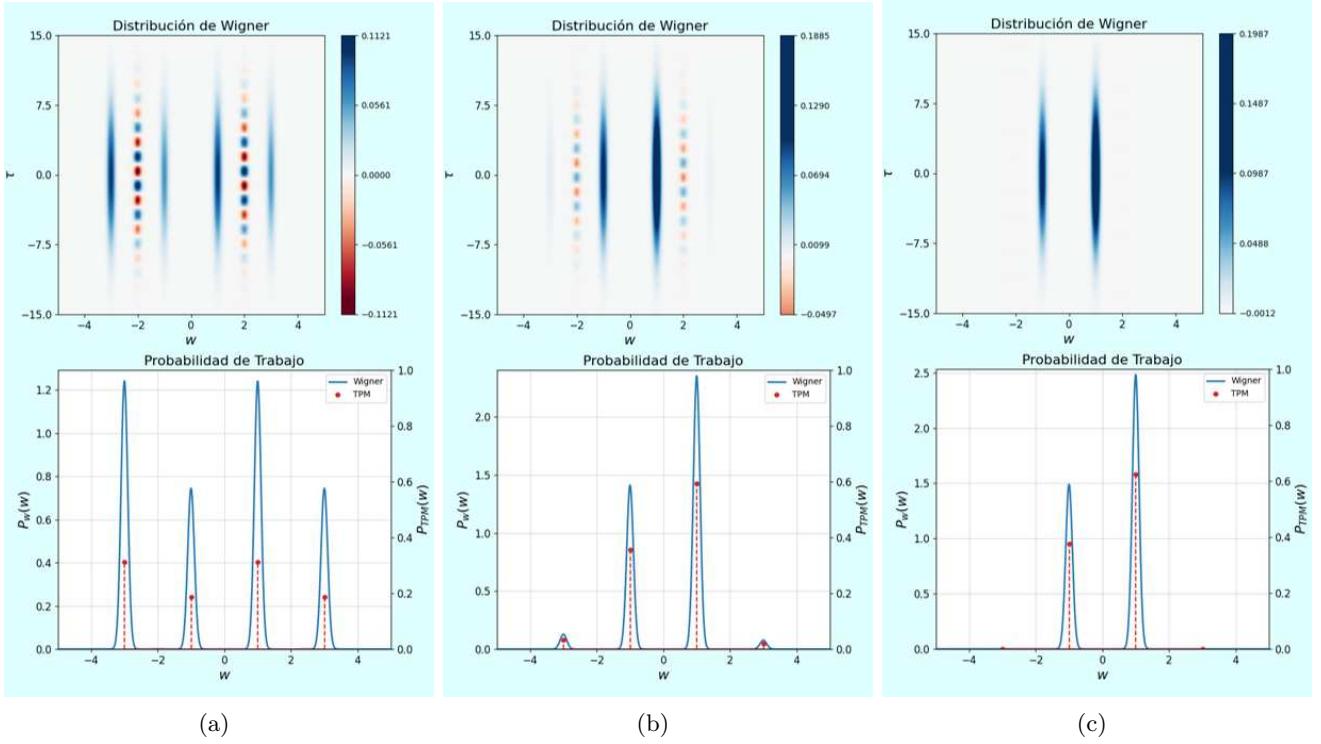


Figura 4.26: Estado final de la distribución WSM, su marginal de trabajo y el protocolo TPM para el estado ρ_{S_3} . Se usó una dispersión $\sigma = 0,1$ y un tiempo total: (a) $T = 0$; (b) $T = 4$; (c) $T = 100$.

A través de este análisis, podría parecer que no existe diferencia alguna en la implementación del límite adiabático para el estado ρ_{S_2} y ρ_{S_3} . Esto resulta ser una verdad a medias porque si bien deben reproducir los mismos resultados cuando se alcance este régimen, no tendrán la misma condición en cuanto al tiempo T . Sin ir más lejos, podemos comparar las Figuras 4.21 y 4.26 y verificar que para el estado ρ_{S_2} solo es requisito $T \sim 10$, mientras que ρ_{S_3} parecerá necesitar $T \sim 100$.

Para poder ver más claro este último planteo, analicemos la variación media de energía $\langle \Delta E \rangle$ y el valor medio de trabajo de las distribuciones $P_W(w)$ y del protocolo TPM que se obtienen al final del proceso. Por medio de las expresiones (1.93) y (4.74), se ve que estas tres magnitudes deben coincidir cuando se llevan a cabo tiempos T de duración del protocolo que corroboran el límite adiabático. En la Figura 4.27 fueron graficados estos tres valores para una dispersión $\sigma = 1,0$, donde no coinciden entre sí debido a las coherencias que presenta en el inicio el estado ρ_{S_3} . Sin embargo, vemos que estas tres magnitudes convergen a un cierto valor para tiempos $T \rightarrow \infty$; en particular, ya lo hacen para tiempos $T \sim 100$. El valor al que convergen para este caso de estudio es $\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle = E/4$, que coincide para el caso de ρ_{S_2} . Con ello, confirmamos que ambos estados tienen el mismo comportamiento cuando entran en el régimen adiabático, solo que se necesitan distintos tiempos T para cada uno.

Una característica no menor a destacar es el uso de la dispersión σ . Podemos notar que, con esta dispersión, el valor medio dado por la distribución WSM de trabajo no coincide con el valor medio de la diferencia de energía ni con el valor medio de trabajo del protocolo TPM. No obstante, si se usara una dispersión que cumpla el límite $8\sigma^2 \ll (E_n - E_{n'})^2$ ó $8\sigma^2 \gg (E_n - E_{n'})^2 \forall n \neq n'$ entonces nos acercaremos mejor al valor de $\langle W \rangle_{\text{TPM}}$ ó $\langle \Delta E \rangle$, respectivamente. Esto fue demostrado en las expresiones (4.35) y (4.46).

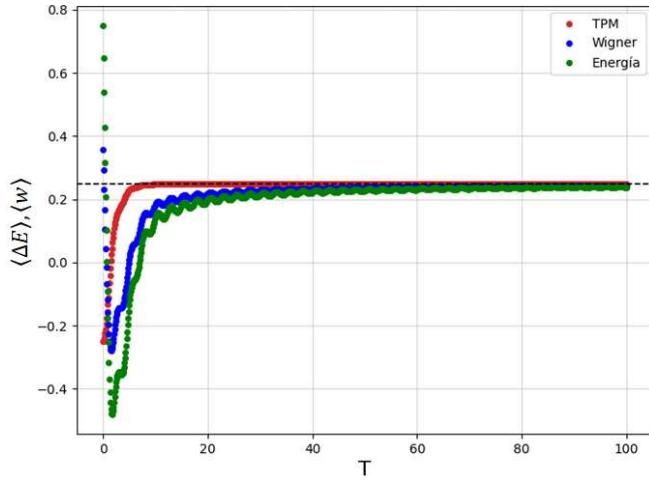


Figura 4.27: Valores medios de energía $\langle \Delta E \rangle$ y de trabajo $\langle W \rangle$ que se obtienen con la distribución $P_W(w)$ y el protocolo TPM al final de la evolución en función de la duración del protocolo T para el estado inicial ρ_{S_3} . Estas gráficas son obtenidas mediante una dispersión $\sigma = 1,0$. Podemos ver que las mismas convergen al valor $\langle \Delta E \rangle = \langle W \rangle = E/4$ para $T \rightarrow \infty$.

Somos capaces de dar una última prueba que evidencia la diferencia de tratar con estados que presenten coherencias al inicio de la evolución y aquellos que no para llegar al régimen adiabático, y es a través del estudio de las probabilidades de no-transición que existen durante la dinámica de aplicación del protocolo. En la Figura 4.28 puede verse que para $T = 0,1$, $T = 1$ e inclusive $T = 10$ la variación en la probabilidad de no-transición entre niveles es apreciable, mientras que para $T = 100$ las mismas permanecen (prácticamente) constantes. Resulta fascinante notar que los términos de coherencia agregados permiten una oscilación más violenta para las probabilidades de no-transición durante la evolución del sistema. Aquí, se evidencia mejor el porqué utilizar distintos tiempos T para los estados ρ_{S_2} y ρ_{S_3} siendo que se comportan de la misma manera cuando alcanzan el régimen adiabático. No cabe duda de que para un tiempo de protocolo $T \sim 100$ se obtiene una aproximación bastante buena del límite adiabático aplicado al sistema ρ_{S_3} .

Por una cuestión de completitud, mencionaremos cómo se lleva a cabo la evolución de la distribución $P_{WSM}(w, \tau)$ y la distribución marginalizada $P_W(w)$ para un tiempo $T = 100$. Esto no requiere una gran capacidad de análisis ya que, al cumplirse las condiciones del régimen adiabático, se obtendría la misma evolución que la mostrada en la Figura 4.24. Recordemos que, como hemos dicho, los estados ρ_{S_2} y ρ_{S_3} manifiestan el mismo comportamiento en su límite adiabático por poseer los mismos términos diagonales. Por lo tanto, el sistema también evolucionará de manera que los picos gaussianos se desplazarán (casi) rígidamente. En cuanto al estudio de valores medios de variación de energía y trabajo para las distribuciones WSM y TPM, las tres magnitudes coinciden en todo momento de la evolución por estar dentro del régimen adiabático, siendo su gráfica análoga a la que muestra la Figura 4.25. Además, el valor que tomará la curva energía/trabajo al final de la evolución corresponde a $E/4$, tal como ocurría para el caso de ρ_{S_2} .

A modo de finalizar el comportamiento adiabático para la distribución WSM, veremos cómo resulta la implementación del atajo adiabático propuesto por medio del Hamiltoniano \mathcal{H}_{AA} de la expresión (4.153). En particular, nos abocaremos a estudiar las probabilidades de no-transición que se obtienen con esta nueva dinámica y corroborar si cumple con lo esperado. Recordemos que los atajos adiabáticos deben reproducir los resultados que se obtienen cuando estamos bajo el régimen adiabático pero con el

uso de tiempos T que no sean necesariamente muy grandes (sin tener que recurrir a que la evolución sea infinitamente lenta). Es decir, queremos que con esta nueva dinámica los autoestados instantáneos $|+(t)\rangle$ y $|-(t)\rangle$, definidos en (4.106) y (4.107), conserven la probabilidad que presentan al inicio a lo largo de toda la evolución, independientemente del tiempo T empleado para el protocolo.

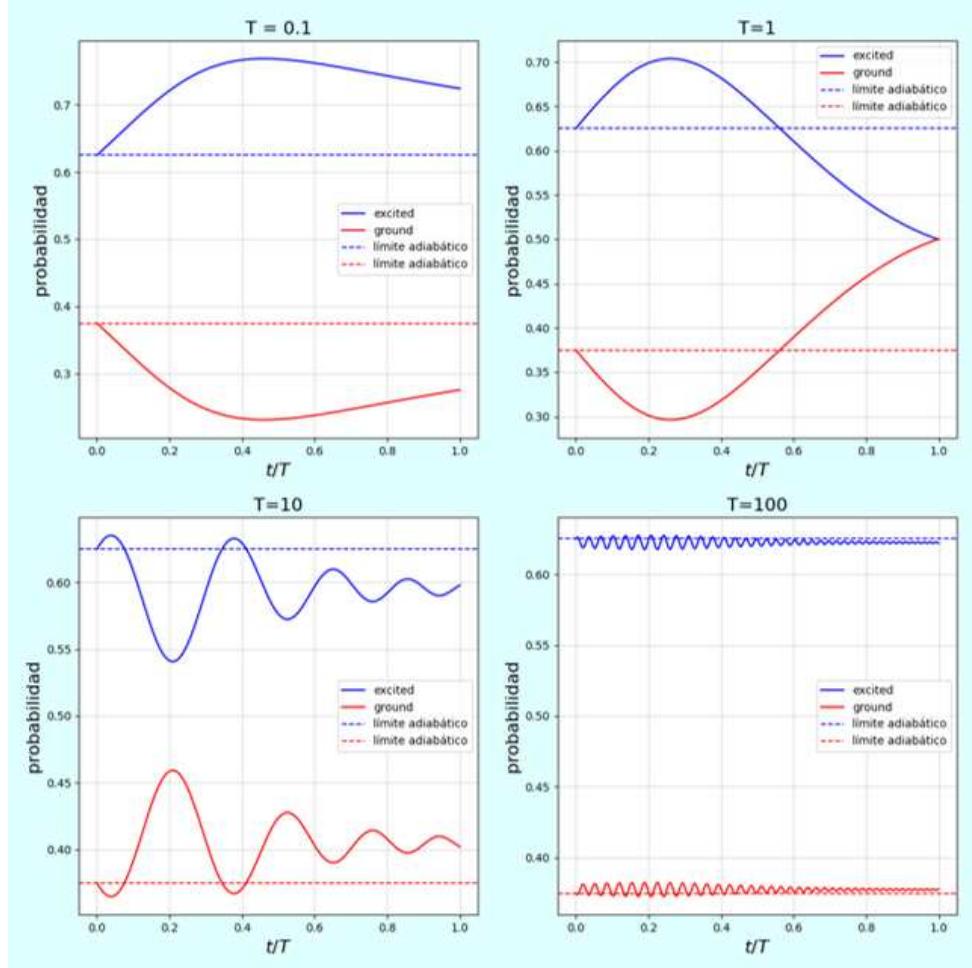


Figura 4.28: Probabilidades de no-transición para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo normalizado t/T para distintos tiempos T de duración del protocolo. En línea de trazo corto se muestra cómo deberían comportarse, en el límite adiabático, cada uno de los estados.

En la Figura 4.29 se optó por el uso del estado ρ_{S_3} para el estudio de esta dinámica. Podemos notar cómo a diferentes tiempos T (desde aquellos que son muy cortos como $T = 0,1$ hasta aquellos que son muy grandes como $T = 100$) las probabilidades de no-transición entre niveles energéticos no cambian en el tiempo. Es más, resultan ser exactamente $3/5$ y $5/8$ de manera constante bajo esta dinámica, a comparación del régimen adiabático donde se consiguen aproximaciones a esto. Si uno quisiera replicar este resultado para el estado ρ_{S_2} , se obtendría el mismo gráfico para cualquier T utilizado.

En el caso de usar algún otro estado, las probabilidades mostradas serán las correspondientes a los términos diagonales, pero el gráfico será análogo al que se muestra. Por ejemplo, para el estado ρ_{S_1} se tendría que el estado $|+(t)\rangle$ (representado como *excited*) tiene probabilidad igual a 1 para todo momento del protocolo, mientras que el estado $|-(t)\rangle$ (representado como *ground*) se mantendría con probabilidad nula.

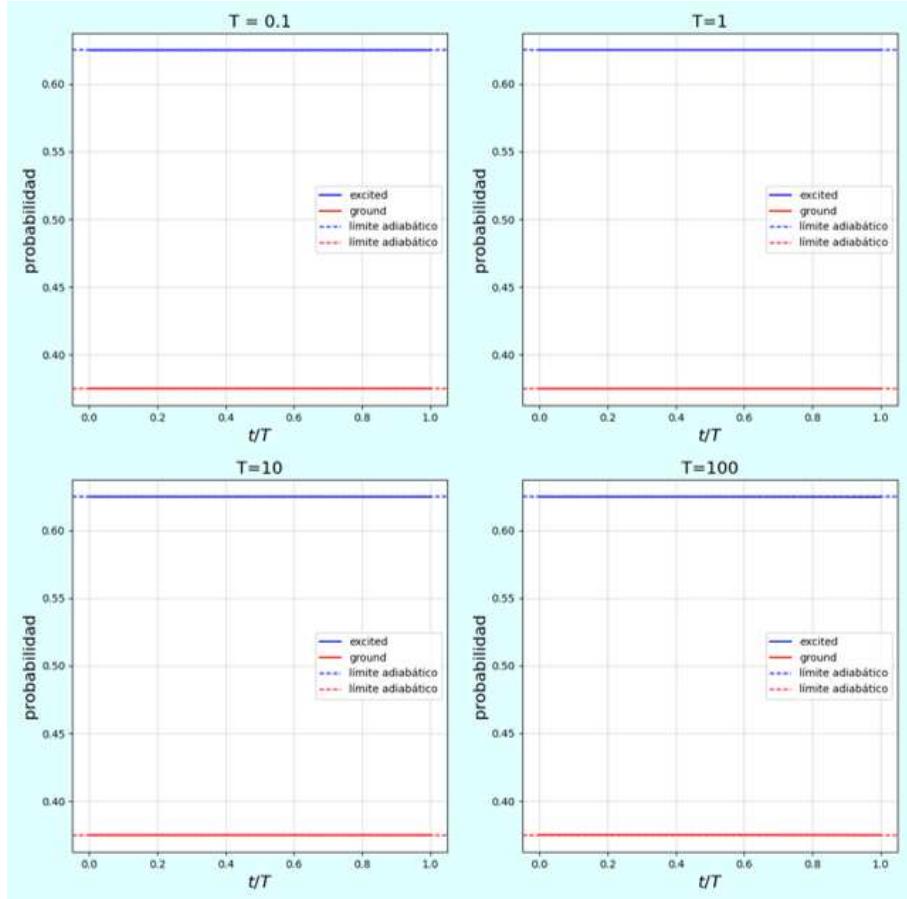


Figura 4.29: Probabilidades de no-transición para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo normalizado t/T para distintos tiempos T de duración del protocolo en la dinámica del atajo adiabático. En línea de trazo corto se muestra cómo deberían comportarse, en el límite adiabático del Hamiltoniano original, cada uno de los estados.

4.2.5. Comportamiento de la distribución WSM en *time-reversal*

Para concluir este capítulo, analizaremos la respuesta de la variación media de energía $\langle \Delta E \rangle$ y los valores medios de trabajo en las distribuciones WSM y TPM cuando se aplica el protocolo inverso. No nos centraremos en la dinámica durante la evolución del protocolo, ya que un estudio análogo al del protocolo directo podría realizarse. En su lugar, pondremos el foco en los resultados que se obtienen tras la evolución del estado y en cómo relacionarlos con respecto al protocolo directo.

En primer lugar, podemos ver cómo se comporta la variación media de energía $\langle \Delta E \rangle$ obtenida al final de la evolución en función de la duración del protocolo T y compararla con la que se obtendría en el protocolo directo. En la Figura 4.30 se muestra el caso para el estado ρ_{S_3} donde es apreciable que las variaciones de energía resultan ser de signo opuesto, para cualquier tiempo de duración T del protocolo, entre los procesos directo e inverso, verificándose así una característica básica entre ambas dinámicas. Esto resulta reproducible para cualquier estado ρ_S utilizado, independientemente de si presenta o no coherencias en el estado inicial en los protocolos directo y/o inverso.

Si bien la variación media de energía posee esta simetría, puede mostrarse que la distribución WSM y el protocolo TPM no cumplen esta característica. En la Figura 4.31 se visualizan los valores medios de trabajo calculados a partir de estas dos distribuciones para el estado ρ_{S_3} cuando se aplica el protocolo directo e inverso; la dispersión utilizada para el caso de la distribución WSM de trabajo es $\sigma = 1.0$.

Queda en evidencia con esto que las distribuciones de trabajo no presentan esta simetría temporal en los procesos directo e inverso. En particular, esta asimetría para la distribución WSM es comprobable de manera analítica si se comparan los valores medios de trabajo para el protocolo directo (ver ecuación 4.40) como inverso (ver ecuación 4.82) donde puede corroborarse que, si bien estas expresiones son similares, no coinciden.

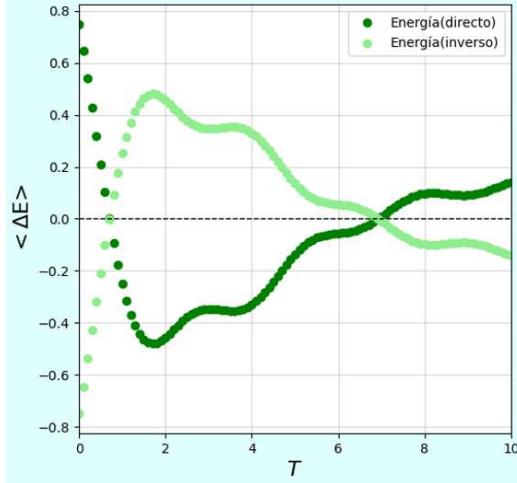


Figura 4.30: Variación media de energía que se obtiene en los protocolos directo e inverso para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo T de duración del protocolo. Podemos notar que ambas curvas presentan una simetría temporal entre ellas.

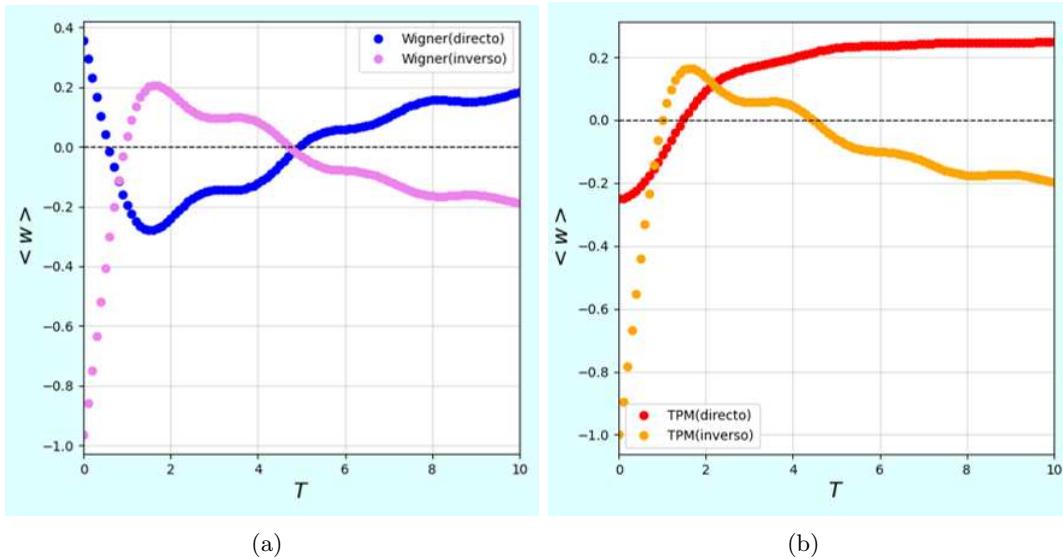


Figura 4.31: Valor medio de trabajo que se obtiene en los protocolos directo e inverso para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo T de duración del protocolo. Las imágenes corresponden a las distribuciones (a) WSM para $\sigma = 1, 0$; (b) TPM. Podemos notar que cada gráfica no presenta una simetría temporal en sus respectivas curvas.

Respecto a la distribución TPM, puede verse mediante las Figuras 4.30 y 4.31 que en el protocolo directo e inverso no coinciden sus curvas con respecto a la variación media de energía debido a la presencia de coherencias cuánticas al inicio de la evolución para ambos procesos. Por otra parte, estas

mismas figuras evidencian que esto también ocurre para la distribución WSM de trabajo. Sin embargo, es apreciable que la forma de su gráfica resulta tener más coincidencias (a comparación de las obtenidas del protocolo TPM) con respecto a la diferencia de energía media. Esto se debe al análisis anteriormente hecho para esta distribución, donde la misma resulta ser como un *punto intermedio* entre las distribuciones TPM y el valor medio de diferencia de energía de acuerdo a la dispersión σ (coincidiendo mejor con el protocolo TPM cuando $\sigma \rightarrow 0$ ó con la variación media de energía cuando $\sigma \rightarrow \infty$). Por si acaso, cabe aclarar que si ocurre el caso donde al inicio de la evolución de alguno de los protocolos (directo o inverso) no se presentan coherencias, entonces las curvas de variación media de energía con los valores medios de trabajo de las distribuciones WSM y TPM coincidirán entre ellas.

En la Figura 4.32 se graficó el valor medio de trabajo obtenido mediante la distribución WSM para los protocolos directo e inverso con el estado ρ_{S_3} , usando dispersiones $\sigma = 0,5$ y $\sigma = 2,0$. Vemos que para el caso donde $\sigma = 0,5$ existen coincidencias con las curvas obtenidas del protocolo TPM en la Figura 4.31; si se eligiese disminuir más la dispersión, su parecido sería mayor. En cambio, vemos que para el caso donde $\sigma = 2,0$ no se perciben grandes diferencias respecto a la variación media de energía de la Figura 4.30; en el caso de aumentar la dispersión, se obtendría una curva cada vez más coincidente.

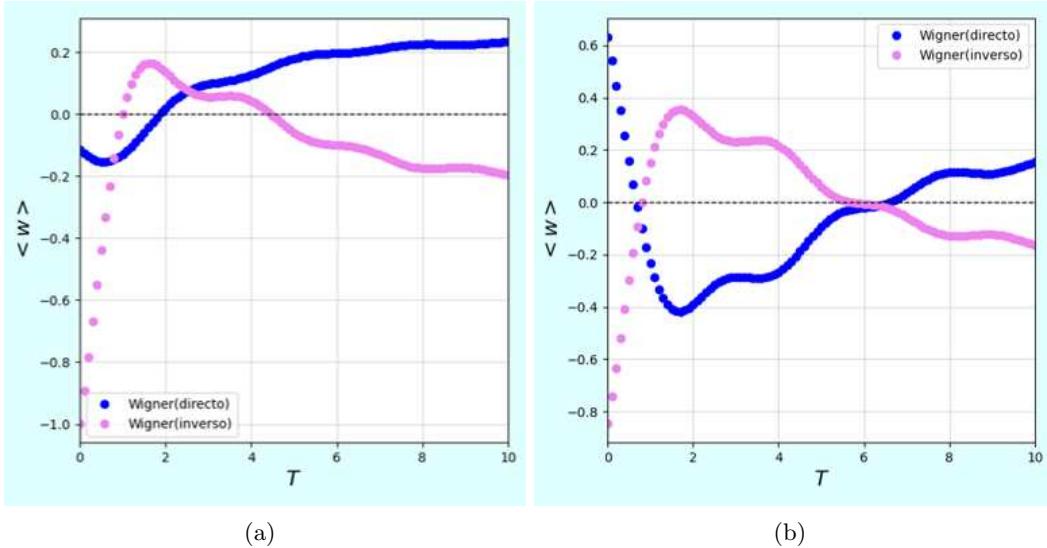


Figura 4.32: Valor medio de trabajo que se obtiene en los protocolos directo e inverso para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo T de duración del protocolo. Las imágenes corresponden a la distribución WSM con dispersiones (a) $\sigma = 0,5$; (b) $\sigma = 2,0$. Las gráficas coinciden bastante con lo obtenido respecto a la distribución TPM y la variación media de energía, respectivamente.

Para finalizar, veremos qué ocurre cuando nos encontramos en tiempos T tales que se cumple el límite adiabático en la dinámica. Ya hemos visto que, en el caso del protocolo directo, el valor medio de diferencia de energía coincide con los valores medios de trabajo para las distribuciones WSM y TPM para todo proceso involucrado. Sin embargo, cabe preguntarse si ocurre lo mismo cuando estamos en el protocolo inverso. En la Figura 4.33 puede verse el valor medio de trabajo en la distribución WSM para dispersiones $\sigma = 0,5$ y $\sigma = 2,0$ cuando el estado es ρ_{S_3} . Vemos que para tiempos $T \sim 100$ (del mismo orden que el usado para el protocolo directo en el estado ρ_{S_3}) el valor medio de trabajo en ambas dinámicas convergen, y lo hacen en valores opuestos. Por lo cual, podemos ver que se corrobora el límite adiabático ya que coincide con la variación media de energía del protocolo inverso. Inclusive, al

usar como ejemplos los casos donde $\sigma = 0,5$ y $\sigma = 2,0$ estamos representando, aproximadamente, cómo resultan ser las gráficas del valor medio de trabajo del protocolo TPM y la diferencia media de energía, respectivamente, cuando se alcanza el régimen adiabático. Con esto, queda demostrado numéricamente que, para este estado, las conclusiones son las mismas que las obtenidas en el protocolo directo. Esto es reproducible para cualquier estado ρ_S que se utilice.

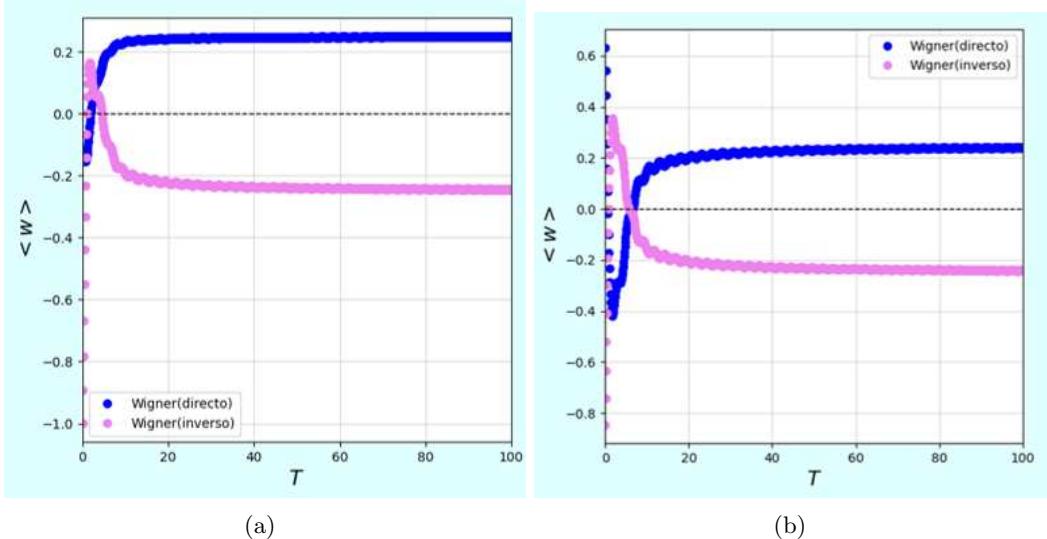


Figura 4.33: Valor medio de trabajo que se obtiene en los protocolos directo e inverso para el estado ρ_{S_3} en función del tiempo T de duración del protocolo. Las imágenes corresponden a la distribución WSM con dispersiones (a) $\sigma = 0,5$; (b) $\sigma = 2,0$. Las gráficas coinciden bastante con lo obtenido respecto a la distribución TPM y la variación media de energía, respectivamente. Para valores de $T \sim 100$ se muestra una convergencia que evidencia el régimen adiabático.

Capítulo 5

Extensiones de la identidad de Jarzynski

Con el desarrollo de los Capítulos 3 y 4 se ha demostrado que es posible describir la estadística de trabajo a partir de distintas distribuciones de cuasi-probabilidad, las cuales resultan superadoras a la visión brindada por el protocolo TPM, dado que puede obtenerse los resultados correctos para estados que presentan coherencias en el estado inicial de la evolución. Además, nos hemos detenido a describir y ampliar en detalle las características que presentan cada una de estas distribuciones, las cuales pueden reconstruirse mediante ciertos esquemas que utilizan como herramienta principal la interacción entrelazante entre nuestro sistema de interés de estudio y un sistema auxiliar que almacena la información relevante en él.

Sin embargo, los teoremas de fluctuación de trabajo que conocemos (como lo es la identidad de Jarzynski) únicamente son válidos en los casos donde el estado al inicio de la evolución representa un estado térmico. Entonces, cabe preguntarse si es posible obtener una extensión de estos teoremas en los casos donde no sea necesariamente inicialmente se tenga un estado térmico o inclusive presente coherencias en el instante inicial. En este capítulo, analizaremos las extensiones que pueden obtenerse de la identidad de Jarzynski para cada una de las distribuciones de cuasi-probabilidad analizadas en capítulos anteriores. A partir de ellas, podremos recuperar los resultados que ya conocíamos de la termodinámica estadística clásica.

5.1. Primera extensión de la identidad de Jarzynski

En la Sección 1.2 hemos visto cómo los teoremas de fluctuación se encuentran íntimamente conectados con el segundo principio de la termodinámica. Muchas veces, estos teoremas son interpretados como una refinación a la segunda ley, donde su logro se debe a que pueden relacionar propiedades del equilibrio de un sistema con procesos fuera del equilibrio, poniendo un límite a la forma que pueden tener sus fluctuaciones. En particular, fueron desarrollados el teorema de Crooks y la identidad de Jarzynski.

Estos teoremas son recuperables gracias al protocolo TPM. De aquí surgió la importancia de que la definición de trabajo que buscáramos incluyera los resultados del protocolo TPM cuando el estado es diagonal respecto a la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . Sin embargo, esto no quita que, a lo mejor, estos teoremas resulten ser casos particulares de un resultado mucho más general, pero

particularizado a cuando los estados al inicio son térmicos. En nuestro caso, queremos hallar extensiones de la identidad de Jarzynski.

Para llevar esta tarea a cabo, describiremos formalmente la dinámica de nuestro sistema. Tomaremos un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(\lambda(t))$ que depende del tiempo a través de un parámetro $\lambda \equiv \lambda(t)$ que realiza trabajo sobre el sistema, al cual llamaremos protocolo, y que suponemos que podemos controlar externamente. Inicialmente, el sistema se encuentra en un estado descrito por una matriz densidad ρ . Luego, se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ en $t = 0$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. Más allá de la dependencia de λ , diremos que el sistema está aislado, por lo que evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (donde t_0 es fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (5.1)$$

Además, con el objetivo de simplificar la notación, denotaremos $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(T))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$.

Dicho esto, procederemos a dar el primer paso para la generalización de la identidad de Jarzynski. Para ello, empezaremos por aquellos estados que no presentan coherencias al inicio de la evolución (es decir, $[\rho, H] = 0$), pero no necesariamente son estados térmicos. En otras palabras, tratamos con estados ρ que satisfacen la condición $\rho = \bar{\rho}$, siendo $\bar{\rho} \equiv \sum_i \Pi_i \rho \Pi_i$ el estado *dephased*. Queda claro que, en este caso, la estadística del protocolo TPM debería reproducir correctamente el resultado, ya que la primera medición no resulta invasiva sobre el estado.

Iniciaremos con el cálculo de la función característica $\zeta_{\text{TPM}}(u)$ de la distribución del protocolo TPM:

$$\zeta_{\text{TPM}}(u) \equiv \langle e^{iuW} \rangle_{\text{TPM}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dW P_{\text{TPM}}(W) e^{iuW} \quad (5.2)$$

Luego, recordando que su distribución de probabilidad está dada por (1.28), y tomando el caso $\rho = \bar{\rho}$, podemos llegar a que:

$$\zeta_{\text{TPM}}(u) = \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \bar{\rho} \Pi_n \mathcal{U}^\dagger] \int_{-\infty}^{+\infty} dW \delta(W - (\tilde{E}_m - E_n)) e^{iuW} \quad (5.3)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \bar{\rho} \mathcal{U}^\dagger] e^{iu(\tilde{E}_m - E_n)} \quad (5.4)$$

Notar que en la última línea abusamos del hecho de que $\bar{\rho}$ commuta con H (y por lo tanto, con sus proyectores) y después usamos la propiedad $\Pi_n^2 = \Pi_n$. Si definimos $\beta = (kT)^{-1}$ (siendo k la constante de Boltzmann y T la temperatura) y hacemos el reemplazo $u = i\beta$ (siendo i la unidad imaginaria), obtenemos que:

$$\zeta_{\text{TPM}}(i\beta) = \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m \mathcal{U} \Pi_n \bar{\rho} \mathcal{U}^\dagger] e^{-\beta(\tilde{E}_m - E_n)} \quad (5.5)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} e^{\beta H} \Pi_n \bar{\rho} \mathcal{U}^\dagger] = \text{tr}[\mathcal{U}^\dagger e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H} \bar{\rho}] \quad (5.6)$$

Definimos a los estados de Gibbs:

$$\rho_{\text{th}} \equiv \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad , \quad \tilde{\rho}_{\text{th}} \equiv \frac{e^{-\beta \tilde{H}}}{\tilde{Z}} \quad (5.7)$$

los cuales representan estados térmicos a temperatura T en equilibrio con sus correspondientes Hamiltonianos. Tenemos que $Z = \text{tr}[e^{-\beta H}]$ y $\tilde{Z} = \text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}}]$ son las funciones de partición canónicas correspondientes a cada estado térmico, los cuales se relacionan con la diferencia de energía de Helmholtz ΔF mediante:

$$\Delta F \equiv -\beta^{-1} \ln \left(\frac{\tilde{Z}}{Z} \right) \quad (5.8)$$

Entonces tenemos que la expresión (5.6) podemos reescribirla como:

$$\zeta_{\text{TPM}}(i\beta) = \text{tr}[\mathcal{U}^\dagger e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H} \bar{\rho}] \frac{\tilde{Z}}{Z} \frac{Z}{\tilde{Z}} \quad (5.9)$$

$$= \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1} \bar{\rho} \right] e^{-\beta \Delta F} \quad (5.10)$$

donde definimos $(\rho_{\text{th}})^{-1} = Z e^{\beta H}$. Luego, mediante la definición dada por (5.2), vemos que se tiene la **primera extensión de la identidad de Jarzynski**:

$$\boxed{\left\langle e^{-\beta W} \right\rangle_{\text{TPM}} = \gamma e^{-\beta \Delta F}} \quad , \quad \text{siendo} \quad \gamma \equiv \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1} \bar{\rho} \right] \quad (5.11)$$

Es inmediato ver que si $\bar{\rho}$ resulta ser un estado térmico $\bar{\rho} = \rho_{\text{th}}$ entonces $\gamma = 1$ y recuperamos el resultado clásico conocido. El factor γ es conocido como *eficacia* y toma valores $\gamma \geq 0$ [72]. Además, depende de la dinámica del sistema ya que tiene incorporado a los Hamiltonianos \tilde{H}, H , el operador evolución \mathcal{U} , la temperatura T y el estado inicial ρ .

Vemos que a través del resultado obtenido en (5.11) llegamos a lo que queríamos: la identidad de Jarzynski de la termodinámica estadística clásica no es más que un caso particular de algo más general; en este caso, una extensión que sirve para estados ρ que son diagonales en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . Sin embargo, nosotros queremos encontrar una extensión que sirva para estados más generales, incluso aquellos que no sean diagonales al inicio de la evolución. Está claro que el protocolo TPM no es el indicado para esta tarea debido a que la primera medición destruye las coherencias que poseía el estado al inicio y altera la estadística correcta. Por lo tanto, para encontrar una generalización a este resultado debemos recurrir a las distribuciones de cuasi-probabilidad desarrolladas durante este trabajo. En particular, trabajaremos con las distribuciones MHQ, FCQ, KDQ y la distribución WSM de trabajo.

5.2. Segunda extensión de la identidad de Jarzynski

A continuación, buscaremos dar una segunda extensión de la identidad de Jarzynski incluyendo a los casos donde el estado ρ presenta coherencias en la base de autoestados del Hamiltoniano inicial H . En otras palabras: $[\rho, H] \neq 0$. Cabe mencionar que en todas las distribuciones que analizaremos a continuación fue demostrado que se recupera (de alguna u otra forma) la distribución de probabilidad del protocolo TPM cuando el estado inicial es diagonal en la base de autoestados de H (ver Capítulos

3 y 4). Por lo cual, debe esperarse que todos ellos recuperen el resultado dado por (5.11) cuando esto mismo ocurra.

5.2.1. Distribución MHQ

Así como hicimos para el protocolo TPM, la segunda extensión a la identidad de Jarzynski la haremos a partir de la función característica y luego evaluaremos su argumento en $u = i\beta$. Entonces, recordando que la función característica de la distribución MHQ está dada por (3.74), vemos que:

$$\langle e^{-\beta W} \rangle_{\text{MH}} = \zeta_{\text{MH}}(i\beta) = \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) e^{-\beta(\tilde{E}_m - E_n)} \quad (5.12)$$

$$= \sum_{n,m} \Re \left(\text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} e^{\beta H} \Pi_n \rho \mathcal{U}^\dagger] \right) \quad (5.13)$$

$$= \Re \left(\text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H} \rho \mathcal{U}^\dagger] \right) \quad (5.14)$$

Incorporando las funciones de partición Z, \tilde{Z} , tenemos:

$$\langle e^{-\beta W} \rangle_{\text{MH}} = \Re \left(\text{tr}[\mathcal{U}^\dagger e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H} \rho] \right) \frac{\tilde{Z}}{Z} \frac{Z}{\tilde{Z}} \quad (5.15)$$

$$= \Re \left(\text{tr}[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1} \rho] \right) e^{-\beta \Delta F} \quad (5.16)$$

resultando en:

$$\boxed{\langle e^{-\beta W} \rangle_{\text{MH}} = \Gamma_{\text{MH}} e^{-\beta \Delta F}} \quad , \quad \text{siendo} \quad \Gamma_{\text{MH}} \equiv \Re \left(\text{tr}[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1} \rho] \right) \quad (5.17)$$

siendo útil esta relación para todo tipo de estado ρ , la cual definiremos como la **segunda extensión de la identidad de Jarzynski** en la distribución MHQ [31].

El parámetro $\Gamma_{\text{MH}} \in \mathbb{R}$, pudiendo ser incluso negativo. Notemos que si estamos en el caso donde $[\rho, H] = 0$ entonces $\Gamma_{\text{MH}} = \Re(\gamma)$, pero como $\gamma \geq 0$ entonces el operador $\Re[\cdot]$ puede obviarse y recuperamos el caso de la primera extensión de la identidad de Jarzynski dada por (5.11).

5.2.2. Distribución FCQ

Procederemos de manera análoga para este caso, donde necesitaremos la función característica de la distribución FCQ, la cual está dada por (3.92). Desde aquí, llegamos a:

$$\langle e^{-\beta W} \rangle_{\text{FC}} = \zeta_{\text{FC}}(i\beta) = \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[\Pi_l \tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] \right) e^{-\beta(\tilde{E}_m - \frac{E_l + E_n}{2})} \quad (5.18)$$

$$= \sum_{l,n,m} \Re \left(\text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} e^{\beta H/2} \Pi_n \rho \Pi_l e^{\beta H/2} \mathcal{U}^\dagger] \right) \quad (5.19)$$

$$= \Re \left(\text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H/2} \rho e^{\beta H/2} \mathcal{U}^\dagger] \right) \quad (5.20)$$

Si incorporamos las funciones de partición Z, \tilde{Z} , nos quedará que:

$$\left\langle e^{-\beta W} \right\rangle_{\text{FC}} = \Re \left(\text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H/2} \rho e^{\beta H/2} \mathcal{U}^\dagger] \right) \frac{\tilde{Z}}{Z} \frac{Z}{\tilde{Z}} \quad (5.21)$$

$$= \Re \left(\text{tr} \left[(\rho_{\text{th}})^{-1/2} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \rho \right] \right) e^{-\beta \Delta F} \quad (5.22)$$

siendo $(\rho_{\text{th}})^{-1/2} = \sqrt{Z} e^{\beta H/2}$. Al mirar con atención esta última expresión, vemos que:

$$\text{tr} \left[\left((\rho_{\text{th}})^{-1/2} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \rho \right)^\dagger \right] = \text{tr} \left[(\rho_{\text{th}})^{-1/2} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \rho \right] \quad (5.23)$$

Esto provoca que el operador $\Re[\cdot]$ esté de más en la ecuación (5.22). Por lo tanto, resulta:

$$\boxed{\left\langle e^{-\beta W} \right\rangle_{\text{FC}} = \Gamma_{\text{FC}} e^{-\beta \Delta F}} \quad , \quad \text{siendo } \Gamma_{\text{FC}} \equiv \text{tr} \left[(\rho_{\text{th}})^{-1/2} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \rho \right] \quad (5.24)$$

que sirve para todo tipo de estado ρ . La relación acá obtenida la definimos como la **segunda extensión de la identidad de Jarzynski** en la distribución FCQ.

Mencionamos que el parámetro $\Gamma_{\text{FC}} \in \mathbb{R}$, aunque no resulta claro (*a priori*) si puede tomar tanto valores positivos como negativos. Notemos que si estamos en el caso donde $[\rho, H] = 0$, entonces $\Gamma_{\text{FC}} = \gamma$ debido a que ρ y $(\rho_{\text{th}})^{-1/2}$ commutan entre sí. Vemos, entonces, que se recupera la primera extensión de la identidad de Jarzynski dada por (5.11).

5.2.3. Distribución KDQ

Partiremos de la función característica de la distribución KDQ dada por la expresión (3.138). Reemplazando $u = i\beta$, vemos que:

$$\left\langle e^{-\beta W} \right\rangle_{\text{KD}} = \zeta_{\text{KD}}(i\beta) = \sum_{n,m} \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho] e^{-\beta(\tilde{E}_m - E_n)} \quad (5.25)$$

$$= \sum_{n,m} \text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}} \tilde{\Pi}_m \mathcal{U} e^{\beta H} \Pi_n \rho \mathcal{U}^\dagger] \quad (5.26)$$

$$= \text{tr}[e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H} \rho \mathcal{U}^\dagger] \quad (5.27)$$

Realizando la incorporación de Z, \tilde{Z} , tenemos:

$$\left\langle e^{-\beta W} \right\rangle_{\text{KD}} = \text{tr}[\mathcal{U}^\dagger e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H} \rho] \frac{\tilde{Z}}{Z} \frac{Z}{\tilde{Z}} \quad (5.28)$$

$$= \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1} \rho \right] e^{-\beta \Delta F} \quad (5.29)$$

que resulta al final en que:

$$\boxed{\left\langle e^{-\beta W} \right\rangle_{\text{KD}} = \Gamma_{\text{KD}} e^{-\beta \Delta F}} \quad , \quad \text{siendo } \Gamma_{\text{KD}} \equiv \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1} \rho \right] \quad (5.30)$$

satisfaciendo para todo estado ρ . Este resultado es definido como la **segunda extensión de la identidad de Jarzynski** en la distribución KDQ [72].

El parámetro $\Gamma_{\text{KD}} \in \mathbb{C}$, pudiendo tener partes real e imaginaria tanto positivas como negativas.

Contrastando con la expresión (5.17), se ve que $\Gamma_{\text{MH}} = \Re(\Gamma_{\text{KD}})$. Notemos que si estamos en el caso donde $[\rho, H] = 0$ entonces $\Gamma_{\text{KD}} = \gamma$, recuperándose así el caso para la primera extensión de la identidad de Jarzynski.

5.2.4. Distribución WSM de trabajo

Para el caso donde queremos hacer la segunda extensión de la identidad de Jarzynski, utilizando la distribución WSM de trabajo, hay que tener cierto cuidado. En el Capítulo 4 vimos que esta distribución parte de la función de Wigner y que, al marginalizarla, obtenemos una distribución de probabilidad para el trabajo que no cumple en todo momento la primera ley y la reproducción de los teoremas de fluctuación clásicos. Estos resultados dependían del parámetro σ , el cual indicaba la dispersión utilizada en mi sistema auxiliar al inicio de la evolución.

Dicho esto, es probable que la segunda extensión de la identidad de Jarzynski con esta distribución quede dependiendo del parámetro σ y que no siempre se recuperen los resultados clásicos, sino que deba hacerse bajo ciertas condiciones. Por lo cual, lo que haremos es obtener la segunda extensión de manera general (para un arbitrario σ y un estado ρ con coherencias al inicio de la dinámica) y luego veremos qué debemos pedir para recuperar el resultado dado por (5.11).

Partiremos de la función característica dada por la ecuación (4.65). Desde allí, debemos evaluar para $u = i\beta$. Haciendo esto, se tiene que:

$$\langle e^{-\beta W} \rangle_{\text{WSM}} = \zeta_{\text{WSM}}(i\beta) = \sum_{n,n'} \text{tr} \left[e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H/2} \Pi_n \rho \Pi_{n'} e^{\beta H/2} \mathcal{U}^\dagger \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} e^{\frac{1}{2}\sigma^2\beta^2} \quad (5.31)$$

$$= \sum_{n,n'} \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H/2} \Pi_n \rho \Pi_{n'} e^{\beta H/2} \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \Upsilon \quad (5.32)$$

donde definimos $\Upsilon \equiv e^{\frac{1}{2}\sigma^2\beta^2}$. Luego, si incorporamos las funciones de partición Z, \tilde{Z} , llegamos a:

$$\langle e^{-\beta W} \rangle_{\text{WSM}} = \sum_{n,n'} \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger e^{-\beta \tilde{H}} \mathcal{U} e^{\beta H/2} \Pi_n \rho \Pi_{n'} e^{\beta H/2} \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \Upsilon \frac{\tilde{Z}}{Z} \frac{Z}{\tilde{Z}} \quad (5.33)$$

$$= \sum_{n,n'} \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \Pi_n \rho \Pi_{n'} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \Upsilon e^{-\beta \Delta F} \quad (5.34)$$

por lo que finalmente se obtiene:

$$\boxed{\langle e^{-\beta W} \rangle_{\text{WSM}} = \Gamma_{\text{WSM}} \Upsilon e^{-\beta \Delta F}} \quad (5.35)$$

siendo

$$\Gamma_{\text{WSM}} \equiv \sum_{n,n'} \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \Pi_n \rho \Pi_{n'} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \right] e^{-\frac{(E_n - E_{n'})^2}{8\sigma^2}} \quad (5.36)$$

A este resultado lo denominamos como la **segunda extensión de la identidad de Jarzynski** en la distribución WSM de trabajo.

Es importante destacar que el factor $\Gamma_{\text{WSM}} > 0$ debido a que la ecuación (5.35) debe ser positiva, ya que este valor medio es sobre una exponencial real utilizando la distribución WSM de trabajo, la cual no admite valores negativos. Esto es independiente de la dispersión σ empleada. Además, en el

caso donde $[\rho, H] = 0$, tenemos que los términos no nulos de la sumatoria son cuando $n = n'$; con eso, agregando el hecho de que ρ y $(\rho_{\text{th}})^{-1/2}$ comutan, se logra recuperar la expresión (5.11).

Por otro lado, puede verse que el factor Γ_{WSM} definido en (5.36) tiene una expresión muy parecida al factor Γ_{FC} de la distribución FCQ dado por (5.24). Es más, si hacemos el límite de dispersión $\sigma \rightarrow \infty$:

$$\Gamma_{\text{WSM}} \xrightarrow{\sigma \rightarrow \infty} \sum_{n,n'} \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \Pi_n \rho \Pi_{n'} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \right] \quad (5.37)$$

$$= \text{tr} \left[(\rho_{\text{th}})^{-1/2} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \rho \right] = \Gamma_{\text{FC}} \quad \checkmark \quad (5.38)$$

Esto puede interpretarse de la siguiente manera: en el límite $\sigma \rightarrow \infty$ estudiamos que la distribución WSM de trabajo reproducía la variación media de energía por medio del valor medio de trabajo. De allí viene la conexión en que coinciden los coeficientes Γ_{WSM} y Γ_{FC} en este límite; es más, como $\Gamma_{\text{WSM}} > 0 \forall \sigma$, esto muestra que el factor $\Gamma_{\text{FC}} > 0$. Sin embargo, el coeficiente $\Upsilon \rightarrow \infty$ logra que el valor medio de esta extensión de la identidad de Jarzynski diverja. Vemos entonces el rol primario que vuelve a tener el parámetro σ en esta distribución.

Si analizamos el caso donde $\sigma \rightarrow 0$ se tiene que el factor $\Upsilon \rightarrow 1$. Por otro lado, el coeficiente Γ_{WSM} eliminará los términos no diagonales ($n \neq n'$) debido a que caen exponencialmente a cero. Así, a partir de la expresión (5.36), obtenemos que:

$$\Gamma_{\text{WSM}} \xrightarrow{\sigma \rightarrow 0} \sum_n \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \Pi_n \rho \Pi_n (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \right] \quad (5.39)$$

$$= \text{tr} \left[(\rho_{\text{th}})^{-1/2} \mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1/2} \bar{\rho} \right] \quad (5.40)$$

$$= \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger \tilde{\rho}_{\text{th}} \mathcal{U} (\rho_{\text{th}})^{-1} \bar{\rho} \right] \quad (5.41)$$

coincidiendo, de cierta forma, con el resultado de la primera extensión de la identidad de Jarzynski dada por (5.11) con el protocolo TPM. La diferencia aquí es que el estado original introducido no es diagonal, pero dentro de la traza aparece su correspondiente estado *dephased*. Es decir, en el límite $\sigma \rightarrow 0$ volvemos a recuperar los resultados del protocolo TPM.

Con esto, podemos interpretar al factor Υ como fluctuaciones debidas al sistema auxiliar y a la temperatura (como puede ser un baño térmico) ya que no depende de la dinámica del Hamiltoniano ni del estado inicial ρ implementado, sino que depende únicamente de σ y Υ . Vemos que para una dispersión chica ($\sigma \rightarrow 0$ entonces $\Upsilon \rightarrow 1$) el factor Υ no influye en el valor de $\langle e^{-\beta W} \rangle_{\text{WSM}}$. Sin embargo, para una dispersión grande ($\sigma \rightarrow \infty$ entonces $\Upsilon \rightarrow \infty$) el factor Υ opaca toda información que puede obtenerse de las fluctuaciones del sistema de interés. Asimismo, para temperaturas bajas ($\Upsilon \rightarrow 0$ entonces $\Upsilon \rightarrow \infty$) el valor de las fluctuaciones de trabajo diverge, mientras que a temperaturas altas ($\Upsilon \rightarrow \infty$ entonces $\Upsilon \rightarrow 1$) las fluctuaciones generadas por el baño térmico son suprimidas.

Conclusiones

En esta tesis se realizó el estudio de la problemática de definir el trabajo en mecánica cuántica para sistemas aislados. Hemos mostrado que no es posible describir la estadística de trabajo mediante una distribución de probabilidad si, al mismo tiempo, se requiere que cumpla tres requisitos que resultan razonables: el cumplimiento de la primera ley de la termodinámica, la recuperación de los teoremas de fluctuación y que la distribución sea lineal en el estado cuántico inicial. Con ello, la comunidad científica se vio en el deber de encontrar diversas alternativas para la solución de este problema. Una de las alternativas propuestas se basa en el formalismo de cuasi-probabilidades. Aquí, se quiere realizar la estadística de trabajo a partir de una distribución de cuasi-probabilidad con el fin de preservar los tres requisitos antes mencionados para la definición de trabajo.

Se desarrollaron distintas distribuciones de cuasi-probabilidad con el fin de caracterizarlas y contrastar sus pros y contras al momento de describir procesos donde intervienen coherencias cuánticas. En particular, se analizaron las distribuciones de Margenau-Hill (MHQ), Full-Counting (FCQ) y Kirkwood-Dirac (KDQ) resultando en una propuesta superadora para una definición de trabajo en comparación con el protocolo de dos mediciones proyectivas (TPM). Estas distribuciones tienen la propiedad de que, al permitir tomar valores por fuera de los reales positivos (valores de no-clasicalidad) entonces estos valores son evidencia de las coherencias presentes en el estado inicial al inicio de la dinámica.

Por otra parte, se dedicó un capítulo completo al desarrollo detallado de una nueva distribución de cuasi-probabilidad definida recientemente basada en la función de Wigner (WSM). Esta distribución consiste en el acople de un sistema auxiliar *squeezed* con dispersión σ que se acopla coherentemente al sistema de interés y, con ello, el sistema auxiliar contiene toda la información sobre la distribución de trabajo. Se exploró la dinámica de esta distribución para un sistema de dos niveles para procesos que ocurren fuera del equilibrio hasta aquellos que involucran atajos adiabáticos. Se mostró que para estados libres de coherencias al inicio de la evolución se recuperan los resultados brindados por el protocolo TPM, mientras que si el estado presenta coherencias se recuperan los teoremas de fluctuación clásicos en el límite de $\sigma \rightarrow 0$ y la variación media de energía cuando $\sigma \rightarrow \infty$. Además, la presencia de coherencias se encuentra vinculada a los valores de no-clasicalidad que puede tomar la distribución y a la aparición de franjas de interferencia.

Pudo extenderse la identidad de Jarzynski para estados que no representan estados térmicos, desde aquellos que son diagonales al inicio de la dinámica hasta los que presentan coherencias cuánticas. Esto se logró mediante la estadística brindada por las diferentes distribuciones de cuasi-probabilidad desarrolladas en este trabajo. Luego, mediante los límites y casos pertinentes, pudo corroborarse la recuperación de la identidad de Jarzynski popularmente conocida de la termodinámica estadística clásica.

Como proyectos a futuro, resta el estudio en la dinámica de la distribución WSM para sistemas

típicos que sean de relevancia, como lo es el oscilador armónico. Asimismo, puede verificarse la aplicabilidad de estos resultados obtenidos; en particular, para el caso de baterías cuánticas. Por otra parte, se podría buscar una definición análoga para la descripción de calor en sistemas cuánticos que no produzcan trabajo alguno, donde ahora la variación media de energía estaría relacionada con el calor medio intercambiado. Desde aquí, podrían obtenerse resultados análogos a los obtenidos en esta tesis y extender los teoremas de fluctuación para el calor.

Apéndice A

Teorema de Crooks

Tomemos el caso particular en que el trabajo W se hace con el sistema aislado del reservorio y únicamente se utiliza la fuente térmica T al inicio y al final del proceso. Dado un protocolo $\lambda(t)$, la evolución está dictada por las condiciones iniciales $x_i = (q_i; p_i)$ de las partículas. Si consideramos que el protocolo ocurre entre los instantes $t = 0$ y $t = T$, entonces $\lambda_i = \lambda(0)$ y $\lambda_f = \lambda(T)$. Así, el trabajo resulta:

$$W(x_i) = \Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(x_f; \lambda_f) - \mathcal{H}(x_i; \lambda_i) \quad (\text{A.1})$$

donde \mathcal{H} representa el Hamiltoniano del sistema. Además, la única fuente de aleatoriedad está en las condiciones iniciales de las partículas, cuya distribución de probabilidad $P(x_i; \lambda_i)$ viene dada por el ensamble canónico:

$$P(x_i; \lambda_i) = \frac{1}{Z(\lambda_i)} e^{-\beta\mathcal{H}(x_i; \lambda_i)} \quad (\text{A.2})$$

donde Z es la función de partición canónica y $\beta = (kT)^{-1}$ siendo k la constante de Boltzmann.

Nuestro objetivo será relacionar las funciones $P(W)$ y $P^*(-W)$; es decir, las distribuciones de probabilidad de realizar un trabajo W en el protocolo directo y la de realizar un trabajo $-W$ en el protocolo inverso. Para ello, comenzamos por relacionar entre sí las distribuciones $P(x_i; \lambda_i)$ y $P(x_i^*; \lambda_f)$. Usando la ecuación (A.2), tenemos que:

$$\frac{P(x_i; \lambda_i)}{P(x_i^*; \lambda_f)} = \frac{Z(\lambda_f)}{Z(\lambda_i)} e^{\beta[\mathcal{H}(x_i^*; \lambda_f) - \mathcal{H}(x_i; \lambda_i)]} \quad (\text{A.3})$$

$$= e^{-\beta\Delta F} e^{\beta[\mathcal{H}(x_i^*; \lambda_f) - \mathcal{H}(x_i; \lambda_i)]} \quad (\text{A.4})$$

donde también usamos la relación que existe entre la función de partición canónica Z y la energía libre de Helmholtz F :

$$F = -kT \ln(Z) \quad (\text{A.5})$$

Pero $x_i^* = (q_f; -p_f)$ es muy parecido a $x_f = (q_f; p_f)$ salvo por el signo opuesto en los momentos. Sin embargo, usando que el Hamiltoniano es cuadrático en la variable p en su término cinético, resulta indistinto escribir:

$$\frac{P(x_i; \lambda_i)}{P(x_i^*; \lambda_f)} = e^{-\beta\Delta F} e^{\beta[\mathcal{H}(x_f; \lambda_f) - \mathcal{H}(x_i; \lambda_i)]} \quad (\text{A.6})$$

$$= e^{-\beta\Delta F} e^{\beta W} = e^{\beta(W - \Delta F)} \quad (\text{A.7})$$

A partir de este resultado, podemos expresar:

$$P(W) = \int dx_i P(x_i; \lambda_i) \delta(W - W(x_i)) \quad (\text{A.8})$$

$$= e^{\beta(W - \Delta F)} \int dx_i P(x_i^*; \lambda_f) \delta(W - W(x_i)) \quad (\text{A.9})$$

pero, por el teorema de Liouville, los elementos de volumen dx_i y dx_f son iguales. Sin embargo, a su vez, los elementos dx_f y dx_i^* son iguales ya que en lo único que se diferencian es en el signo de los momentos. Por lo tanto:

$$P(W) = e^{\beta(W - \Delta F)} \int dx_i^* P(x_i^*; \lambda_f) \delta(W - W(x_i)) \quad (\text{A.10})$$

Como $W(x_i) = -W^*(x_i^*)$, y aprovechando la paridad de la función delta de Dirac, llegamos a que:

$$P(W) = e^{\beta(W - \Delta F)} \int dx_i^* P(x_i^*; \lambda_f) \delta(W + W^*(x_i^*)) \quad (\text{A.11})$$

$$= e^{\beta(W - \Delta F)} \int dx_i^* P(x_i^*; \lambda_f) \delta(-W - W^*(x_i^*)) \quad (\text{A.12})$$

$$= e^{\beta(W - \Delta F)} P^*(-W) \quad (\text{A.13})$$

obteniéndose el **teorema de Crooks**:

$$\frac{P(W)}{P^*(-W)} = e^{\beta(W - \Delta F)} \quad (\text{A.14})$$

Este resultado lo hemos obtenido para el caso particular donde asumimos que el protocolo se aplica con el sistema aislado del reservorio, pero puede probarse que este resultado también vale en el caso general. La diferencia es que, en lugar de integrar únicamente sobre las condiciones iniciales del sistema, hay que integrar también sobre las condiciones iniciales del reservorio.

Apéndice B

Límite adiabático

Consideremos un sistema físico que evoluciona de acuerdo a un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ que depende explícitamente del tiempo t . Si tomamos al tiempo como un parámetro, para un cierto valor de t tendremos los respectivos autovalores $\{E_n(t)\}$ de energía y los autoestados $\{|n(t)\rangle\}$ que diagonalizan a $\mathcal{H}(t)$. Es decir:

$$\mathcal{H}(t) |n(t)\rangle = E_n(t) |n(t)\rangle \quad (\text{B.1})$$

Por simplicidad, asumiremos que en cada instante de tiempo t el espectro es discreto y no degenerado; en particular, no se producen cruces entre los niveles instantáneos de energía.

Veamos cómo gobierna la dinámica de este Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ para un estado general $|\psi(t)\rangle$ que es construido a partir de la combinación lineal de sus autoestados instantáneos $|n(t)\rangle$ (que forman una base instantánea) con ciertos coeficientes $c_n(t)$ que varían en el tiempo. Por lo cual, tenemos que:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n(t)\rangle \quad (\text{B.2})$$

Al poner esto en la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{B.3})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_n c_n(t) |n(t)\rangle \right) = \mathcal{H}(t) \sum_n c_n(t) |n(t)\rangle \quad (\text{B.4})$$

$$i\hbar \left(\sum_n \dot{c}_n(t) |n(t)\rangle + \sum_n c_n(t) |\dot{n}(t)\rangle \right) = \sum_n c_n(t) E_n(t) |n(t)\rangle \quad (\text{B.5})$$

donde se usó la relación mencionada en (B.1) y la notación $\frac{\partial}{\partial t} X \equiv \dot{X}$. Si aplicamos $\langle m(t) |$ a esta última expresión, donde $|m(t)\rangle$ es un autoestado instantáneo del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ y $\langle m(t) | n(t) \rangle = \delta_{mn}$, entonces:

$$i\hbar \langle m(t) | \left(\sum_n \dot{c}_n(t) |n(t)\rangle + \sum_n c_n(t) |\dot{n}(t)\rangle \right) = \langle m(t) | \sum_n c_n(t) E_n(t) |n(t)\rangle \quad (\text{B.6})$$

$$i\hbar \left(\sum_n \dot{c}_n(t) \underbrace{\langle m(t) | n(t) \rangle}_{=\delta_{mn}} + \sum_n c_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle \right) = \sum_n c_n(t) E_n(t) \underbrace{\langle m(t) | n(t) \rangle}_{=\delta_{mn}} \quad (\text{B.7})$$

Luego:

$$i\hbar \left(\dot{c}_m(t) + \sum_n c_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle \right) = c_m(t) E_m(t) \quad (\text{B.8})$$

$$i\hbar \left(\dot{c}_m(t) + c_m(t) \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle + \sum_{n \neq m} c_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle \right) = c_m(t) E_m(t) \quad (\text{B.9})$$

donde al final lo que hicimos fue separar de la sumatoria aquel término donde $n = m$.

Por otra parte, podemos tomar la expresión dada por (B.1) y derivar temporalmente a ambos lados de la igualdad:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{H}(t) |n(t)\rangle) = \frac{\partial}{\partial t} (E_n(t) |n(t)\rangle) \quad (\text{B.10})$$

$$\dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle + \mathcal{H}(t) |\dot{n}(t)\rangle = \dot{E}_n(t) |n(t)\rangle + E_n(t) |\dot{n}(t)\rangle \quad (\text{B.11})$$

aplicando $\langle m(t) |$ a ambos lados:

$$\langle m(t) | \left(\dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle + \mathcal{H}(t) |\dot{n}(t)\rangle \right) = \langle m(t) | \left(\dot{E}_n(t) |n(t)\rangle + E_n(t) |\dot{n}(t)\rangle \right) \quad (\text{B.12})$$

$$\langle m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle + \underbrace{\langle m(t) | \mathcal{H}(t) |\dot{n}(t)\rangle}_{=E_m(t)\langle m(t) |} = \dot{E}_n(t) \underbrace{\langle m(t) | n(t)\rangle}_{=\delta_{mn}} + E_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t)\rangle \quad (\text{B.13})$$

$$\langle m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle + E_m(t) \langle m(t) | \dot{n}(t)\rangle = \dot{E}_n(t) \delta_{mn} + E_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t)\rangle \quad (\text{B.14})$$

donde tenemos que para $m \neq n$ ($\delta_{mn} = 0$):

$$\langle m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle + E_m(t) \langle m(t) | \dot{n}(t)\rangle = E_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t)\rangle \quad (\text{B.15})$$

$$\boxed{\langle m(t) | \dot{n}(t)\rangle = -\frac{\langle m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)}} \quad (m \neq n) \quad (\text{B.16})$$

Poniendo la expresión (B.16) en la ecuación (B.9) llegamos a:

$$i\hbar \left(\dot{c}_m(t) + c_m(t) \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle - \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)} \right) = c_m(t) E_m(t) \quad (\text{B.17})$$

$$\boxed{\dot{c}_m(t) + c_m(t) \left(\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle + \frac{i}{\hbar} E_m(t) \right) = \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)}} \quad (\text{B.18})$$

Nos resulta interesante estudiar el **límite adiabático**; es decir, donde los términos por fuera de la diagonal de $\dot{\mathcal{H}}(t)$, en la base que diagonaliza a $\mathcal{H}(t)$, son muy chicos. En particular, queremos que estos términos sean chicos respecto a la separación de niveles de $\mathcal{H}(t)$. Entonces:

$$\beta_{mn}(t) \equiv \frac{\langle m(t) | \dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)} \rightarrow 0 \quad \forall t, \quad m \neq n \quad (\text{B.19})$$

donde se ve que $\beta_{mn}(t) = -\beta_{nm}^*(t)$, siendo $*$ el conjugado complejo. Esto es equivalente a pedir que la perturbación que afecta al sistema es suficientemente lenta, ya que podemos pensar al Hamiltoniano en

un tiempo $t + dt$ (a primer orden) como:

$$\mathcal{H}(t + dt) \approx \mathcal{H}(t) + \dot{\mathcal{H}}(t)dt \quad (\text{B.20})$$

jugando $\dot{\mathcal{H}}(t)$ el rol de una perturbación. Esto es, justamente, el análogo de la termodinámica clásica a un proceso que se realiza cuasiestáticamente. Así, lo que se encuentra a la derecha de la igualdad en la relación (B.18) puede considerarse nulo y se tiene que:

$$\dot{c}_m(t) + c_m(t) \left(\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle + \frac{i}{\hbar} E_m(t) \right) = 0 \quad (\text{B.21})$$

Esto es una ecuación diferencial que podemos resolver para los coeficientes $c_m(t)$, la cual resulta ser su solución:

$$c_m(t) = c_m(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt'} e^{-\int_0^t \langle m(t') | \dot{m}(t') \rangle dt'} \quad (\text{B.22})$$

$$= c_m(0) e^{-i\theta_m(t)} e^{-i\gamma_m(t)} \quad (\text{B.23})$$

donde definimos:

$$\theta_m(t) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt' \quad \text{y} \quad \gamma_m(t) \equiv -i \int_0^t \langle m(t') | \dot{m}(t') \rangle dt' \quad (\text{B.24})$$

La razón por la que definimos de esta manera a los argumentos de las exponenciales es para notar lo siguiente: en primer lugar, $\theta_m(t)$ toma valores reales debido a que $\mathcal{H}(t)$ es hermítico ($E_m(t)$ reales) por lo que la exponencial $e^{-i\theta_m(t)}$ resulta ser simplemente una fase, que es denominada como **fase dinámica**. Por otro lado, tenemos $\gamma_m(t)$ que relaciona el producto interno del autoestado $|m(t)\rangle$ y su derivada temporal. Podemos ver que:

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} (1) = \frac{\partial}{\partial t} (\langle m(t) | m(t) \rangle) = \langle \dot{m}(t) | m(t) \rangle + \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle \quad (\text{B.25})$$

$$= 2 \operatorname{Re} (\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle) \quad \Rightarrow \quad \boxed{\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle \in i} \quad (\text{B.26})$$

por lo que $\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle$ solo tiene parte imaginaria. Esto repercute en que $\gamma_m(t) \in \mathbb{R}$, logrando que $e^{-i\gamma_m(t)}$ sea una fase denominada como **fase geométrica**. Por lo cual, de la expresión (B.23) puede deducirse que:

$$|c_m(t)|^2 = \left| c_m(0) e^{-i\theta_m(t)} e^{-i\gamma_m(t)} \right|^2 \quad \Rightarrow \quad \boxed{|c_m(t)|^2 = |c_m(0)|^2} \quad (\text{B.27})$$

Este último resultado indica que no se producen transiciones entre los niveles que diagonalizan instantáneamente el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ debido a que la probabilidad $|c_n(t)|^2$ asociada a cada autoestado $|n(t)\rangle$ permanece constante $\forall t$. Es decir, si el sistema empieza en un autoestado $|n(0)\rangle$ de $\mathcal{H}(0)$, a un tiempo t estará en su correspondiente autoestado $|n(t)\rangle$ del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ (a diferencia de una fase), que es lo que buscábamos.

Apéndice C

Atajo adiabático

Daremos un enfoque con *ingeniería inversa* [46] tal que podamos encontrar un nuevo Hamiltoniano $\mathcal{H}_{AA}(t)$, asociado a nuestro **Hamiltoniano original** $\mathcal{H}(t)$, que permita que los autoestados instantáneos $|n(t)\rangle$ del Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ no produzcan transiciones energéticas de manera exacta (a comparación del límite adiabático, donde se logra de manera aproximada). Es decir, buscamos un **Hamiltoniano por atajo adiabático** $\mathcal{H}_{AA}(t)$ que pueda escribirse como:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = \mathcal{H}(t) + \mathcal{H}_{CD}(t) \quad (\text{C.1})$$

donde llamamos $\mathcal{H}_{CD}(t)$ a nuestro **Hamiltoniano contradiabático** que *modificará* a $\mathcal{H}(t)$ y dará la contribución para que se produzca el atajo adiabático en la dinámica de nuestro sistema.

Partiendo desde el inicio, tenemos un Hamiltoniano original $\mathcal{H}(t)$ que tiene su espectro de auto-energías $\{E_n(t)\}$ y autoestados $\{|n(t)\rangle\}$ instantáneos. Asumiremos que en cada instante de tiempo t el espectro es discreto y no degenerado; además, no se producen cruces entre los niveles de energía. Para que la dinámica sea la misma que la que conseguiríamos en el límite adiabático, tenemos que para un estado general $|\psi(t)\rangle$ que puede construirse como combinación lineal de los autoestados instantáneos $|n(t)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n(t)\rangle \quad (\text{C.2})$$

los coeficientes $c_n(t)$ deben satisfacer la condición (ver ecuación B.23 del Apéndice B):

$$c_m(t) = c_m(0) e^{-i\theta_m(t)} e^{-i\gamma_m(t)} \quad (\text{C.3})$$

donde definimos:

$$\theta_m(t) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt' \quad \text{y} \quad \gamma_m(t) \equiv -i \int_0^t \langle m(t') | \dot{m}(t') \rangle dt' \quad (\text{C.4})$$

Esto puede conseguirse si se plantea una evolución temporal \mathcal{U} de la forma:

$$\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(t, 0) = \sum_m e^{-i\theta_m(t)} e^{-i\gamma_m(t)} |m(t)\rangle \langle m(0)| \quad (\text{C.5})$$

Con esto, tenemos que:

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U} |\psi(0)\rangle = \sum_m e^{-i\theta_m(t)} e^{-i\gamma_m(t)} |m(t)\rangle \langle m(0)| \sum_n c_n(0) |n(0)\rangle \quad (\text{C.6})$$

$$= \sum_n c_n(0) \sum_m e^{-i\theta_m(t)} e^{-i\gamma_m(t)} |m(t)\rangle \underbrace{\langle m(0)|n(0)\rangle}_{=\delta_{mn}} \quad (\text{C.7})$$

$$= \sum_n \underbrace{c_n(0) e^{-i\theta_n(t)} e^{-i\gamma_n(t)}}_{=c_n(t)} |n(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n(t)\rangle \quad \checkmark \quad (\text{C.8})$$

y puede verse que esto se cumple $\forall t$, independientemente de si el proceso es suficientemente lento o no.

Dada la expresión del operador evolución \mathcal{U} , podemos hallar cuál Hamiltoniano $\mathcal{H}_{AA}(t)$ hace posible este proceso; es debido a esto que se conoce este método como realizar *ingeniería inversa*. Recordemos la ecuación diferencial que relaciona \mathcal{U} con el Hamiltoniano de nuestro sistema:

$$i\hbar \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = \mathcal{H}_{AA}(t) \mathcal{U} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\mathcal{H}_{AA}(t) = i\hbar \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} \mathcal{U}^\dagger} \quad (\text{C.9})$$

Usando que $\langle m(0)|n(0)\rangle = \delta_{mn}$ y calculando:

$$\dot{\theta}_n(t) = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \right] = \frac{E_n(t)}{\hbar} \quad (\text{C.10})$$

$$\dot{\gamma}_n(t) = \frac{\partial}{\partial t} \left[-i \int_0^t \langle n(t') | \dot{n}(t') \rangle dt' \right] = -i \langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle \quad (\text{C.11})$$

podemos ver a partir de (C.9) que $\mathcal{H}_{AA}(t)$ resulta ser:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = i\hbar \sum_m e^{-i\theta_m(t)} e^{-i\gamma_m(t)} \left[-i\dot{\theta}_m(t) |m(t)\rangle \langle m(0)| - i\dot{\gamma}_m(t) |m(t)\rangle \langle m(0)| + |\dot{m}(t)\rangle \langle m(0)| \right] \cdot \sum_n e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} |n(0)\rangle \langle n(t)| \quad (\text{C.12})$$

$$= i\hbar \sum_n \sum_m e^{-i\theta_m(t)} e^{-i\gamma_m(t)} \left[-i \frac{E_m(t)}{\hbar} |m(t)\rangle \langle n(t)| - \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle |m(t)\rangle \langle n(t)| + |\dot{m}(t)\rangle \langle n(t)| \right] \cdot e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} \delta_{mn} \quad (\text{C.13})$$

Luego:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = i\hbar \sum_n \left[-i \frac{E_n(t)}{\hbar} |n(t)\rangle \langle n(t)| - \langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle |n(t)\rangle \langle n(t)| + |\dot{n}(t)\rangle \langle n(t)| \right] \quad (\text{C.14})$$

$$= \underbrace{\sum_n E_n(t) |n(t)\rangle \langle n(t)|}_{=\mathcal{H}(t)} - i\hbar \underbrace{\sum_n [\langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle |n(t)\rangle \langle n(t)| - |\dot{n}(t)\rangle \langle n(t)|]}_{=\mathcal{H}_{CD}(t)} \quad (\text{C.15})$$

donde podemos diferenciar la parte correspondiente a nuestro Hamiltoniano original $\mathcal{H}(t)$ y la parte contradiabática $\mathcal{H}_{CD}(t)$.

Daremos una expresión más prolífica para $\mathcal{H}_{CD}(t)$. Esta magnitud puede ser escrita como:

$$\mathcal{H}_{CD}(t) = -i\hbar \sum_n [|n(t)\rangle\langle n(t)| |\dot{n}(t)\rangle\langle n(t)| - |\dot{n}(t)\rangle\langle n(t)|] \quad (\text{C.16})$$

$$= -i\hbar \sum_n [|n(t)\rangle\langle n(t)| - \mathbb{I}] |\dot{n}(t)\rangle\langle n(t)| \quad (\text{C.17})$$

$$= i\hbar \sum_n \sum_{m \neq n} |m(t)\rangle\langle m(t)| |\dot{n}(t)\rangle\langle n(t)| \quad (\text{C.18})$$

$$= -i\hbar \sum_n \sum_{m \neq n} \frac{\langle m(t)| \dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)} |m(t)\rangle\langle n(t)| \quad (\text{C.19})$$

donde se utilizó que $\sum_{m \neq n} |m(t)\rangle\langle m(t)| = \mathbb{I} - |n(t)\rangle\langle n(t)|$, siendo \mathbb{I} el operador identidad, y la relación (ver ecuación B.16 del Apéndice B):

$$\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle = -\frac{\langle m(t)| \dot{\mathcal{H}}(t) |n(t)\rangle}{E_m(t) - E_n(t)} \quad (m \neq n) \quad (\text{C.20})$$

para ligar $\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle$ con los elementos de $\dot{\mathcal{H}}(t)$ por fuera de la diagonal, en la base de autoestados instantáneos de $\mathcal{H}(t)$. Así, podemos escribir al Hamiltoniano por atajo adiabático $\mathcal{H}_{AA}(t)$, de nuestro Hamiltoniano original $\mathcal{H}(t)$, como:

$$\mathcal{H}_{AA}(t) = \mathcal{H}(t) - i\hbar \sum_n \sum_{m \neq n} \beta_{mn}(t) |m(t)\rangle\langle n(t)| \quad (\text{C.21})$$

donde habíamos definido $\beta_{mn}(t)$ en la relación (1.76).

Apéndice D

Mediciones en mecánica cuántica

Recordaremos brevemente el formalismo estándar de **mediciones proyectivas** y, con ello, pondremos en evidencia las diferencias fundamentales con el formalismo más abarcativo de las **mediciones generalizadas**.

Mediciones proyectivas

La formulación más sencilla del proceso de medición en un sistema cuántico es el esquema de las mediciones proyectivas o de *von Neumann*. En este formalismo, cada observable físico A se representa por medio de un operador hermítico $\mathbb{A} = \mathbb{A}^\dagger$. Si denotamos $\{\lambda_n\}$ y $\{|\lambda_n\rangle\}$ a los respectivos autovalores y autoestados de \mathbb{A} , entonces los mismos cumplen que:

$$\mathbb{A} |\lambda_n\rangle = \lambda_n |\lambda_n\rangle \quad (\text{D.1})$$

Luego, los autovalores $\{\lambda_n\}$ representan los posibles resultados de la medición del observable \mathbb{A} . Por lo tanto, el número de resultados posibles es siempre igual a la dimensión del espacio de Hilbert (o menor, en su defecto, si se presentan degeneraciones).

Si el sistema se encuentra en un estado inicial ρ , la probabilidad p_n de obtener el resultado λ_n está dada por la *regla de Born*:

$$p_n \equiv \text{tr}[\rho \Pi_n] \quad (\text{D.2})$$

donde $\Pi_n = |\lambda_n\rangle\langle\lambda_n|$ es el proyector sobre el autoestado de \mathbb{A} . A su vez, si el resultado de la medición es λ_n , entonces el estado del sistema luego de la medición es:

$$\rho_n \equiv \frac{\Pi_n \rho \Pi_n}{p_n} \quad (\text{D.3})$$

Es decir, el sistema luego de la medición termina proyectado sobre el autoestado correspondiente al autovalor observado. Por lo tanto, dado que los proyectores $\{\Pi_n\}$ forman una base ortonormal:

$$\sum_n \Pi_n = \mathbb{I} \quad , \quad \Pi_n \Pi_m = \delta_{nm} \Pi_n \quad (\text{D.4})$$

se tiene que una segunda medición de A llevada a cabo sobre ρ_n devolverá el mismo resultado λ_n . Efectivamente, debido a la condición de ortogonalidad, los estados $|\lambda_n\rangle\langle\lambda_n|$ correspondientes a los distintos

valores del observable A son mutuamente excluyentes entre sí.

Mediciones generalizadas

La formulación de mediciones proyectivas no es la más general posible de asignar probabilidades a estados cuánticos. Es innecesariamente restrictiva y, por ello, no es la más adecuada para tratar distintos temas de interés. Por este motivo, resulta útil extender la definición de medición sobre un sistema cuántico introduciendo el concepto de mediciones generalizadas.

La medición más general posible que se puede realizar sobre un sistema cuántico está descrita formalmente por un **POVM** (del inglés: “Positive Operator Valued Measure”). Este se encuentra conformado por un conjunto de operadores $\{E_\mu\}$, con $1 \leq \mu \leq N$, tales que:

P1. **Son hermíticos:** $E_\mu^\dagger = E_\mu$

P2. **Son semi-definidos positivos:** $\langle E_\mu \rangle \geq 0$

P3. **Suman la identidad:** $\sum_\mu E_\mu = \mathbb{I}$

La etiqueta μ identifica los diferentes resultados posibles de la medición. Dejamos la libertad de que el número total de resultados N sea cualquier número natural (o incluso, infinito), pudiendo ser mayor o menor que la dimensión del espacio de Hilbert del sistema. Aquí, vemos la diferencia principal con el caso de las mediciones proyectivas.

Con esto, si un sistema cuántico se encuentra en el estado ρ , entonces la probabilidad de obtener el resultado μ está dada por:

$$p_\mu \equiv \text{tr}[\rho E_\mu] \quad (\text{D.5})$$

Notemos que las propiedades (P1), (P2) y (P3) que definen a los POVM son suficientes (y necesarias) para que p_μ así definido sea efectivamente una probabilidad (es decir que $p_\mu \geq 0$ y $\sum_\mu p_\mu = 1$) [51].

Cabe destacar que las mediciones proyectivas cumplen con las propiedades (P1), (P2) y (P3) mencionadas para los POVM, donde ahora $E_\mu \equiv \Pi_\mu$ son proyectores y, por lo tanto, están incluidos en el formalismo de las mediciones generalizadas.

Otra diferencia entre las mediciones proyectivas y generalizadas radica en que las mediciones proyectivas tienen la restricción adicional de que los proyectores deben ser ortogonales entre sí, mientras que para un POVM general los operadores $\{E_\mu\}$ no serán ortogonales. Por lo tanto, en una medición generalizada los distintos resultados μ no son necesariamente excluyentes entre sí.

En particular, los POVM son las mediciones que permiten extraer la mayor información posible de un estado cuántico [51, 52]. Su teoría tiene origen en el ámbito de la óptica cuántica debido a su estrecha relación con los estados coherentes de la luz. Los estados coherentes $|\alpha\rangle$ se definen como los autoestados del operador aniquilación del campo electromagnético y son de particular importancia teórica y experimental en cuanto a que describen estados de incertidumbre mínima y son los estados más similares a la descripción clásica de la luz. Se puede mostrar que los estados coherentes forman una base sobre-completa; es decir, cualquier estado se puede desarrollar como una combinación lineal de estados coherentes, pero no son ortogonales entre sí. Por lo tanto, resulta imposible definir una medición proyectiva sobre los estados coherentes. Sin embargo, se puede mostrar que los operadores $E_\mu \equiv \frac{1}{\pi} |\alpha\rangle\langle\alpha|$ forman un POVM [52]. Así, vemos que el formalismo de mediciones generalizadas resulta

necesario para describir una medición que asigne probabilidades a la posibilidad de encontrar el campo en los distintos estados coherentes $|\alpha\rangle$.

Ahora bien, tal como hicimos para las mediciones proyectivas, cabe preguntarse cuál es el estado del sistema luego de medir un cierto POVM. Efectivamente, los operadores $\{E_\mu\}$ que definen el POVM no son suficientes para responder esta pregunta. Esto se debe a que existen distintos procedimientos experimentales que pueden realizar un mismo POVM; es decir, que generen la misma asignación de probabilidades sobre los estados del sistema. Por lo tanto, para determinar cuál es el estado del sistema luego de la medición es necesario describir más detalladamente el proceso de medición. La forma más general de lograr esto es definir un conjunto de operadores de medición $\{M_\mu\}$ tales que:

$$E_\mu \equiv M_\mu^\dagger M_\mu \quad (\text{D.6})$$

Notemos que esta relación es consistente con las condiciones de que los operadores $\{E_\mu\}$ sean semi-definidos positivos y hermíticos.

Luego, si el sistema se encuentra inicialmente en el estado ρ y el resultado de la medición del POVM descrito por $\{E_\mu\}$ es μ , el estado del sistema luego de la medición es:

$$\rho_\mu \equiv \frac{M_\mu \rho M_\mu^\dagger}{p_\mu} \quad (\text{D.7})$$

A diferencia del caso proyectivo, los operadores $\{M_\mu\}$, en general, no son ortogonales entre sí. Por lo tanto, medir nuevamente el mismo POVM sobre el estado ρ_μ puede producir un resultado distinto.

Al momento de interpretar físicamente el significado de los operadores de medición que intervienen en un POVM, y cómo dependen del proceso de medición específico, resulta extremadamente útil el **teorema de Neumark**. En la siguiente sección, daremos un análisis minucioso del mismo, donde explicaremos cómo la inclusión de un sistema cuántico auxiliar puede ayudar a obtener los resultados deseados.

Teorema de Neumark

Un resultado fundamental que da sentido físico claro a la construcción de los POVM es el teorema de Neumark, el cual establece que todo POVM se puede realizar acoplando el sistema sobre el cual se quiere medir el POVM con un sistema cuántico auxiliar mediante una transformación unitaria global apropiada y, finalmente, realizando una medición proyectiva estándar sobre el sistema auxiliar [51]. A continuación, procederemos a su desarrollo y análisis para así tener una mejor interpretación en cuanto a las mediciones cuánticas generalizadas. Cabe notar que el teorema garantiza que esta implementación del POVM existe, pero en general no es única, sino que hay distintas implementaciones físicas de un mismo POVM.

Consideremos un POVM descrito por un conjunto de operadores $\{E_\mu\}$, con $1 \leq \mu \leq N$, los cuales pueden expresarse en función de operadores de medición $\{M_\mu\}$, tal como anticipamos en la relación (D.6). Además, supongamos que tenemos un sistema, al que denotaremos como \mathcal{S} , y queremos implementar una medición generalizada descrita por los operadores $\{M_\mu\}$. Para llevar a cabo la medición, introduciremos un sistema auxiliar (o también llamado *ancilla*), al cual denotaremos como \mathcal{A} , que posee una base ortonormal $\{|\mu\rangle\}$, cuyos estados tienen una correspondencia uno a uno con los posibles

resultados de la medición a implementar. Podemos considerar a la *ancilla* como un sistema auxiliar matemático, o si no puede también ser interpretada como un sistema real físico que juega el rol de aparato de medición, siendo $|\mu\rangle$ un estado puntero que nos indica el resultado obtenido.

Sean $|0\rangle$ y $|\psi\rangle$ estados particulares de \mathcal{A} y \mathcal{S} , respectivamente, definiremos un operador unitario \mathcal{U} que actúa sobre el sistema $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ de forma tal que:

$$\mathcal{U}|\psi, 0\rangle \equiv \sum_{\mu} M_{\mu} |\psi\rangle \otimes |\mu\rangle \quad (\text{D.8})$$

donde definimos la notación $|a, b\rangle \equiv |a\rangle \otimes |b\rangle$. Podemos mostrar que esta transformación preserva el producto interno entre dos estados $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$ del sistema \mathcal{S} antes y después de aplicar el operador \mathcal{U} ; es decir, conserva sus proyecciones y, con ello, sus probabilidades. Esto puede verse con:

$$\langle \phi, 0 | \mathcal{U}^{\dagger} \mathcal{U} | \psi, 0 \rangle = \sum_{\mu', \mu''} \langle \phi | M_{\mu'}^{\dagger} M_{\mu''} | \psi \rangle \underbrace{\langle \mu' | \mu'' \rangle}_{=\delta_{\mu' \mu''}} = \sum_{\mu} \langle \phi | \underbrace{M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu}}_{=E_{\mu}} | \psi \rangle \quad (\text{D.9})$$

$$= \langle \phi | \sum_{\mu} E_{\mu} | \psi \rangle = \langle \phi | \mathbb{I}_{\mathcal{S}} | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \quad \checkmark \quad (\text{D.10})$$

donde utilizamos la ortonormalidad de los autoestados $\{|\mu\rangle\}$, la relación de E_{μ} con los operadores M_{μ} dada por (D.6) y la propiedad $\sum_{\mu} E_{\mu} = \mathbb{I}_{\mathcal{S}}$, siendo $\mathbb{I}_{\mathcal{S}}$ el operador identidad en el espacio del sistema \mathcal{S} .

Ahora sí, yendo a lo importante, supongamos que realizamos una medición proyectiva sobre el sistema total $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ una vez aplicado el operador unitario \mathcal{U} . Esta medición proyectiva la definiremos por los proyectores $\{\Pi_{\mu}\}$ tales que:

$$\Pi_{\mu} \equiv \mathbb{I}_{\mathcal{S}} \otimes |\mu\rangle\langle\mu| \quad (\text{D.11})$$

por lo que estamos, en el fondo, realizando una medición proyectiva estándar sobre el sistema auxiliar. Así, la probabilidad p_{μ} de obtener el resultado μ es:

$$p_{\mu} = \langle \psi, 0 | \mathcal{U}^{\dagger} \Pi_{\mu} \mathcal{U} | \psi, 0 \rangle \quad (\text{D.12})$$

$$= \sum_{\mu', \mu''} (\langle \psi | M_{\mu'}^{\dagger} \otimes \langle \mu' |) (\mathbb{I}_{\mathcal{S}} \otimes |\mu\rangle\langle\mu|) (M_{\mu''} | \psi \rangle \otimes | \mu'' \rangle) \quad (\text{D.13})$$

$$= \sum_{\mu', \mu''} \langle \psi | M_{\mu'}^{\dagger} M_{\mu''} | \psi \rangle \underbrace{\langle \mu' | \mu \rangle}_{=\delta_{\mu' \mu}} \underbrace{\langle \mu | \mu'' \rangle}_{=\delta_{\mu \mu''}} \quad (\text{D.14})$$

$$= \langle \psi | M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} | \psi \rangle = \langle \psi | E_{\mu} | \psi \rangle \quad \checkmark \quad (\text{D.15})$$

que reproduce la expresión definida en (D.5) para la distribución de probabilidad de la medición generalizada E_{μ} .

Luego, el estado del sistema total $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ después de la medición estará dado por:

$$\frac{\Pi_{\mu} \mathcal{U} | \psi, 0 \rangle}{\sqrt{\langle \psi, 0 | \mathcal{U}^{\dagger} \Pi_{\mu} \mathcal{U} | \psi, 0 \rangle}} = \frac{M_{\mu} |\psi\rangle \otimes |\mu\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} | \psi \rangle}} \quad (\text{D.16})$$

Finalmente, si tomamos traza parcial sobre el sistema auxiliar \mathcal{A} , vemos que el estado \mathcal{S} resulta ser:

$$\frac{M_\mu |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_\mu^\dagger M_\mu|\psi\rangle}} \quad (\text{D.17})$$

que, comparado a la expresión (D.7), reproduce el estado de la medición luego de la medición generalizada M_μ .

Como conclusión a esto, debe entenderse que cualquier medición generalizada se puede implementar introduciendo sistemas auxiliares y realizando secuencias de evoluciones unitarias apropiadas, como la definida en (D.8), y mediciones proyectivas sobre el sistema total, como la dada en (D.11).

Apéndice E

Formalismo para cuasi-probabilidades reales

Nuestro objetivo es extender el formalismo de cuasi-probabilidades al caso de **múltiples eventos**. Para ello, comenzaremos analizando dos eventos E, G y posteriormente generalizaremos el resultado a un número arbitrario de eventos. Sin embargo, dado que buscamos ir más allá del marco convencional de las probabilidades, relajaremos la restricción de no-negatividad en la estadística de E, G , permitiendo que pueda tomar cualquier valor real. Así, introducimos el concepto de **cuasi-probabilidad** $q(E, G)$, cuya definición se basará en las siguientes propiedades:

$$q(E, G) \in \mathbb{R} \quad (\text{E.1})$$

$$q(\mathbb{I}, E) \equiv q(E, \mathbb{I}) \equiv p(E) \quad (\text{E.2})$$

$$q(E + F + \dots, G) \equiv q(E, G) + q(F, G) + \dots \quad (\text{E.3})$$

$$q(G, E + F + \dots) \equiv q(G, E) + q(G, F) + \dots \quad (\text{E.4})$$

donde los operadores E, F, \dots pertenecen al mismo conjunto de operadores de un dado POVM. Notar que a través de la relación (E.2) se recupera la noción intuitiva de probabilidad, mientras que las expresiones (E.3) y (E.4) buscan ser análogas a la propiedad dada en (3.4) pero en ambos argumentos de la función $q(\cdot, \cdot)$.

Las propiedades definidas para las cuasi-probabilidades permiten deducir otras a partir de ellas. Por ejemplo, con el fin de mostrar que $q(\cdot, \cdot)$ es lineal en ambas entradas (bilineal), debemos ver cómo actúa frente a los escalares. Tomando $n \in \mathbb{N}$:

$$q(E, G) = q\left(n \frac{E}{n}, G\right) = q\left(\overbrace{\frac{E}{n} + \dots + \frac{E}{n}}^{n \text{ veces}}, G\right) \quad (\text{E.5})$$

$$= q\left(\frac{E}{n}, G\right) + \dots + q\left(\frac{E}{n}, G\right) = n q\left(\frac{E}{n}, G\right) \quad (\text{E.6})$$

que implica:

$$q\left(\frac{E}{n}, G\right) = \frac{1}{n} q(E, G) \quad \text{si} \quad n \in \mathbb{N} \quad (\text{E.7})$$

A partir de aquí, podemos definir un escalar racional $\{\alpha \in \mathbb{Q} : 0 \leq \alpha \leq 1\}$ tal que $\alpha = \frac{m}{n}$ con $m \in \mathbb{N}$. Luego, tenemos que:

$$q(\alpha E, G) = q\left(m \frac{E}{n}, G\right) = q\left(\overbrace{\frac{E}{n} + \dots + \frac{E}{n}}^{m \text{ veces}}, G\right) = \overbrace{q\left(\frac{E}{n}, G\right) + \dots + q\left(\frac{E}{n}, G\right)}^{m \text{ veces}} \quad (\text{E.8})$$

$$= m q\left(\frac{E}{n}, G\right) = \frac{m}{n} q(E, G) = \alpha q(E, G) \quad (\text{E.9})$$

donde usamos la propiedad deducida en (E.7). Con esto, comprobamos que los escalares racionales α definidos pueden extraerse fuera del argumento. Para mostrar que esto puede extrapolarse para cualquier número real $\{r \in \mathbb{R} : 0 \leq r \leq 1\}$, se pueden considerar sucesiones de números racionales $r_n \in [0, 1]$ tales que $r_n \rightarrow r$ cuando $n \rightarrow \infty$ [55]. Así, se consigue que:

$$q(rE, G) = r q(E, G) \quad \text{si} \quad r \in [0, 1] \quad (\text{E.10})$$

El hecho de que se cumplan las propiedades (E.3) y (E.10) implica que la función $q(\cdot, \cdot)$ es lineal en la primera entrada. De manera análoga, puede deducirse estas mismas propiedades en la segunda entrada, por lo que termina siendo lineal en ambas; ergo, la función $q(\cdot, \cdot)$ es **bilineal**.

Dado que $q(\cdot, \cdot)$ es una función lineal en ambas entradas y debe cumplir la relación (E.2) para recuperar la probabilidad convencional, resulta tentativo utilizar una definición que sea basada en la traza; esto resulta ser un análogo al teorema de Gleason [56], pero en el contexto de cuasi-probabilidades. Por lo tanto, plantearemos que la cuasi-probabilidad $q(\cdot, \cdot)$ debe tener la forma:

$$q(E, G) = \text{tr}[EX_G] \quad (\text{E.11})$$

donde el operador X_G depende del evento G (debe ser lineal en este) y también tiene que depender del estado cuántico ρ , pero no conoceríamos *a priori* su expresión. Sin embargo, utilizando la propiedad (E.2), vemos que:

$$p(G) = q(\mathbb{I}, G) \quad \Rightarrow \quad \text{tr}[G\rho] = \text{tr}[X_G] \quad (\text{E.12})$$

por lo que la forma lineal más general con la que puede ser representado el operador X_G para satisfacer la relación (E.12) es:

$$X_G \equiv \gamma G\rho + (1 - \gamma)\rho G \quad (\text{E.13})$$

donde $\gamma \in \mathbb{R}$, ya que:

$$\text{tr}[X_G] = \text{tr}[\gamma G\rho + (1 - \gamma)\rho G] \quad (\text{E.14})$$

$$= \gamma \text{tr}[G\rho] + (1 - \gamma) \text{tr}[\rho G] \quad (\text{E.15})$$

$$= \text{tr}[G\rho] + \cancel{\gamma \text{tr}[G\rho]} - \cancel{\gamma \text{tr}[\rho G]} = \text{tr}[G\rho] \quad \checkmark \quad (\text{E.16})$$

Por lo tanto, reemplazando la definición de X_G dada por (E.13) en la expresión (E.11), la función $q(\cdot, \cdot)$ resulta ser:

$$q(E, G) = \gamma \text{tr}[EG\rho] + (1 - \gamma) \text{tr}[E\rho G] \quad (\text{E.17})$$

Sin embargo, a fin de procurar que $q(\cdot, \cdot) \in \mathbb{R}$, como lo indica la propiedad (E.1), el único valor de

$\gamma \in \mathbb{R}$ que satisface esta condición para todo sistema cuántico ρ y $\forall E, G$ es con $\gamma = 1/2$. Así, tenemos finalmente que:

$$q(E, G) \equiv \Re(\text{tr}[EG\rho]) \quad (\text{E.18})$$

donde $\Re(\cdot)$ indica la parte real del argumento. Notar que la expresión dada por (E.18) cumple los requisitos que buscábamos para nuestra función de cuasi-probabilidad (en dos eventos): resulta ser real, es lineal en ambas entradas y se obtiene la probabilidad convencional cuando E ó G resultan ser el operador identidad \mathbb{I} .

A la hora de querer generalizar la función de cuasi-probabilidad $q(\cdot, \cdot, \dots)$ para un número arbitrario de eventos, la definiremos en base a propiedades análogas a las mencionadas en (E.1), (E.2), (E.3) y (E.4):

$$q(E, G, \dots) \in \mathbb{R} \quad (\text{E.19})$$

$$q(\mathbb{I}, E, G, \dots) \equiv q(E, \mathbb{I}, G, \dots) \equiv \dots \equiv q(E, G, \dots) \quad (\text{E.20})$$

$$q(E + F + \dots, G, \dots) \equiv q(E, G, \dots) + q(F, G, \dots) + \dots \quad (\text{E.21})$$

$$q(G, E + F + \dots, \dots) \equiv q(G, E, \dots) + q(G, F, \dots) + \dots \quad (\text{E.22})$$

donde los operadores E, F, \dots pertenecen al mismo conjunto de operadores de un dado POVM. A partir de aquí, también puede deducirse que la función $q(\cdot, \cdot, \dots)$ es lineal en cada una de sus entradas. Por lo cual, $q(\cdot, \cdot, \dots)$ es **multilineal**.

Para la expresión general de esta cuasi-probabilidad $q(\cdot, \cdot, \dots)$, extrapolaremos la relación para dos eventos [55]. Siguiéndonos de (E.18), resulta que:

$$q(E, G, \dots) \equiv \Re(\text{tr}[EG \dots \rho]) \quad (\text{E.23})$$

Podemos ver que esta expresión dada por (E.23) cumple los requisitos que buscábamos para nuestra función de cuasi-probabilidad: resulta ser real y es lineal en todas sus entradas. Además, notamos que si a una función de cuasi-probabilidad de N eventos se incluye al operador \mathbb{I} en uno de sus argumentos, entonces resulta ser una función de cuasi-probabilidad de $(N - 1)$ eventos:

$$q(\underbrace{E, \mathbb{I}, G, H \dots}_{N \text{ eventos}}) \equiv \Re(\text{tr}[E \mathbb{I} GH \dots \rho]) = \Re(\text{tr}[EGH \dots \rho]) \equiv q(\underbrace{E, G, H, \dots}_{(N-1) \text{ eventos}}) \quad (\text{E.24})$$

que es una propiedad análoga a la definida en (E.2), pero ahora para un número arbitrario de eventos, tal como indicamos en (E.20). Para el caso donde $N = 2$, recuperamos la noción intuitiva de probabilidad.

Otra característica a destacar para la expresión (E.23) es que **depende del orden de los eventos**. Es decir, no hay una simetría directa entre las entradas de la función $q(\cdot, \cdot, \dots)$. Esto implica que la función de cuasi-probabilidad depende de los eventos conjuntos. Como ejemplo, podemos particularizar al caso donde tenemos tres eventos. Aquí, se tiene que:

$$q(E, G, H) \neq q(G, E, H) \quad (\text{E.25})$$

donde la función $q(E, G, H)$ puede ser descompuesta en dos grupos conjuntos de eventos $E \wedge G$ y $G \wedge H$, mientras que la función $q(G, E, H)$ puede ser descompuesta en $G \wedge E$ y $E \wedge H$; es directo notar que ambas funciones tienen una distinta descomposición de eventos conjuntos. Cuando se tratan de tres

eventos, la única simetría directa es entre el primer y último argumento. Para el caso donde se tratan dos eventos, ambas entradas resultan ser simétricas; esto puede verse a partir de cómo resulta su expresión en (E.18), o sino percatándose de que coinciden en su descomposición de eventos conjuntos.

Se puede derivar una condición suficiente (la cual no es necesaria) para que la función de cuasi-probabilidad de un número arbitrario de eventos $q(\cdot, \cdot, \dots)$ definida en (E.23) sea no-negativa; es decir, para que pueda ser considerada como una probabilidad [54]. Tomaremos a los eventos involucrados como proyectores de rango uno, los cuales forman parte de un POVM. Empezaremos con el caso de dos eventos A, B , por lo que denotaremos $A \equiv \Pi_A$ y $B \equiv \Pi_B$. Así, tenemos que la función de cuasi-probabilidad resulta:

$$q(A, B) = \Re(\text{tr}[\Pi_A \Pi_B \rho]) \quad (\text{E.26})$$

Vemos que en el caso donde se cumple la regla de commutación $[\Pi_A, \Pi_B] = 0$ tenemos que ambos proyectores comparten una misma base de autoestados que los diagonaliza, por lo que el producto $\Pi_A \Pi_B = \Pi_B \delta_{AB}$. Esto deja que la expresión (E.26) resulte:

$$q(A, B) = \Re(\text{tr}[\Pi_B \delta_{AB} \rho]) = \Re(\text{tr}[\Pi_B \rho]) \delta_{AB} \quad (\text{E.27})$$

$$= \text{tr}[\Pi_B \rho] \delta_{AB} \geq 0 \quad (\text{E.28})$$

llegando a la regla de Born, cuyo resultado es real y positivo por tratarse de una probabilidad; el resultado será nulo en el caso donde $\Pi_A \neq \Pi_B$.

En cambio, si partiendo de la expresión (E.26) nos encontramos en el caso donde se cumple la regla de commutación $[\Pi_B, \rho] = 0$ entonces se tiene que $\Pi_B \rho = p \Pi_B$, siendo $p \in [0, 1]$ al tratarse de una probabilidad. Esto deja a que:

$$q(A, B) = p \Re(\text{tr}[\Pi_A \Pi_B]) = p \text{tr}[\Pi_A \Pi_B] \geq 0 \quad (\text{E.29})$$

siendo también positivo. Este último resultado puede demostrarse de la siguiente forma: como la traza no depende de la base elegida, y Π_A, Π_B se tratan de proyectores de rango uno, entonces podemos expresarlos en la base que diagonaliza a uno de ellos, por ejemplo, la de Π_A . Esto hace que Π_A pueda ser interpretado como un estado puro, dando que $\text{tr}[\Pi_A \Pi_B]$ sea análogo a realizar la regla de Born. En el caso donde se cumple $[\Pi_A, \rho] = 0$, se llega al mismo resultado.

Como conclusión, podemos ver que si A, B son eventos correspondientes a proyectores de rango uno y se cumple alguna regla de commutación entre A, B, ρ que sea nula, entonces la función de dos eventos $q(A, B) \geq 0$; es decir, puede ser tratada como una probabilidad.

Para ver cómo generalizar esto, pasaremos al caso donde tenemos tres eventos A, B, C , siendo C también un proyector de rango uno tal que $C \equiv \Pi_C$. A partir de la expresión (E.23), la función $q(A, B, C)$ resulta:

$$q(A, B, C) = \Re(\text{tr}[\Pi_A \Pi_B \Pi_C \rho]) \quad (\text{E.30})$$

Si queremos lograr que sea positiva, basta con que se cumplan las relaciones de commutación $[\Pi_A, \Pi_B] = 0$ y $[\Pi_B, \Pi_C] = 0$. Esto deja que $\Pi_A \Pi_B = \Pi_B \delta_{AB}$ y $\Pi_B \Pi_C = \Pi_C \delta_{BC}$, decantando en que la expresión

(E.30) sea:

$$q(A, B, C) = \Re(\text{tr}[\Pi_C \rho]) \delta_{AB} \delta_{BC} \quad (\text{E.31})$$

$$= \text{tr}[\Pi_C \rho] \delta_{AB} \delta_{BC} \geq 0 \quad (\text{E.32})$$

consiguiendo, nuevamente, la regla de Born. Cabe aclarar que la positividad para la función $q(A, B, C)$ también puede conseguirse en el caso que se cumplen las relaciones de conmutación $[\Pi_A, \rho] = 0$ y $[\Pi_C, \rho] = 0$; en particular, obtendremos la positividad siempre y cuando se den relaciones de conmutación nulas suficientes para que el argumento de la traza pueda ser reducido al producto de únicamente dos operadores (ya sean dos proyectores o un proyector con el estado ρ). Puede verse que si solamente conociésemos las relaciones $[\Pi_A, \Pi_C] = 0$ y $[\Pi_B, \rho] = 0$ no podríamos afirmar que esta función $q(A, B, C)$ es definida positiva. Sin embargo, una tercera relación distinta bastaría para afirmar su no-negatividad.

Con estos ejemplos, queda claro que no hay un número exacto de relaciones $[\cdot, \cdot] = 0$ distintas, entre los eventos $y \rho$, para que una función de cuasi-probabilidad pueda ser tratada como una función de probabilidad. No obstante, existe un número **mínimo** de relaciones de conmutación diferentes para que esto pueda llegar a pasar. Un caso particular de ello ocurre cuando estas relaciones son entre **operadores contiguos**: si la distribución de cuasi-probabilidad es la correspondiente a N eventos, entonces es necesario $(N - 1)$ relaciones de conmutación distintas entre operadores contiguos para que se trate de una función de probabilidad [54]. Esto lo pudimos verificar en los casos donde $N = 2$ y $N = 3$.

Para ver este argumento en acción, analicemos el caso donde tenemos cuatro eventos $X = A, B, C, D$, donde a todos ellos les corresponde su respectivo proyector de rango uno $X \equiv \Pi_X$. Así, la distribución de cuasi-probabilidad resulta:

$$q(A, B, C, D) = \Re(\text{tr}[\Pi_A \Pi_B \Pi_C \Pi_D \rho]) \quad (\text{E.33})$$

Para que esta distribución se trate de una probabilidad, basta con un número mínimo de tres relaciones de conmutación de operadores contiguos, por ejemplo: $[\Pi_B, \Pi_C] = 0$, $[\Pi_C, \Pi_D] = 0$ y $[\Pi_D, \rho] = 0$. Esto implica que $\Pi_B \Pi_C = \Pi_C \delta_{BC}$, $\Pi_C \Pi_D = \Pi_D \delta_{CD}$ Y $\Pi_D \rho = p \Pi_D$, con $p \in [0, 1]$. Por lo tanto, (E.33) resulta:

$$q(A, B, C, D) = p \Re(\text{tr}[\Pi_A \Pi_B \Pi_C \Pi_D]) \quad (\text{E.34})$$

$$= p \Re(\text{tr}[\Pi_A \Pi_D]) \delta_{BC} \delta_{CD} \quad (\text{E.35})$$

$$= p \text{tr}[\Pi_A \Pi_D] \delta_{BC} \delta_{CD} \geq 0 \quad \checkmark \quad (\text{E.36})$$

Otro caso particular que es interesante analizar es donde el estado ρ presenta coherencias en la base de autoestados de todos los eventos. Es decir, $[\rho, \Pi_X] \neq 0$ siendo $X = A, B, C, \dots$ los N eventos involucrados en la distribución de cuasi-probabilidad $q(A, B, C, \dots)$. Gracias a los resultados obtenidos de esta sección, sabemos que necesitamos como condición suficiente $(N - 1)$ de relaciones de conmutación $[\cdot, \cdot] = 0$ entre eventos contiguos para probar que se trata de una distribución de probabilidad. Es decir:

$$[\Pi_A, \Pi_B] = 0 \quad , \quad [\Pi_B, \Pi_C] = 0 \quad , \quad \dots \quad (\text{E.37})$$

Esto es equivalente a que todos los eventos deben conmutar entre sí. Como corolario, si solo dispo-

nemos de $(N - 2)$ relaciones de conmutación distintas $[\cdot, \cdot] = 0$ entre eventos contiguos y observamos negatividades en la distribución $q(A, B, C \dots)$, entonces **dichas negatividades son consecuencia directa de los términos de coherencia presentes en el estado ρ respecto a las bases que diagonalizan a, al menos, dos de los eventos involucrados**. Esto nos lleva a concluir que **existe una relación intrínseca entre la aparición de valores negativos en las distribuciones de cuasi-probabilidad y las coherencias presentes en el estado cuántico ρ** .

Apéndice F

Reconstrucción de la estadística “q-class” de trabajo

El protocolo que desarrollaremos para la construcción de la distribución “ q -class” fue propuesto en [32], el cual tiene muchas semejanzas con el protocolo SM definido en la Sección 2.2.2. Esta idea también se basa en el acople de un sistema auxiliar \mathcal{A} (o *ancilla*) al sistema de interés \mathcal{S} , donde se hace interactuar a ambos entre sí (entrelazamiento) al principio y al final de la evolución. De esta manera, se logra que la información sobre la energía del sistema \mathcal{S} quede almacenada como una fase en el sistema auxiliar, para luego medir proyectivamente sobre la *ancilla*.

En primer lugar, procederemos a describir la dinámica: consideremos que \mathcal{S} es un sistema cuántico gobernado por un Hamiltoniano $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(\lambda(t))$. El Hamiltoniano depende del tiempo a través del *protocolo* $\lambda \equiv \lambda(t)$ que realiza trabajo sobre el sistema \mathcal{S} y que suponemos que podemos controlar externamente. Inicialmente, a $t = 0$, el sistema \mathcal{S} se encuentra en un estado descrito por $\rho_{\mathcal{S}}$. Luego, se realiza trabajo variando el parámetro λ desde un valor inicial $\lambda(0)$ hasta alcanzar un valor $\lambda(T)$ a un tiempo final $t = T$. Más allá de la dependencia de λ , diremos que el sistema está aislado, por lo que evoluciona unitariamente según $\mathcal{U}(t, t_0)$ (con t_0 un tiempo fijo) que cumple la ecuación diferencial con el Hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (\text{F.1})$$

Además, con el propósito de simplificar la notación, llamaremos $H \equiv \mathcal{H}(\lambda(0))$, $\tilde{H} \equiv \mathcal{H}(\lambda(t))$ y $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(T, 0)$.

Una vez hecho esto, queremos dar una descripción del sistema auxiliar que emplearemos. Supondremos el caso donde \mathcal{A} tiene dos grados de libertad continuos \mathcal{W}, \mathcal{T} (los cuales son observables). Definimos \mathcal{W} tal que w son sus autovalores y $|w\rangle$ sus respectivos autoestados. Además, diremos que \mathcal{T} es el generador de las traslaciones en la base $\{|w\rangle\}$. Definiendo $\{\tau\}$ y $\{|\tau\rangle\}$ a los autovalores y autoestados de \mathcal{T} , respectivamente, se tiene que \mathcal{W} es el generador de traslaciones en la base $|\tau\rangle$. Entonces, se satisface la relación de commutación canónica $[\mathcal{W}, \mathcal{T}] = i\hbar$.

Entrando en el detalle de este protocolo, se busca la aplicación de una secuencia de operadores, sobre el sistema global $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$, de la forma: $\mathcal{U}_1, (\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}), \mathcal{U}_2$ (y finalmente medir sobre \mathcal{A}), donde definimos $\mathbb{I}_{\mathcal{A}}$ al operador identidad en el espacio de la *ancilla* y a los operadores $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2$ como las interacciones que se realizan antes y después de la evolución, respectivamente. Para encontrar estos operadores, recordemos que el teorema de Neumark (ver Apéndice D) nos condiciona la expresión que deben tener $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2$ para

entrelazar los sistemas \mathcal{A}, \mathcal{S} . En este caso, se elegirán operadores muy similares a los utilizados en el desarrollo del protocolo SM, los cuales definiremos como:

$$\mathcal{U}_1 \equiv e^{-iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} \quad , \quad \mathcal{U}_2 \equiv e^{i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar} \quad (\text{F.2})$$

Sin más que decir, procederemos a enumerar los pasos a seguir para este protocolo particular:

1°. El estado auxiliar \mathcal{A} inicia en el estado $\rho_{\mathcal{A}}$. Por lo cual, el estado global queda definido como:

$$\rho_{\mathcal{S}} \otimes \rho_{\mathcal{A}} \quad (\text{F.3})$$

2°. Se realiza una primera interacción sobre el estado $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ con un operador unitario $\mathcal{U}_1 = e^{-iH \otimes \mathcal{T}/\hbar}$, donde esta interacción no es más que una traslación en la variable w sobre la *ancilla* \mathcal{A} , condicionada por el valor de energía inicial de \mathcal{S} . Aquí, la interacción entrelaza al sistema \mathcal{S} y a la *ancilla* \mathcal{A} :

$$e^{-iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\rho_{\mathcal{S}} \otimes \rho_{\mathcal{A}}) e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} \quad (\text{F.4})$$

3°. Aplicamos una evolución unitaria \mathcal{U} que hace trabajo sobre \mathcal{S} :

$$(\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) e^{-iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\rho_{\mathcal{S}} \otimes \rho_{\mathcal{A}}) e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\mathcal{U}^{\dagger} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) \quad (\text{F.5})$$

4°. Se realiza la segunda interacción sobre el estado $\mathcal{S} \otimes \mathcal{A}$ con un operador unitario $\mathcal{U}_2 = e^{i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar}$, donde esta interacción no es más que una traslación en la variable w sobre la *ancilla* \mathcal{A} , condicionada por el valor de energía final de \mathcal{S} :

$$e^{i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) e^{-iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\rho_{\mathcal{S}} \otimes \rho_{\mathcal{A}}) e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\mathcal{U}^{\dagger} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) e^{-i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar} \quad (\text{F.6})$$

5°. El protocolo finaliza con una medición sobre el estado \mathcal{A} . Por lo tanto, si llamamos $\tilde{\rho}_{\mathcal{A}}$ a la matriz densidad reducida de la *ancilla* al finalizar el protocolo, al tomar traza parcial sobre el sistema \mathcal{S} nos queda:

$$\tilde{\rho}_{\mathcal{A}} = \text{tr}_{\mathcal{S}} \left[e^{i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) e^{-iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\rho_{\mathcal{S}} \otimes \rho_{\mathcal{A}}) e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\mathcal{U}^{\dagger} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) e^{-i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar} \right] \quad (\text{F.7})$$

Hasta el momento, pareciese que no hay una diferencia significativa con el protocolo SM ya definido en el capítulo anterior. Sin embargo, donde encontramos discrepancias es en la magnitud que decidimos medir sobre el sistema auxiliar. Aquí, buscamos el elemento $\langle \tau | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | \tau' \rangle$. Con ello, obtenemos:

$$\langle \tau | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | \tau' \rangle = \text{tr}_{\mathcal{S}} \left[\langle \tau | e^{i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\mathcal{U} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) e^{-iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\rho_{\mathcal{S}} \otimes \rho_{\mathcal{A}}) e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\mathcal{U}^{\dagger} \otimes \mathbb{I}_{\mathcal{A}}) e^{-i\tilde{H} \otimes \mathcal{T}/\hbar} | \tau' \rangle \right] \quad (\text{F.8})$$

$$= \text{tr}_{\mathcal{S}} \left[e^{i\tilde{H}\tau/\hbar} \mathcal{U} \langle \tau | e^{-iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} (\rho_{\mathcal{S}} \otimes \rho_{\mathcal{A}}) e^{iH \otimes \mathcal{T}/\hbar} | \tau' \rangle \mathcal{U}^{\dagger} e^{-i\tilde{H}\tau'/\hbar} \right] \quad (\text{F.9})$$

$$= \text{tr}_{\mathcal{S}} \left[e^{i\tilde{H}\tau/\hbar} \mathcal{U} e^{-iH\tau/\hbar} \langle \tau | (\rho_{\mathcal{S}} \otimes \rho_{\mathcal{A}}) | \tau' \rangle e^{iH\tau'/\hbar} \mathcal{U}^{\dagger} e^{-i\tilde{H}\tau'/\hbar} \right] \quad (\text{F.10})$$

$$= \text{tr} \left[e^{i\tilde{H}\tau/\hbar} \mathcal{U} e^{-iH\tau/\hbar} \rho_{\mathcal{S}} e^{iH\tau'/\hbar} \mathcal{U}^{\dagger} e^{-i\tilde{H}\tau'/\hbar} \right] \langle \tau | \rho_{\mathcal{A}} | \tau' \rangle \quad (\text{F.11})$$

por lo que llegamos a:

$$\frac{\langle \tau | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | \tau' \rangle}{\langle \tau | \rho_{\mathcal{A}} | \tau' \rangle} = \text{tr} \left[e^{i\tilde{H}\tau/\hbar} \mathcal{U} e^{-iH\tau/\hbar} \rho_{\mathcal{S}} e^{iH\tau'/\hbar} \mathcal{U}^\dagger e^{-i\tilde{H}\tau'/\hbar} \right] \quad (\text{F.12})$$

$$= \text{tr} \left[\mathcal{U}^\dagger e^{i\tilde{H}(\tau-\tau')/\hbar} \mathcal{U} e^{-iH\tau/\hbar} \rho_{\mathcal{S}} e^{iH\tau'/\hbar} \right] \quad (\text{F.13})$$

$$= \text{tr} \left[e^{i\tilde{H}^{(H)}(\tau-\tau')/\hbar} e^{-iH\tau/\hbar} \rho_{\mathcal{S}} e^{iH\tau'/\hbar} \right] \quad (\text{F.14})$$

Realizando un cambio de variable $\tau = \hbar u q$ y $\tau' = \hbar u(q-1)$, tenemos:

$$\frac{\langle uq | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | u(q-1) \rangle}{\langle uq | \rho_{\mathcal{A}} | u(q-1) \rangle} = \text{tr} \left[e^{iu\tilde{H}^{(H)}} e^{-iuqH} \rho_{\mathcal{S}} e^{-iu(1-q)H} \right] \quad (\text{F.15})$$

que resulta ser el primer término de la expresión (3.49), el cual se encuentra relacionado con la función característica $\zeta_q(u)$ de la distribución “ q -class”. Si se hubiese hecho, en su lugar, el cambio de variable $\tau = \hbar u(1-q)$ y $\tau' = -\hbar uq$, entonces hubiésemos obtenido:

$$\frac{\langle u(1-q) | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | -uq \rangle}{\langle u(1-q) | \rho_{\mathcal{A}} | -uq \rangle} = \text{tr} \left[e^{iu\tilde{H}^{(H)}} e^{-iu(1-q)H} \rho_{\mathcal{S}} e^{-iuqH} \right] \quad (\text{F.16})$$

que representa el segundo término de la expresión (3.49). Por lo tanto, $\zeta_q(u)$ puede reescribirse como:

$$\boxed{\zeta_q(u) = \frac{1}{2} \left[\frac{\langle uq | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | u(q-1) \rangle}{\langle uq | \rho_{\mathcal{A}} | u(q-1) \rangle} + \frac{\langle u(1-q) | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | -uq \rangle}{\langle u(1-q) | \rho_{\mathcal{A}} | -uq \rangle} \right]} \quad (\text{F.17})$$

Este último resultado para $\zeta_q(u)$ es muy importante, ya que en base a la estadística que se obtenga del sistema auxiliar antes y luego de la evolución, midiendo en las fases pertinentes, podremos reconstruir la función característica y, con ello, saber los diferentes momentos de la distribución “ q -class” mediante la expresión (3.50). En particular, solo se requiere el primer momento si nuestro interés es la variación de energía media.

Para el caso de la distribución MHQ ($q = 0$), a partir de la expresión (F.17) tenemos que:

$$\boxed{\zeta_{\text{MH}}(u) = \frac{1}{2} \left[\frac{\langle 0 | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | -u \rangle}{\langle 0 | \rho_{\mathcal{A}} | -u \rangle} + \frac{\langle u | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | 0 \rangle}{\langle u | \rho_{\mathcal{A}} | 0 \rangle} \right]} \quad (\text{F.18})$$

representando la distribución estadística de Margenau-Hill, también denominada como **distribución MHS** (del inglés: “Margenau-Hill Statistics”). Por otro lado, para el caso de la distribución FCQ ($q = 1/2$), de la expresión (F.17) obtenemos:

$$\boxed{\zeta_{\text{FC}}(u) = \frac{\langle u/2 | \tilde{\rho}_{\mathcal{A}} | -u/2 \rangle}{\langle u/2 | \rho_{\mathcal{A}} | -u/2 \rangle}} \quad (\text{F.19})$$

dando la distribución estadística de conteo completo, o simplemente **distribución FCS** (del inglés: “Full-Counting Statistics”) [58]. Es importante notar que la construcción estadística de la distribución FCQ es más sencilla debido a la necesidad de medir una única fase para $\tilde{\rho}_{\mathcal{A}}$ y $\rho_{\mathcal{A}}$, por lo que resulta de mayor utilidad.

Este protocolo puede derivarse formalmente en base a una descripción mediante integrales de camino, añadiendo una restricción a los caminos admisibles [59–61]. En general, el trabajo realizado en un

sistema abierto depende de la evolución completa del sistema y no solo de su estado inicial y final; dado que las *trayectorias cuánticas* (caminos) juegan un papel clave en la determinación de los intercambios de energía y la disipación, resulta natural abordar el problema de la medición del trabajo utilizando un enfoque de integrales de caminos [62]. También puede extenderse este protocolo para la medición del trabajo disipado en sistemas cuánticos abiertos, accediendo solo a los grados de libertad del sistema [32].

Apéndice G

Función de no-clasicalidad

Puede definirse una forma de medir la no-clasicalidad que presenta la distribución KDQ [32]. Para ello, tenemos la **función de no-clasicalidad** $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)]$ que está dada por:

$$\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] \equiv -1 + \sum_{n,m} |\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}| \quad (\text{G.1})$$

donde recordamos que $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} \equiv \text{tr}[\tilde{\Pi}_m^{(H)} \Pi_n \rho]$. Esta función cumple con las siguientes propiedades, las cuales demostraremos:

P1. **Se tiene que** $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] = 0 \iff \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$ **es una distribución de probabilidad conjunta.**

Demostración:

$\Rightarrow)$ Se tiene que $\sum_{n,m} |\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}| = 1$, pero también debe cumplirse (por propiedad de $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$) que $\sum_{n,m} \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} = 1$, y esto únicamente se logra cuando $|\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}| = \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} \geq 0$, que resulta ser la definición de una distribución de probabilidad.

$\Leftarrow)$ Al ser $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$ una distribución de probabilidad, entonces $|\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}| = \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} \geq 0$. Luego, como $\sum_{n,m} |\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}| = \sum_{n,m} \tilde{q}_{nm}^{\text{KD}} = 1$ entonces se cumple $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] = 0$. \square

P2. **Se tiene que** $\mathbb{N}[p \tilde{q}_1(\rho) + (1 - p) \tilde{q}_2(\rho)] \leq p \mathbb{N}[\tilde{q}_1(\rho)] + (1 - p) \mathbb{N}[\tilde{q}_2(\rho)]$ **con** $p \in [0, 1]$, siendo $\tilde{q}_1(\rho), \tilde{q}_2(\rho)$ dos distribuciones KDQ distintas.

Demostración:

Utilizando propiedades del módulo:

$$\mathbb{N}[p \tilde{q}_1(\rho) + (1 - p) \tilde{q}_2(\rho)] = -1 + \sum_{n,m} |p \tilde{q}_{1nm}^{\text{KD}} + (1 - p) \tilde{q}_{2nm}^{\text{KD}}| \quad (\text{G.2})$$

$$\leq -1 + p \sum_{n,m} |\tilde{q}_{1nm}^{\text{KD}}| + (1 - p) \sum_{n,m} |\tilde{q}_{2nm}^{\text{KD}}| \quad (\text{G.3})$$

$$= p \left(-1 + \sum_{n,m} |\tilde{q}_{1nm}^{\text{KD}}| \right) + (1 - p) \left(-1 + \sum_{n,m} |\tilde{q}_{2nm}^{\text{KD}}| \right) \quad (\text{G.4})$$

$$= p \mathbb{N}[\tilde{q}_1(\rho)] + (1 - p) \mathbb{N}[\tilde{q}_2(\rho)] \quad \square \quad (\text{G.5})$$

P3. **Si** $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] > 0$ **entonces existe al menos una elección en los índices** n, m **para los cuales** $\Pi_n, \tilde{\Pi}_m^{(H)}$ **y** ρ **no comutan entre sí.**

Demostración:

Esto puede demostrarse por la contraria. Supongamos que $\forall n, m$ al menos dos de los operadores entre $\Pi_n, \tilde{\Pi}_m^{(H)}$ y ρ conmutan entre sí. Esto repercuten en que $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$ pueda tratarse como una distribución de probabilidad, dando que $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] = 0$ debido a la propiedad (P1). Por lo tanto, si se presenta que $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] > 0$ entonces $\tilde{q}_{nm}^{\text{KD}}$ toma valores de no-clasicalidad, conllevando a que debe existir al menos una elección en los índices n, m para los cuales $\Pi_n, \tilde{\Pi}_m^{(H)}$ y ρ no conmutan entre sí. \square

P4. Consideraremos la dinámica de decoherencia, definida como $\mathcal{D}_s \equiv (1 - s)\mathbb{I} + s\mathcal{D}$ donde $s \in [0, 1]$ y el operador \mathcal{D} es aquel que elimina del estado ρ los elementos por fuera de la diagonal (coherencias) respecto a la base $\{\Pi_n\}$. Entonces: $\mathbb{N}[\tilde{q}(\mathcal{D}_s(\rho))] \leq \mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)]$.

Demostración:

Utilizando la propiedad (P2):

$$\mathbb{N}[\tilde{q}(\mathcal{D}_s(\rho))] = \mathbb{N}[(1 - s)\tilde{q}(\rho) + s\tilde{q}(\mathcal{D}(\rho))] \quad (\text{G.6})$$

$$\leq (1 - s)\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] + s\mathbb{N}[\tilde{q}(\mathcal{D}(\rho))] \quad (\text{G.7})$$

pero tenemos que $\mathcal{D}(\rho)$ conmuta con el proyector Π_n , logrando que $\tilde{q}(\mathcal{D}(\rho))$ se comporte como una distribución de probabilidad (en particular, resulta ser la distribución del protocolo TPM), por lo que, debido a la propiedad (P1), $\mathbb{N}[\tilde{q}(\mathcal{D}(\rho))] = 0$. Entonces:

$$\mathbb{N}[\tilde{q}(\mathcal{D}_s(\rho))] \leq (1 - s)\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] \leq \mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)] \quad (\text{G.8})$$

ya que $s \in [0, 1]$. \square

Este análisis hecho para la función $\mathbb{N}[\tilde{q}(\rho)]$ revela que es una herramienta útil para detectar comportamientos no-clásicos en sistemas cuánticos. También puede utilizársela en la distribución MHQ; las propiedades desarrolladas no cambiarían en este caso y la única diferencia estaría en que deja de tomar valores por fuera de los reales, representando los comportamientos no-clásicos como negatividades en la distribución. Como comentario adicional, si bien la propiedad (P3) permite deducir que la no-conmutatividad entre los operadores $\Pi_n, \tilde{\Pi}_m^{(H)}$ y ρ es una condición necesaria para la aparición de valores de no-clasicalidad, se ha demostrado recientemente que no es una condición suficiente en las distribuciones KDQ y MHQ [70].

Bibliografía

- [1] C. Jarzynski, *Equalities and Inequalities: Irreversibility and the Second Law of Thermodynamics at the Nanoscale*, *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 2, pp. 329-351, 2011.
- [2] F. L. Curzon y B. Ahlborn, *Efficiency of a Carnot engine at maximum power output*, *American Journal of Physics*, vol. 43, pp. 22-24, 1975.
- [3] U. Seifert, *Stochastic thermodynamics: principles and perspectives*, *The European Physical Journal B*, vol. 64, pp. 423-431, 2008.
- [4] D. J. Evans, E. G. D. Cohen y G. P. Morriss, *Probability of second law violations in shearing steady states*, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, pp. 2401-2404, 1993.
- [5] D. J. Evans y D. J. Searles, *Equilibrium microstates which generate second law violating steady states*, *Phys. Rev. E*, vol. 50, pp. 1645-1648, 1994.
- [6] C. Jarzynski, *Nonequilibrium Equality for Free Energy Differences*, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, pp. 2690-2693, 1997.
- [7] G. E. Crooks, *Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences*, *Phys. Rev. E*, vol. 60, pp. 2721-2726, 1999.
- [8] C. Bustamante, Z. Bryant y S. B. Smith, *Ten years of tension: single-molecule DNA mechanics*, *Nature*, vol. 421, pp. 423-427, 2003.
- [9] W. A. Ducker, T. J. Senden y R. M. Pashley, *Direct measurement of colloidal forces using an atomic force microscope*, *Nature*, vol. 353, pp. 239-241, 1991.
- [10] K. Visscher, M. J. Schnitzer y S. M. Block, *Single kinesin molecules studied with a molecular force clamp*, *Nature*, vol. 400, pp. 184-189, 1999.
- [11] G. Hummer y A. Szabo, *Free energy reconstruction from nonequilibrium single-molecule pulling experiments*, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 98, pp. 3658-3661, 2001.
- [12] J. Liphardt, S. Dumont, S. B. Smith, I. Tinoco y C. Bustamante, *Equilibrium Information from Nonequilibrium Measurements in an Experimental Test of Jarzynski's Equality*, *Science*, vol. 296, pp. 1832-1835, 2002.
- [13] D. Collin, F. Ritort, C. Jarzynski, S. B. Smith, I. Tinoco y C. Bustamante, *Verification of the Crooks fluctuation theorem and recovery of RNA folding free energies*, *Nature*, vol. 437, pp. 231-234, 2005.

- [14] Felix Binder, Luis A. Correa, Christian Gogolin, Janet Anders, and, Gerardo Adesso, *Thermodynamics in the quantum regime*, *Fundamental Theories of Physics*, vol. 195, pp. 1-2, 2018.
- [15] A. E. Allahverdyan y T. M. Nieuwenhuizen, *Fluctuations of work from quantum subensembles: the case against quantum work-fluctuation theorems*, *Phys. Rev. E*, vol. 71, 066102, 2005.
- [16] P. Talkner y P. Hänggi, *The Tasaki–Crooks quantum fluctuation theorem*, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 40, pp. F569-F571, 2007.
- [17] P. Talkner, E. Lutz y P. Hänggi, *Fluctuation theorems: Work is not an observable*, *Phys. Rev. E*, vol. 75, 050102, 2007.
- [18] M. Campisi, P. Hänggi y P. Talkner, *Colloquium: Quantum fluctuation relations: Foundations and applications*, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 771-791, 2011.
- [19] G. Huber, F. Schmidt-Kaler, S. Deòner y E. Lutz, *Employing Trapped Cold Ions to Verify the Quantum Jarzynski Equality*, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, 070403, 2008.
- [20] G. Watanabe, B. P. Venkatesh, P. Talkner, M. Campisi y P. Hänggi, *Quantum fluctuation theorems and generalized measurements during the force protocol*, *Phys. Rev. E*, vol. 89, 032114, 2014.
- [21] L. Mazzola, G. De Chiara y M. Paternostro, *Measuring the Characteristic Function of the Work Distribution*, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, 230602, 2013.
- [22] R. Dorner, S. R. Clark, L. Heaney, R. Fazio, J. Goold y V. Vedral, *Extracting Quantum Work Statistics and Fluctuation theorems by Single-Qubit Interferometry*, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, 230601, 2013.
- [23] T. B. Batalhão, A. M. Souza, L. Mazzola, R. Auccaise, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira, J. Goold, G. De Chiara, M. Paternostro y R. M. Serra, *Experimental Reconstruction of Work Distribution and Study of Fluctuation Relations in a Closed Quantum System*, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, 140601, 2014.
- [24] S. An, J.-N. Zhang, M. Um, D. Lv, Y. Lu, J. Zhang, Z.-Q. Yin, H. T. Quan y K. Kim, *Experimental test of the quantum Jarzynski equality with a trapped-ion system*, *Nature Physics*, vol. 11, pp. 193-199, 2015.
- [25] E. Bäumer, M. Lostaglio, M. Perarnau-Llobet y R. Sampaio, *Fluctuating Work in Coherent Quantum Systems: Proposals and Limitations*, en *Thermodynamics in the Quantum Regime: Fundamental Aspects and New Directions*, editado por F. Binder, L. A. Correa, C. Gogolin, J. Anders y G. Adesso (Springer International Publishing, Cham), pp. 275-300, 2018.
- [26] M. Perarnau-Llobet, E. Bäumer, K. V. Hovhannisyan, M. Huber y A. Acin, *No-Go Theorem for the Characterization of Work Fluctuations in Coherent Quantum Systems*, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 118, 070601, 2017.
- [27] M. Lostaglio, *Quantum Fluctuation Theorems, Contextuality, and Work Quasiprobabilities*, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 120, 040602, 2018.

- [28] B.-M. Xu, J. Zou, L.-S. Guo y X.-M. Kong, *Effects of quantum coherence on work statistics*, *Phys. Rev. A*, vol. 97, 052122, 2018.
- [29] T. Sagawa, *Second law-like inequalities with quantum relative entropy: an introduction*, en *Lectures on Quantum Computing, Thermodynamics and Statistical Physics*, pp. 125-190.
- [30] R. Sampaio, S. Suomela, T. Ala-Nissila, J. Anders y T. G. Philbin, *Quantum work in the Bohmian framework*, *Phys. Rev. A*, vol. 97, 012131, 2018.
- [31] A. E. Allahverdyan, *Nonequilibrium quantum fluctuations of work*, *Phys. Rev. E*, vol. 90, 032137, 2014.
- [32] P. Solinas y S. Gasparinetti, *Full distribution of work done on a quantum system for arbitrary initial states*, *Phys. Rev. E*, vol. 92, 042150, 2015.
- [33] M. Lostaglio, A. Belenchia, A. Levy, S. Hernandez Gomez, N. Fabbri, and S. Gherardini, *Kirkwood-dirac quasiprobability approach to quantum fluctuations: Theoretical and experimental perspectives*, *ar-Xiv:2206.11783* (2022)
- [34] P. Solinas y S. Gasparinetti, *Probing quantum interference effects in the work distribution*, *Phys. Rev. A*, vol. 94, 052103, 2016.
- [35] H. M. Wiseman, *Weak values, quantum trajectories, and the cavity-QED experiment on wave-particle correlation*, *Phys. Rev. A*, vol. 65, 032111, 2002.
- [36] M. J. W. Hall, *Prior information: How to circumvent the standard joint-measurement uncertainty relation*, *Phys. Rev. A*, vol. 69, 052113, 2004.
- [37] H. J. D. Miller y J. Anders, *Time-reversal symmetric work distributions for closed quantum dynamics in the histories framework*, *New Journal of Physics*, vol. 19, 192001, 2007.
- [38] H. Weyl, «*Quantenmechanik und Gruppentheorie*», *Zeitschrift für Physik*, vol. 46, pp. 1-46, 1927.
- [39] E. Wigner, *On the Quantum Correction For hermodynamic Equilibrium*, *Phys. Rev.*, vol. 40, pp. 749-759, 1932.
- [40] H. Groenewold, *On the principles of elementary quantum mechanics*, *Physica*, vol. 12, pp. 405-460, 1946.
- [41] J. E. Moyal, *Quantum mechanics as a statistical theory*, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 45, pp. 99-124, 1949.
- [42] F. Cerisola, F. Mayo, A. J. Roncaglia, *A Wigner Quasiprobability Distribution of Work*, *Entropy*, vol. 25, 1439, 2023.
- [43] A. J. Roncaglia, F. Cerisola y J. P. Paz, *Work Measurement as a Generalized Quantum Measurement*, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, 250601, 2014.
- [44] H. Tasaki, *Jarzynski Relations for Quantum Systems and Some Applications*. *Preprint* <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0009244> (2000)

- [45] M. V. Berry, *Transitionless quantum driving*. *J. Phys. A: Math. Theor.*, Vol. 42, 365303, 2009
- [46] D. Guéry-Odelin, *Shortcuts to adiabaticity: Concepts, methods, and applications*. *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 91, 045001, 2019
- [47] G. N. Bochkov y Y. E. Kuzovlev, *General theory of thermal fluctuations in nonlinear systems*, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, vol. 72, pp. 238-247, 1977.
- [48] J. Kurchan, *A Quantum Fluctuation Theorem*. *Preprint* <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0007360> (2001)
- [49] J. L. W. V. Jensen, *SUR LES FONCTIONS CONVEXES ET LES INÉGALITÉS ENTRE LES VALEURS MOYENNES*. *Acta Math.*, Vol. 30, pp. 175-193, 1906
- [50] Born, M., Fock, V., *Beweis des Adiabatensatzes*. *Z. Physik*, Vol. 51, p. 165-180, 1928
- [51] M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, (Cambridge University Press, 1968)
- [52] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods*. *FTPH*, Vol. 57, (Springer 1993)
- [53] S. Machluf, Y. Japha y R. Folman, *Coherent Stern–Gerlach momentum splitting on an atom chip*, *Nat Commun*, Vol. 4, 2424, 2013
- [54] Gianluca Francica, *Most general class of quasiprobability distributions of work*, *Phys. Rev. E*, Vol. 106, 054129, 2022
- [55] P. Busch, *Quantum states and generalized observables: a simple proof of Gleason’s theorem*, *Phys. Rev. Lett*, Vol. 91, 120403, 2003
- [56] Andrew Gleason, *Measures on the Closed Subspaces of a Hilbert Space*, *Indiana Univ. Math. J.*, Vol. 6, pp. 885–893, 1957
- [57] Gianluca Francica, *Class of quasiprobability distributions of work with initial quantum coherence*, *Phys. Rev. E*, Vol. 105, 014101, 2022
- [58] Yu V. Nazarov and M. Kindermann, *Full counting statistics of a general quantum mechanical variable*, *The European Physical Journal B, Condensed Matter and Complex Systems*, Vol. 35, 413 (2003)
- [59] D. Sokolovski and R. S. Mayato, *Path summation and von Neumann–like quantum measurements*, *Phys. Rev. A*, Vol. 71, 042101, 2005
- [60] D. Sokolovski and R. S. Mayato, *Simultaneous histories, path sums, and measurements for non-commuting variables*, *Phys. Rev. A*, Vol. 73, 052115, 2006
- [61] D. Sokolovski, *Path integral approach to space-time probabilities: A theory without pitfalls but with strict rules*, *Phys. Rev. D*, Vol. 87, 076001, 2013
- [62] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, (McGraw-Hill, New York, 1965).

- [63] John G. Kirkwood, *Quantum Statistics of Almost Classical Assemblies*, *Phys. Rev.*, Vol. 44, 31, 1933
- [64] P. A. M. Dirac, *On the Analogy Between Classical and Quantum Mechanics*, *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 17, 195, 1945
- [65] A. O. Barut, *Distribution Functions for Noncommuting Operators*, *Phys. Rev.*, Vol. 108, 565, 1957
- [66] Henry Margenau and Robert Nyden Hill, *Correlation between Measurements in Quantum Theory*, *Progress of Theoretical Physics*, Vol. 26, 5, pp. 722-738, 1961
- [67] Sheldon Goldstein and Don N. Page, *Linearly Positive Histories: Probabilities for a Robust Family of Sequences of Quantum Events*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 74, 3715, 1995
- [68] Lajos Diósi, *Anomalies of Weakened Decoherence Criteria for Quantum Histories*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 92, 170401, 2004
- [69] James B. Hartle, *Linear positivity and virtual probability*, *Phys. Rev. A*, Vol. 70, 022104, 2004
- [70] David R M Arvidsson-Shukur, Jacob Chevalier Drori and Nicole Yunger Halpern, *Conditions tighter than noncommutation needed for nonclassicality*, *J. Phys. A: Math. Theor.*, Vol. 54, 284001, 2021
- [71] M. Hillery, R. O'Connell, M. Scully and E. Wigner, *Distribution functions in physics: Fundamentals*, *Physics Reports*, Vol. 106, pp. 121-167, 1984
- [72] Stefano Gherardini and Gabriele De Chiara, *Quasiprobabilities in Quantum Thermodynamics and Many-Body Systems*, *PRX Quantum*, Vol. 5, 030201, 2024.

Tesis disponible bajo Licencia: Creative Commons
Atribución - No Comercial - Compartir Igual (by-nc-sa) 2.5
Argentina
Buenos Aires, 2025