

Tesis de Posgrado

Principio de máxima entropía y sistemas dinámicos

Aliaga, Jorge Luis

1988

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Aliaga, Jorge Luis. (1988). Principio de máxima entropía y sistemas dinámicos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2151_Aliaga.pdf

Cita tipo Chicago:

Aliaga, Jorge Luis. "Principio de máxima entropía y sistemas dinámicos". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1988.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2151_Aliaga.pdf

EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Tema de Tesis

PRINCIPIO DE MAXIMA ENTROPIA Y SISTEMAS DINAMICOS

Autor

Jorge Luis Aliaga

Director de Tesis

Dra. Araceli Noemí Proto

Lugar de Trabajo

Departamento de Ciencias Básicas - Universidad Nacional de Luján

Tesis presentada para optar al título de Doctor en Ciencias Físicas

1988

A Verónica

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer en forma muy especial a la Dra. Araceli Noemí Proto, Directora de esta tesis. Durante los años que trabajé a su lado siempre me dispensó su atención como profesional y su interés como ser humano, haciendo que este trabajo se pudiera desarrollar en un clima de gran cordialidad y amistad.

Al Dr. Dino Otero, no solo por el importante aporte científico que significó para mí el haber trabajado juntos, sino también por su interés en la persona que hay detrás de un tesista; al Dr. A. Plastino por el aporte que significa trabajar a su lado.

Al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), que mediante el otorgamiento de las becas de Iniciación y Perfeccionamiento posibilitó la realización de este trabajo de tesis, y a las autoridades de la Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires y la Universidad Nacional de Luján, por haberme dado el lugar de trabajo.

A los compañeros del grupo de trabajo, por su apoyo y por el aporte que hacen para que trabajemos todos en un clima de camaradería; a las autoridades de la Comisión Nacional de Investigaciones Espaciales, por las facilidades de computo que me ofreció en el último año y al Departamento de Física de la Comisión Nacional de Energía Atómica, porque estimula a bregar por la libertad académica y la democratización de la ciencia.

Al Prof. Abdus Salam, Director del Centro Internacional de Física Teórica (ICTP), por haberme otorgado una beca para viajar a la Universidad Estadual de Campinas, Brasil; a las autoridades de dicha universidad por la cordialidad con que me recibieron y muy especialmente a la Dra. Hilda Cerdeira por el aporte científico y humano realizado en esas seis semanas.

Por último a mi esposa, Verónica, a quien dedico esta tesis, porque soportó como nadie las presiones de ser tesista y convivir con un tesista.

Buenos Aires, 1988.

I	Introducción	1
II	Mecánica estadística, mecánica cuántica y teoría de la información.....	4
II.1	Mecánica estadística y Mecánica cuántica.....	4
II.2	Teoría de la información y Principio de Máxima Entropía.....	6
II.3	Evolución temporal de valores medios y multiplicadores de Lagrange	8
II.4	Formulación covariante de la teoría de la información	11
II.5	Coefficientes de correlación.....	14
III	Constantes de movimiento y estados accesibles.....	18
III.1	Invariantes dinámicos.....	18
III.2	Entropía, invariantes y estados accesibles.....	20
III.3	Ejemplos.....	23
III.3.a	Anomalía Schottky.....	23
III.3.b	Efecto Zeeman.....	27
IV	Matriz densidad para operadores no-ligados.....	34
IV.1	Definición de traza para operadores no-ligados.....	34
IV.2	Aproximación para operadores no-ligados	35
IV.3	Efectos de borde dependientes del tiempo.....	39
IV.4	Cálculo de los multiplicadores de Lagrange.....	46
IV.5	Propiedades termodinámicas.....	58
IV.6	Efectos del proceso de proyección	64
V	Termodinámica cuántica y teoría de la información.....	74
V.1	Termodinámica cuántica	74
V.2	Procesos canónicos	76
V.3	Procesos termodinámicos	78
V.4	Ejemplos.....	84
V.4.a	Efecto Zeeman dependiente del tiempo	84
V.4.b	Efecto Zeeman independiente del tiempo.....	90
V.4.c	Aproximación para espacios de Hilbert infinitos	97
VI	Evoluciones dinámicas disipativas y condiciones iniciales.....	110

VI.1	Sistemas dinámicos disipativos.....	110
VI.2	Influencia de las condiciones iniciales y la matriz \mathbf{G} en las evoluciones disipativas.....	111
VI.3	Evoluciones temporales disipativas para el modelo de dos osciladores acoplados	113
VI.4	Determinación de un conjunto coherente de condiciones iniciales.	119
VII	Modelo para la corriente superconductora en una juntura Josephson.....	123
VII.1	Introducción al efecto Josephson.....	123
VII.2	El modelo.....	127
VII.3	La función de partición.	132
VII.4	Invariantes dinámicos de una juntura Josephson. Modelo de pseudo-momento angular.	137
VII.5	Corriente por efecto tunel de ac y dc.	140
	VII.5.a Límite de juntura sin polarización	
	corriente por efecto tunel de dc.....	140
	VII.5.b Límite de juntura con polarización	
	corriente por efecto tunel de ac.....	142
	VII.5.c Definición apropiada del desbalance de carga.....	143
VIII	Conclusiones	145
VIII.1	Constantes de movimiento y estados accesibles	145
VIII.2	Definición de traza para operadores no-ligados.....	146
VIII.3	Termodinámica cuántica y teoría de la información	147
VIII.4	Evoluciones dinámicas y condiciones iniciales	148
VIII.5	Modelo para la corriente superconductora en una juntura Josephson	149
VIII.6	Conclusiones generales.....	150
	Referencias	154

I Introducción

La mecánica cuántica ha tenido un éxito tan importante en la solución de problemas físicos¹, que la mayoría de las formulaciones teóricas que se utilizan en la actualidad tratan de satisfacer sus postulados fundamentales. La teoría de la información no es una excepción. Fue formulada por C.E. Shannon² para ser aplicada al campo de las comunicaciones y extendida por J. Von Neumann³, a través de la matriz densidad, y fundamentalmente por E.T. Jaynes³, mediante el principio de máxima entropía, a la mecánica estadística. Los trabajos de R.D. Levine⁵ incorporaron la mecánica cuántica a la teoría de la información, ampliando por lo tanto los horizontes de esta formulación.

En la última década, D. Otero, A. Plastino y A.N. Proto utilizaron los resultados antes mencionados para conectar la teoría de la información y el principio de máxima entropía con el teorema de Ehrenfest⁶. Posteriormente, se formuló una teoría de respuesta lineal, un modelo para Hamiltonianos de fricción no-lineales y se desarrolló un formalismo que relaciona a la teoría de la información con los espacios de Riemann^{7,8}.

El presente trabajo, partiendo de esa base teórica, pretenderá ampliar el formalismo y aplicarlo a algún problema físico concreto. En el capítulo II se desarrollará un resumen de los conceptos fundamentales de mecánica estadística, mecánica cuántica y teoría de la información que se han mencionado previamente, y sobre los cuales se basarán los capítulos siguientes.

El capítulo III se dedicará al estudio de un método para el cálculo de invariantes de sistemas dinámicos, cuando se trabaja con operadores que en general no conmutan con el Hamiltoniano ("Constants of motion, accessible states, and information theory", J. Aliaga, D. Otero, A. Plastino, and A.N. Proto, Phys. Rev. A 35 (1987) 2304). Se desarrollará en serie el logaritmo de la matriz densidad, obteniendo que el invariante de orden cero es el número de estados accesibles del espacio de Hilbert, el de orden uno es la entropía y el de orden dos es, para un sistema canónico, el calor específico. El invariante de orden n resulta estar relacionado con las correlaciones cuánticas y estadísticas de orden n -ésimo entre los operadores. Se ejemplificarán los resultados aplicándolos a un sistema

canónico con niveles equiespaciados y al efecto Zeeman.

En el capítulo IV se estudiará un problema abierto en la mecánica estadística como es la imposibilidad de definir la operación de traza para el operador estadístico o matriz densidad en el caso de trabajar con operadores no-ligados ("Temporal evolution in an effective Hilbert subspace", J. Aliaga, M. Negri, D. Otero, A. Plastino, and A.N. Proto, Phys. Rev A 36 (1987) 3427). Dentro del contexto de la teoría de la información se propondrá un método que consiste en truncar el espacio de Hilbert (infinito) proyectándolo en un espacio finito. Se estudiarán los efectos de borde introducidos tanto en la relación entre multiplicadores de Lagrange y valores medios de operadores como en la evolución dinámica de los mismos. Se mostrará que fuera de las regiones afectadas por los efectos de borde la solución es correcta. La teoría será desarrollada en base al Hamiltoniano del oscilador armónico y como operadores no ligados se tomarán a \hat{q} y \hat{p} , que constituyen el caso en que típicamente se observan las dificultades para normalizar $\hat{\rho}$.

El capítulo V se dedicará a formular una teoría que extiende de manera natural la termodinámica clásica a sistemas cuánticos cuyos operadores relevantes son no-conmutantes ("Quantum thermodynamics and information theory", J. Aliaga, D. Otero, A. Plastino, and A.N. Proto, Phys. Rev. B 38 (1988)). Se definirán dos tipos de procesos: canónicos, en los que los valores medios de los operadores (variables extensivas) y los multiplicadores de Lagrange (variables intensivas) evolucionan según la dinámica Hamiltoniana; y termodinámicos, en los que estas variables se mantienen constantes por acción de un vínculo externo al sistema. Para ambos casos se calculará la entropía, la energía, se definirá la temperatura del sistema cuántico, y se evaluará el calor específico. Para los procesos termodinámicos se definirán las extensiones cuánticas de C_v y C_p . Se aplicará la teoría al efecto Zeeman dependiente e independiente del tiempo y al Hamiltoniano del oscilador armónico tratado en el capítulo anterior. Este último caso permitirá evaluar el proceso de proyección desarrollado en el capítulo IV ya que también se calculará la solución exacta del problema.

El capítulo VI estará destinado a considerar la posibilidad de describir sistemas dinámicos disipativos con el presente formalismo, es decir utilizando Hamiltonianos

lineales e independientes del tiempo ("Dissipative evolutions, initial conditions and information theory", A.N. Proto, J. Aliaga, D. Nápoli, D. Otero, and A. Plastino, enviado para la consideración del Phys. Rev. A). Se explicitará las condición necesaria que debe cumplir la matriz de la dinámica \mathcal{G} , definida a partir del cierre de una semi-álgebra de Lie, por conmutación, entre los operadores relevantes y el Hamiltoniano del sistema. Se mostrará que esa condición no es suficiente y se destacará el rol de las condiciones iniciales en el problema. Se demostrará, a través de un ejemplo conocido en la literatura como el oscilador dual de Batemann, que las condiciones iniciales no son independientes entre sí, ya que son los valores medios de operadores relacionados por la estructura del álgebra y la condición de normalización de la matriz densidad. Esto impedirá que estas condiciones iniciales tomen valores tales que permitan obtener una evolución temporal disipativa.

En el capítulo VII se utilizará el formalismo descripto en los capítulos II a V para resolver un problema de física de estado sólido que presenta controversias: La corriente que se origina en una juntura superconductora y que se denomina efecto Josephson ("Information theoretical approach to Josephson tunneling", J. Aliaga, H. Cerdeira, A.N. Proto, and D. Otero, enviado para la consideración del Phys. Rev. A). Se hará una pequeña introducción teórica a este efecto y se definirá un modelo Hamiltoniano que lo representa. Se calculará la función de partición del sistema, los invariantes dinámicos y se mostrará que el conjunto de operadores relevantes del problema, definido mediante la utilización del formalismo, tiene una estructura equivalente a un álgebra de momento angular. Se mostrará que el modelo describe correctamente tanto el efecto Josephson de corriente continua y alterna, como el desbalance de carga entre los superconductores, explicando además el origen de las dificultades encontradas en la bibliografía.

Finalmente se dedicará el capítulo VIII a analizar los resultados, extraer conclusiones y presentar las perspectivas futuras que se originan a partir del formalismo presentado.

II Mecánica estadística, mecánica cuántica y teoría de la información

II.1 Mecánica estadística y Mecánica cuántica

Si se realiza simultáneamente la medición con dispersión nula de los valores medios de un conjunto completo de observables que conmutan $\hat{O}_1, \hat{O}_2, \dots, \hat{O}_n$, la función de onda del sistema será autofunción de $\hat{O}_1, \hat{O}_2, \dots, \hat{O}_n$ con autovalores o_1, o_2, \dots, o_n . De esta forma el estado del sistema queda completamente definido y se lo representa con el vector $|\psi\rangle$. Este se puede escribir, en una base ortonormal y completa $\{|n\rangle\}$, como

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (\text{II.1.1})$$

donde los coeficientes $c_n(t) = \langle n | \psi(t) \rangle$ satisfacen

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 . \quad (\text{II.1.2})$$

El valor medio del operador \hat{A} al tiempo t está dado, en función de los elementos de matriz $A_{np} = \langle n | \hat{A} | p \rangle$, por

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np} . \quad (\text{II.1.3})$$

La evolución temporal de $|\psi(t)\rangle$, para un sistema con un hamiltoniano $\hat{H}(t)$, está determinada por la ecuación de Schrödinger

$$i \hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle . \quad (\text{II.1.4})$$

Luego, la ecuación de movimiento del valor medio de \hat{A} resulta

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}(t)] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle \quad (\text{II.1.5})$$

y es conocida con el nombre de teorema de Ehrenfest.

Hasta el momento se ha considerado que el estado dinámico del sistema se conoce exactamente a través de la Ec. (II.1.1) y se dice que se trata de un estado puro. Cuando se posee una información incompleta acerca del sistema, ya sea porque el conjunto de observables que conmutan es incompleto o porque los observables no conmutan, no es posible determinar $|\psi\rangle$ en forma unívoca y es necesario apelar al concepto de probabilidad. Entonces, la información parcial disponible puede estar dada en términos de un conjunto de posibles estados $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_L\rangle$ que satisfacen la ecuación de Schrödinger, cada uno de ellos con una probabilidad P_1, P_2, \dots, P_L . En este caso se dice que se tiene una mezcla estadística de estados en la cual el valor medio de un observable está dado por

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_k P_k \langle \psi_k | \hat{A} | \psi_k \rangle \quad (\text{II.1.6})$$

o bien

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) \quad (\text{II.1.7})$$

donde P_k es la probabilidad de que el valor medio de \hat{A} sea $A_k = \langle \psi_k | \hat{A} | \psi_k \rangle$ y $\hat{\rho}$ es el operador estadístico o matriz densidad definido por

$$\hat{\rho} = \sum_k P_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad (\text{II.1.8})$$

con

$$0 \leq P_k \leq 1 ; \sum_k P_k = 1 . \quad (\text{II.1.9})$$

La ecuación de evolución del operador estadístico se obtiene a partir de la conservación del volumen del espacio de fases,

$$i \hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}(t), \hat{\rho}] \quad (\text{II.1.10})$$

y se conoce con el nombre de ecuación de Liouville.

II.2 Teoría de la información y Principio de Máxima Entropía

La teoría de la información fue desarrollada por Shannon² para ser aplicada al campo de las comunicaciones. Se parte de la existencia de un conjunto de eventos numerables y de un espacio de probabilidad, en el que cada evento tiene una probabilidad definida $p \equiv \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ que está normalizada

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1 . \quad (\text{II.2.1})$$

Es posible entonces definir la información asociada con esta distribución de probabilidad luego de conocer la misma (I), o la ignorancia relacionada con ésta antes de conocerla (S)

$$I \equiv S = - \sum_{i=1}^n p_i \ln \frac{1}{p_i} , \quad (\text{II.2.2})$$

y se la denomina entropía de Shannon.

Si se considera el caso de un sistema físico, y se asocia cada p_i con la probabilidad de cada estado $|\psi_i\rangle$ descrita en la sección anterior, es posible utilizar la ecuación (II.1.8) para expresar a la entropía del sistema como

$$S = -k \operatorname{tr} (\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -k \langle \ln \hat{\rho} \rangle \quad (\text{II.2.3})$$

donde k es una constante que se agrega a la definición dada por la ecuación (II.2.2) a los efectos de darle unidades físicas a la entropía. Von Neumann³ fue el primero en asociar S con la entropía del estado descrito por el operador $\hat{\rho}$ al tomar k igual a la constante de Boltzmann ($k_B=1,38 \cdot 10^{-16} \text{ erg}^\circ\text{K}$).

Como se indicó en el párrafo anterior, el operador estadístico $\hat{\rho}$ determina el estado del sistema físico y la entropía del mismo. Dicho estado queda parcialmente caracterizado a partir del conocimiento de un cierto número de observables relevantes al problema físico de interés. Sólo en el caso que los operadores forman un conjunto completo de observables que conmutan la determinación del estado es unívoca y la entropía vale cero. En el caso de información parcial, el conocimiento de los valores medios de un número limitado de operadores implicará la existencia de distintos operadores densidad que satisfagan las condiciones impuestas por las ecuaciones (II.1.7-9). Surge entonces el problema de la elección de uno de ellos como representación del estado físico. Es en este punto que E.T. Jaynes⁴ introduce en la teoría el *Principio de Máxima entropía*: dado un conjunto de observables $\{\hat{O}_1, \hat{O}_2, \dots, \hat{O}_n\}$ cuyos valores medios,

$$\langle \hat{O}_i \rangle = \operatorname{Tr} (\hat{\rho} \hat{O}_i) , i = 1, \dots, n \quad (\text{II.2.4})$$

son la única información que se tiene del sistema físico y que se denominarán operadores relevantes, el operador densidad del sistema es aquel que maximiza la entropía, definida a través de la ecuación (II.2.3). El operador densidad que satisface esta condición se obtiene por el método de multiplicadores de Lagrange,

$$\hat{\rho} = \exp \left(- \sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{O}_i \right) , \quad (\text{II.2.5})$$

donde \hat{O}_0 es el operador identidad, que se agrega al conjunto inicial a los efectos de satisfacer la condición (II.1.9)

$$\text{Tr } \hat{\rho} = 1 . \quad (\text{II.2.6})$$

Utilizando las ecuaciones (II.2.5) y (II.2.3) es posible entonces relacionar la entropía del sistema con los valores medios de los operadores

$$S = k \sum_{i=0}^n \lambda_i \langle \hat{O}_i \rangle . \quad (\text{II.2.7})$$

De aquí en más se considerará $k=1$. Los valores medios y los multiplicadores de Lagrange están relacionados por la Ec. (II.2.6)

$$\lambda_0 = \ln \text{Tr} \left(\exp \left(- \sum_{i=0}^n \lambda_i \hat{O}_i \right) \right) \quad (\text{II.2.8})$$

obteniéndose

$$\langle \hat{O}_i \rangle = - \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_i} , \quad i=1, 2, \dots, n . \quad (\text{II.2.9})$$

II.3 Evolución temporal de valores medios y multiplicadores de Lagrange

Los resultados expuestos en la sección anterior fueron presentados por Jaynes para ser aplicados a un conjunto de variables del sistema cuyos valores medios son de interés. Estos valores medios eran promedios de observables clásicos relacionados con el sistema. En la sección anterior se los ha denominado "operadores" porque estos resultados se pueden extender sin dificultad a operadores cuánticos. El conjunto de

operadores utilizado por Jaynes se forma con las variables que a priori parecen relevantes. Si a posteriori del estudio del sistema se observa que es necesario incorporar algún operador a este conjunto para permitir una descripción más acertada se redefine el conjunto inicial. Este método hace imposible la deducción de resultados, ya que no permite distinguir cuando un resultado no esperado es producto de la falta de algún operador o constituye un resultado nuevo del modelo en estudio. Estas limitaciones de la teoría fueron superadas por Y. Alhassid y R.D. Levine⁵ ya que la extendieron a conjuntos de operadores cuánticos que pueden o no conmutar entre si y además elaboraron un método constructivo que permite, no solo determinar cual es el conjunto de interés asociado con un dado sistema físico sino también dotar a la dinámica de una estructura de grupo de Lie.

Para introducir estos nuevos conceptos es conveniente trabajar con el logaritmo de la matriz densidad,

$$\ln \hat{\rho} = - \sum_{i=0}^n \lambda_i \hat{O}_i , \quad (\text{II.3.1})$$

que también cumple con una ecuación del tipo (II.1.10),

$$i \hbar \frac{d \ln \hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}(t) , \ln \hat{\rho}] . \quad (\text{II.3.2})$$

Reemplazando la ecuación (II.3.1) en la ecuación (II.3.2) se comprueba que esta será válida para todo tiempo si el conmutador de los observables $\{\hat{O}_1, \hat{O}_2, \dots, \hat{O}_n\}$ con el hamiltoniano $\hat{H}(t)$ satisface

$$[\hat{H}(t) , \hat{O}_i] = i \hbar \sum_{l=0}^n \hat{O}_l g_{li} , \quad i=0,1,\dots,n . \quad (\text{II.3.3})$$

donde g_{li} son números complejos, que se interpretan como las constantes de estructura de

una semi-álgebra de Lie. Si el conjunto inicial no cumple con la condición (II.3.3) se incorporarán a él todos los operadores necesarios para satisfacerla. Los $(n+1) \times (n+1)$ elementos g_{ij} se denominan matriz \underline{G} , o de la dinámica del sistema físico, ya que como se verá, determinan las evoluciones temporales de los multiplicadores de Lagrange y de los valores medios. El agregar la condición de cierre del álgebra a la maximización de la entropía tiene un efecto importante ya que permite obtener, para un Hamiltoniano de un sistemas físico de interés, un conjunto completo de operadores relevantes mediante la aplicación de un procedimiento canónico.

Las ecuaciones (II.3.2) y (II.3.3) forman un conjunto acoplado de ecuaciones diferenciales para los multiplicadores de Lagrange,

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = \sum_{j=1}^n g_{ij} \lambda_j \quad , i = 1, \dots, q . \quad (\text{II.3.4})$$

a las que se le agregan las condiciones iniciales $\lambda_i(t_0)$, compatibles con las ecuaciones (II.2.4) a (II.2.9). Para el caso de Hamiltonianos independientes del tiempo, los coeficientes g_{ij} también son independientes del tiempo y las ecs. (II.3.4) se transforman en ecuaciones diferenciales a coeficientes constantes. En este caso las soluciones son del tipo⁶

$$\lambda_j(t) = \sum_{i=1}^K e^{r_i t} \sum_{m=0}^{\gamma} a_{im}^{(j)} t^m , \quad (\text{II.3.5})$$

donde K es el número de raíces (r_i) diferentes de la ecuación secular correspondiente, $a_{im}^{(j)}$ son constantes a determinar a partir de las condiciones iniciales y $\gamma+1$ es la multiplicidad de r_i . Esta misma discusión puede aplicarse a los valores medios de los operadores utilizando el Teorema de Ehrenfest (ec. (II.1.5)). Si el hamiltoniano es independiente del tiempo, al utilizar la ec. (II.3.3) se obtiene

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = -\text{Tr} \left(\hat{\rho} \sum_{l=0}^N \hat{O}_l g_{li} \right) = -\sum_{l=0}^N \langle \hat{O}_l \rangle g_{li} \quad (\text{II.3.6})$$

es decir, el teorema de Ehrenfest en función de las constantes de estructura del álgebra g_{ij} .

II.4 Formulación covariante de la teoría de la información

La solución de la ecuación (II.3.4) puede expresarse en función de las condiciones iniciales de la forma⁵

$$\lambda(t) = \underline{R}(t, t_0) \lambda(t_0) \quad (\text{II.4.1})$$

con $\underline{R}(t_0, t_0) = 1$ y donde $\lambda(t)$ es un *vector columna* formado por $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\}$. La matriz $\underline{R}(t, t_0)$ queda entonces definida a través de la relación

$$\frac{\partial \underline{R}(t; t_0)}{\partial t} = \underline{G}(t) \underline{R}(t, t_0) \quad (\text{II.4.2})$$

con $\underline{G}(t)$ la matriz de la dinámica determinada a partir de la relación (II.3.3). La evolución temporal de los valores medios, dada por la ecuación (II.3.6), puede también expresarse en forma matricial a partir de la relación

$$\langle \hat{O}_i \rangle_t = \sum_{j=0}^N R_{ji}^{-1}(t; t_0) \langle \hat{O}_j \rangle_{t_0} \quad (\text{II.4.3})$$

obteniéndose

$$\langle \hat{O} \rangle_t = \underline{F}(t, t_0) \langle \hat{O} \rangle_{t_0} \quad (\text{II.4.4})$$

con $\underline{F}(t, t_0)$ la matriz transpuesta de $\underline{R}(t, t_0) = \underline{R}^{-1}(t, t_0)$ y donde $\langle \hat{O} \rangle_t$ se toma como la matriz

columna de $N+1$ componentes $\{\langle \hat{O}_1 \rangle, \langle \hat{O}_2 \rangle, \dots, \langle \hat{O}_N \rangle\}$. Si por el contrario se considera a $\langle \hat{O} \rangle_t$ como un *vector fila* la ec. (2.4.4) se transforma en

$$\langle \hat{O} \rangle_t = \langle \hat{O} \rangle_{t_0} F(t, t_0). \quad (\text{II.4.5})$$

Partiendo de la relación (II.4.5) se le puede asignar al vector $\langle \hat{O} \rangle_t$ un carácter *covariante*⁷, que usualmente se representa con subíndice. Del mismo modo, la Ec. (II.4.1) permite indentificar a los multiplicadores de Lagrange con un vector que se transforma de manera *contravariante*, representándolo por lo tanto con un supraíndice, λ^t . Al espacio de los vectores⁸ $\langle \hat{O} \rangle_t$ se le puede definir una métrica \underline{E} que permite obtener el vector contravariante $\langle \hat{O} \rangle^t$ como la matriz columna

$$\langle \hat{O} \rangle^t = \underline{E} \langle \hat{O} \rangle_t \quad (\text{II.4.6})$$

donde $\langle \hat{O} \rangle_t$ representa como matriz columna al vector covariante $\langle \hat{O} \rangle_t$. Dado que esta métrica tiene determinante no nulo, este espacio es un espacio de Riemann. De la misma forma es posible definir una métrica \underline{E}' para el espacio de multiplicadores de Lagrange

$$\lambda_t = \tilde{\lambda}^t \underline{E}' \quad (\text{II.4.7})$$

utilizando el vector $\tilde{\lambda}^t$ que representa a λ^t por una matriz fila. Las matrices \underline{E} y \underline{E}' se definen a partir de la invariancia de la contracción de un vector covariante con uno contravariante

$$\langle \hat{O} \rangle_t \langle \hat{O} \rangle^t = \langle \hat{O} \rangle_{t_0} \langle \hat{O} \rangle_{t_0} \quad (\text{II.4.8})$$

$$\lambda_t \lambda^t = \lambda_{t_0} \lambda^{t_0}. \quad (\text{II.4.9})$$

Utilizando las ecuaciones (II.4.1), (II.4.4) y (II.4.5) se obtiene

$$\underline{F} \underline{E} \underline{F} = \underline{E} \quad (\text{II.4.10})$$

y

$$\underline{R} \underline{E}' \underline{R} = \underline{E}' \quad (\text{II.4.11})$$

que definen las matrices \underline{E} y \underline{E}' . Si estas matrices son independientes del tiempo ($\dot{\underline{E}}=0$, $\dot{\underline{E}}'=0$), se pueden derivar estas ecuaciones con respecto al tiempo para obtener, utilizando la matriz \underline{G} , una relación más sencilla de calcular

$$\underline{G} \underline{E} = - \underline{E} \underline{G} \quad (\text{II.4.12})$$

$$\underline{E}' \underline{G} = - \underline{G} \underline{E}' . \quad (\text{II.4.13})$$

Es importante notar que las ecuaciones (II.4.8) y (II.4.9) son una forma canónica de obtener invariantes que sean productos cuadráticos de los valores medios o de los multiplicadores de Lagrange. Este es un resultado importante de la teoría que se origina en el hecho de dotar a los operadores y a los multiplicadores de Lagrange de una estructura de espacio de Riemann. Esta estructura permite reescribir las ecuaciones (II.2.7) y (II.2.9) utilizando el caracter invariante de λ_0 , de la forma

$$S = \lambda_0 + \langle \hat{O} \rangle_t \lambda^t , \quad (\text{II.4.14})$$

$$\langle \hat{O} \rangle_t = - \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda^t} . \quad (\text{II.4.15})$$

Es importante aclarar que hasta el presente se ha trabajado en la representación de Schrödinger, en la que los operadores son en general independientes del tiempo y el que

evoluciona es el vector de estado de acuerdo con la ecuación (II.1.4). Si se trabaja en la representación de Heisenberg, en la que evolucionan los operadores y el vector de estado se mantiene constante, las ecuaciones (II.3.6), (II.4.3-6) y (II.4.8) siguen valiendo si se aplican a los operadores y no a sus valores medios.

II.5 Coeficientes de correlación

El coeficiente de correlación entre dos operadores se define en mecánica estadística como

$$K_{lm} = \frac{1}{2} \langle [\hat{O}_m, \hat{O}_l]_+ \rangle - \langle \hat{O}_m \rangle \langle \hat{O}_l \rangle \quad (\text{II.5.1})$$

donde el anticonmutador contempla el caso en que los operadores no conmuten entre sí. Este coeficiente representa tanto las correlaciones cuánticas entre los operadores (a través del anticonmutador) como las correlaciones estadísticas provenientes de considerar estados mixtos descritos por una matriz densidad (Ec. (II.1.8) y (II.2.5)). Por lo expuesto en la sección anterior, los coeficientes K_{lm} pueden ser considerados componentes de un tensor \mathbf{K} de segundo orden covariante.

Esos coeficientes aparecen naturalmente en la teoría al calcular

$$\frac{\partial^2 \lambda_0}{\partial \lambda_m \partial \lambda_l} = - \frac{\langle \hat{O}_l \rangle}{\partial \lambda_m} = - \frac{\langle \hat{O}_m \rangle}{\partial \lambda_l} . \quad (\text{II.5.2})$$

Para efectuar este cálculo es preciso simetrizar la definición de valor medio (Ec. (II.2.4))

$$\langle \hat{O}_l \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{O}_l + \hat{O}_l \hat{\rho}) = \frac{1}{2} \text{Tr} ([\hat{\rho}, \hat{O}_l]_+) \quad (\text{II.5.3})$$

y utilizar la expresión de $\hat{\rho}$ dada por la Ec. (II.2.5). De esta forma, al efectuar la derivada de \hat{O}_l con respecto a λ_m se obtiene

$$\frac{\langle \hat{O}_l \rangle}{\partial \lambda_m} = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\left[\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \lambda_m}, \hat{O}_l \right]_+ \right), \quad (\text{II.5.4})$$

con

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \lambda_m} &= \frac{\partial (\exp^{-\lambda_0} \exp(-\sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{O}_i))}{\partial \lambda_m} = \\ &= \frac{\partial \exp^{-\lambda_0}}{\partial \lambda_m} \exp(-\sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{O}_i) + \exp^{-\lambda_0} \frac{\partial \exp(-\sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{O}_i)}{\partial \lambda_m} = \\ &= \hat{\rho} \langle \hat{O}_m \rangle - \hat{\rho} \tilde{\hat{O}}_m \end{aligned} \quad (\text{II.5.5})$$

donde $\tilde{\hat{O}}_m$ es la transformada Kubo de \hat{O}_m ⁹

$$\tilde{\hat{O}}_m = \int_0^1 \exp(-x \sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{O}_i) \hat{O}_m \exp(x \sum_{i=1}^n \lambda_i \hat{O}_i) dx. \quad (\text{II.5.6})$$

Reemplazando el resultado de la Ec. (2.2.5) en la Ec. (2.2.4) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\langle \hat{O}_l \rangle}{\partial \lambda_m} &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\left[\hat{\rho} \langle \hat{O}_m \rangle - \hat{\rho} \tilde{\hat{O}}_m, \hat{O}_l \right]_+ \right) = \\ &= - \left(\frac{1}{2} \text{Tr} \left(\left[\hat{\rho} \tilde{\hat{O}}_m, \hat{O}_l \right]_+ \right) - \langle \hat{O}_m \rangle \langle \hat{O}_l \rangle \right) \quad (\text{II.5.7}) \\ &= - \left(\frac{1}{2} \langle \left[\hat{O}_m, \hat{O}_l \right]_+ \rangle - \langle \hat{O}_m \rangle \langle \hat{O}_l \rangle \right) = -K_{lm} \end{aligned}$$

donde el último renglón de la serie de igualdades es válido si se puede realizar la permutación cíclica bajo el signo de traza. De esta forma la información relativa a las correlaciones aparece en forma natural dentro de la teoría. Dado el carácter doblemente covariante, este tensor evoluciona según la ecuación

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{F} \mathbf{K}_{t_0} \mathbf{F} . \quad (\text{II.5.8})$$

La relación entre la información que poseen los coeficientes de correlación y la entropía se puede observar calculando la dependencia de la entropía con los distintos multiplicadores de Lagrange

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \lambda_j} &= \frac{\partial (\lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i \langle \hat{O}_i \rangle)}{\partial \lambda_j} = \\ &= \sum_{i=1}^n \lambda_i \frac{\partial \langle \hat{O}_i \rangle}{\partial \lambda_j} = - \sum_{i=1}^n \lambda_i K_{ij} \end{aligned} \quad (\text{II.5.9})$$

o en notación covariante

$$\nabla_{\lambda} S = - \mathbf{K}_t \lambda^t . \quad (\text{II.5.10})$$

El resultado obtenido indica que la variación de entropía con respecto a los multiplicadores de Lagrange es igual a la contracción del tensor de correlaciones con el vector de los multiplicadores de Lagrange. Esta relación será generalizada en la sección III.

Al dotar a los operadores $\langle \hat{O} \rangle_t$ de una estructura de espacio de Riemann es posible calcular ciertas magnitudes que dan idea de las características de dicho espacio, como la divergencia y el rotor de $\langle \hat{O} \rangle_t$ con respecto a λ^t . De la ecuación (II.5.7) se

deduce que la divergencia de los operadores resulta

$$\nabla_{\lambda} \langle \hat{O} \rangle_t = \sum_{i=1}^n \frac{\langle \hat{O}_i \rangle}{\partial \lambda_i} = - \sum_{i=1}^n K_{ii} , \quad (\text{II.5.11})$$

que es la traza del tensor K. El rotor del espacio de operadores es

$$\nabla_{\lambda} \times \langle \hat{O} \rangle_t = \epsilon_{ijk} \frac{\langle \hat{O}_i \rangle}{\partial \lambda_k} \hat{e}_j = 0 \quad (\text{II.5.12})$$

por ser la contracción de un tensor antisimétrico (el tensor ϵ de Levi-Civita) con el tensor simétrico de correlaciones (por la Ec. (II.5.2) $K_{ij}=K_{ji}$). Además, la ecuación (II.5.2) puede escribirse como una ecuación de Poisson

$$\Delta \lambda_0 = - \sum_{i=1}^n K_{nn} . \quad (\text{II.5.13})$$

Esto permite concluir que la función de Massieu-Planck λ_0 se comporta como función potencial de un campo irrotacional cuyas fuentes son las autocorrelaciones o dispersiones cuánticas. Si todas las dispersiones se anulan, la ecuación (II.5.13) se transforma en una ecuación Laplaciana con la solución trivial

$$\lambda_0 = - \sum_{j=1}^n \langle \hat{O}_j \rangle \lambda_j , \quad (\text{II.5.14})$$

y por lo tanto la entropía (Ec. (II.2.7)) es igual a cero. Esta situación de dispersiones nulas corresponde por supuesto al caso en que se conocen todos los valores medios del conjunto de operadores relevantes y los observables conmutan entre sí.

III Constantes de movimiento y estados accesibles

III.1 Invariantes dinámicos

En la sección II.4 se estudió la estructura de espacio de Riemann que posee el conjunto de operadores relevantes y sus respectivos multiplicadores de Lagrange. Se vió que el espacio de operadores posee un carácter covariante ($\langle \hat{O} \rangle$) y que mediante la matriz de métrica del espacio (\underline{E}) es posible hallar el vector contravariante ($\langle \hat{O} \rangle^l$). La contracción del vector covariante con el contravariante generará productos cuadráticos de valores medios de operadores (o de los operadores mismos, si se trabaja en la representación de Heisenberg), que serán invariantes (ver Ec. (II.4.8)). Para aclarar este punto se mostrará un ejemplo que figura en la referencia 8. Si se considera el caso de una partícula libre, $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$, con el conjunto de operadores relevantes ($\hat{O}_0 = \hat{1}$, $\hat{O}_1 = \hat{x}$, $\hat{O}_2 = \hat{p}$), se obtiene

$$\hat{O}_t \hat{O}^t = \hat{1}^2 e_{00} + \hat{p} \hat{1} (e_{02} + e_{20}) + [\hat{x}, \hat{p}] e_{12} + \hat{p}^2 e_{22}. \quad (\text{III.1.1})$$

Como los coeficientes e_{ij} de la matriz \underline{E} son linealmente independientes, los invariantes que se obtienen son $\hat{1}$, \hat{p} , \hat{p}^2 , y el conmutador de \hat{x} con \hat{p} , que es igual a $i\hbar$. Estos son todos los invariantes que se pueden obtener para este Hamiltoniano como producto de dos operadores relevantes. Aunque en este caso simple esos invariantes son obvios, la importancia del método consiste en que determina claramente una forma simple de generar *todos* los invariantes. También es posible calcular los invariantes que serán productos cuadráticos de multiplicadores de Lagrange utilizando la ecuación (II.4.9).

Un tipo de invariante distinto es el que se obtiene al contraer el vector covariante de operadores con el vector contravariante de multiplicadores de Lagrange¹⁰. Un ejemplo trivial de este caso es la entropía, como se indicó en la Ec. (II.4.14). A los invariantes de este tipo nos dedicaremos en esta sección.

Un invariante o constante de movimiento es una magnitud cuya derivada total con respecto al tiempo es nula. Como se dijo anteriormente (Ec. (II.1.10)) cualquier

función del operador $\hat{\rho}$ cumplirá con esta condición, ya que se deriva de la conservación del volumen del espacio de fases. En particular, se puede considerar la función

$$i \hbar \frac{\partial (\ln \hat{\rho})^l}{\partial t} = [\hat{H}(t), (\ln \hat{\rho})^l], \quad (\text{III.1.2})$$

que es válida para cualquier entero l . Se definen entonces los invariantes

$$\begin{aligned} I^{(l)} &= \langle (\ln \hat{\rho})^l / \hat{\rho} \rangle - \langle \ln \hat{\rho} / \hat{\rho} \rangle^l \equiv I_1^l - I_2^l \\ &= \left\langle \left(- \sum_{i=0}^n \lambda_i \hat{O}_i \right)^l \right\rangle - \left(\left\langle - \sum_{i=0}^n \lambda_i \hat{O}_i \right\rangle \right)^l. \end{aligned} \quad (\text{III.1.3})$$

Para el caso particular $l=1$, se obtiene $I_1^1 = I_2^1 = S$. Otro caso importante es $l=2$, resultando

$$I^{(2)} = \sum_{r,j=1}^n \lambda_r \lambda_j K_{rj}. \quad (\text{III.1.4})$$

Para el caso general se obtiene

$$I^{(l)} = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_m} \lambda_{i_1}(t) \dots \lambda_{i_m}(t) \Xi (\hat{O}_{i_1} \dots \hat{O}_{i_m}), \quad (\text{III.1.5})$$

donde Ξ representa una suma sobre términos $T_{i_1 \dots i_m}$ contemplando todas las posibles permutaciones de los operadores \hat{O}_i del tipo

$$T_{i_1 \dots i_m} = \langle \hat{O}_{i_1} \hat{O}_{i_2} \dots \hat{O}_{i_m} \rangle - \langle \hat{O}_{i_1} \rangle \langle \hat{O}_{i_2} \rangle \dots \langle \hat{O}_{i_m} \rangle. \quad (\text{III.1.6})$$

De esta forma se puede observar que las correlaciones cuánticas y estadísticas de todo orden (Ec. (III.1.6)) están relacionadas con invariantes dinámicos del sistema.

III.2 Entropía, invariantes y estados accesibles

Al conjunto de vectores de cuadrado integrable asociados a un sistema físico se lo conoce como espacio de Hilbert del sistema. La dimensión de este espacio está determinada por la cantidad de vectores ortonormales necesarios para formar una base de este espacio. En general, es posible expresar esta dimensión mediante la relación

$$M = \text{Tr } \hat{1} \quad (\text{III.2.1})$$

donde M puede valer infinito, si el espacio es de dimensión infinita. Supongamos que consideramos un espacio de Hilbert de dimensión finita o que aproximamos el espacio de dimensión infinita por otro de dimensión M . El operador identidad puede ser escrito de la forma

$$\hat{1} = \hat{\rho} \exp(-\ln \hat{\rho}). \quad (\text{III.2.2})$$

Tomando la traza de la expresión (III.2.2) se obtiene

$$\begin{aligned} M = \text{Tr } \hat{1} &= \text{Tr} [\hat{\rho} \exp(-\ln \hat{\rho})] = \\ &= \langle \exp(-\ln \hat{\rho}) / \hat{\rho} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{III.2.3})$$

La ecuación (III.2.3) nos permite interpretar a M como una constante de movimiento que expresa nuestro conocimiento a orden cero sobre el sistema. Si expandimos la exponencial de la ec. (III.2.3) se obtiene

$$\begin{aligned}
M &= \text{Tr } \hat{\rho} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} (\ln \hat{\rho})^n \right] \\
&= 1 + S + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \langle (\ln \hat{\rho})^n \rangle \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} I_1^{(n)}
\end{aligned} \tag{III.2.4}$$

que establece una relación entre el número de estados accesibles del sistema y los invariantes $I_1^{(n)}$. En términos de los invariantes $I^{(n)}$ la Ec. (III.2.4) se expresa

$$M = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} I^{(n)} + \exp(S), \tag{III.2.5}$$

o

$$M - e^S = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} I^{(n)} \tag{III.2.6}$$

que relaciona la entropía, los invariantes dinámicos y el número de estados accesibles. De esta forma, la entropía del sistema se obtiene como

$$S = \ln \left[M - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} I^{(n)} \right]. \tag{III.2.7}$$

Con el objeto de obtener algunas propiedades interesantes de los coeficientes de correlación $I^{(n)}$ se define el operador normalizado $\xi^{(n)}$

$$\xi^{(n)} = \frac{\hat{\rho} (\ln \hat{\rho})^n}{\text{Tr} (\hat{\rho} (\ln \hat{\rho})^n)} \quad (\text{III.2.8})$$

y utilizando la conocida desigualdad para el operador densidad⁵

$$-\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \leq -\text{Tr}(\xi \ln \hat{\rho}) \quad (\text{III.2.9})$$

se obtiene

$$S^n \leq -\frac{I_1^{(n+1)}}{I_1^{(n)}}. \quad (\text{III.2.10})$$

Para $n=1$ resulta

$$S^2 \leq I_1^{(2)} \quad (\text{III.2.11})$$

y como $S^2 \geq 0$

$$0 \leq S^2 \leq I_1^{(2)}, \quad (\text{III.2.12})$$

o, lo que es equivalente

$$0 \leq I_1^{(2)} - S^2 = I_1^{(2)} - I_2^{(2)} = I^{(2)}, \quad (\text{III.2.13})$$

que establece una relación muy importante entre los multiplicadores de Lagrange y los coeficientes de correlación

$$I^{(2)} = \sum_{r,j} \lambda_r \lambda_j K_{rj} \geq 0. \quad (\text{III.2.14})$$

Además, de la Ec. (III.2.10) para $n=2$ se tiene

$$S \leq - \frac{I_1^{(3)}}{I_1^{(2)}}, \quad (\text{III.2.15})$$

que lleva a

$$I_1^{(3)} \leq 0. \quad (\text{III.2.16})$$

Mediante un procedimiento recursivo, se obtiene

$$I^{(2n)} \geq 0, \quad (\text{III.2.17})$$

$$I^{(2n+1)} \leq 0 \quad (\text{III.2.18})$$

asegurando, de esta forma, que el lado derecho de la ecuación (III.2.6) es una cantidad definida positiva y que por lo tanto

$$S \leq \ln M \quad (\text{III.2.19})$$

modificando la relación dada por Boltzmann ($S = \ln M$) por la presencia de correlaciones cuánticas.

III.3 Ejemplos

III.3.a Anomalía Schottky

Es un hecho conocido que para un sistema con un número finito de estados

accesibles el calor específico tiene un máximo. Este efecto se denomina Anomalía Schottky¹¹.

Consideremos un sistema con N estados accesibles con energías e_0, e_1, \dots, e_{n-1} . En este caso la matriz densidad de equilibrio será

$$\hat{\rho} = \exp(-\lambda_0 - \beta \hat{H}) \quad (\text{III.3.1})$$

con

$$\lambda_0 = \ln \left(\sum_{i=0}^{N-1} \exp(-\beta e_i) \right). \quad (\text{III.3.2})$$

La energía media del sistema es $\langle \hat{H} \rangle$

$$\langle \hat{H} \rangle = \exp(-\lambda_0) \sum_{i=0}^{N-1} e_i \exp(-\beta e_i). \quad (\text{III.3.3})$$

Finalmente la entropía se evalúa utilizando la ecuación (II.2.7),

$$S = \ln \left(\sum_{i=0}^{N-1} \exp(-\beta e_i) \right) + \beta \frac{\sum_{i=0}^{N-1} e_i \exp(-\beta e_i)}{\sum_{i=0}^{N-1} \exp(-\beta e_i)}. \quad (\text{III.3.4})$$

La entropía toma su máximo valor para $\beta=0$,

$$S = \ln N, \quad (\text{III.3.5})$$

lo que concuerda con la ec. (III.2.19). Los invariantes hallados en la sección III.2 pueden ser calculados para este ejemplo. De la ecuación (III.1.4) se obtiene I⁽²⁾

$$I^{(2)} = \beta (\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2) = C / k \quad (\text{III.3.6})$$

donde C es el calor específico y k la constante de Boltzmann.

Consideremos ahora que los autoestados de la energía están equiespaciados, a una distancia K a partir de un nivel fundamental e_0

$$e_n = n K + e_0, \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (\text{III.3.7})$$

En este caso se tiene

$$\exp(\lambda_0) = \exp(-\beta e_0) \frac{[1 - \exp(-\beta K N)]}{[1 - \exp(-\beta K)]}, \quad (\text{III.3.8})$$

$$\langle \hat{H} \rangle = e_0 + \frac{K}{[\exp(\beta K) - 1]} - \frac{K N}{[\exp(\beta K N) - 1]}, \quad (\text{III.3.9})$$

y

$$C = k K^2 \beta^2 \left\{ \frac{\exp(\beta K)}{[\exp(\beta K) - 1]^2} - \frac{N^2 \exp(\beta K N)}{[\exp(\beta K N) - 1]^2} \right\}. \quad (\text{III.3.10})$$

Como se muestra en la figura 1, el calor específico presenta un valor máximo. La temperatura asociada con él aumenta con N. A medida que N crece, C converge a la ecuación de Einstein y el máximo desaparece. Si se conoce el número de estados accesibles y el calor específico del sistema, es posible utilizar la ec. (III.2.7) para evaluar la entropía. Aplicando las ecuaciones (III.2.17) y (III.2.18) se demuestra que

$$\Delta = \ln \left(N - \frac{I^{(2)}}{2} \right) - S > 0. \quad (\text{III.3.11})$$

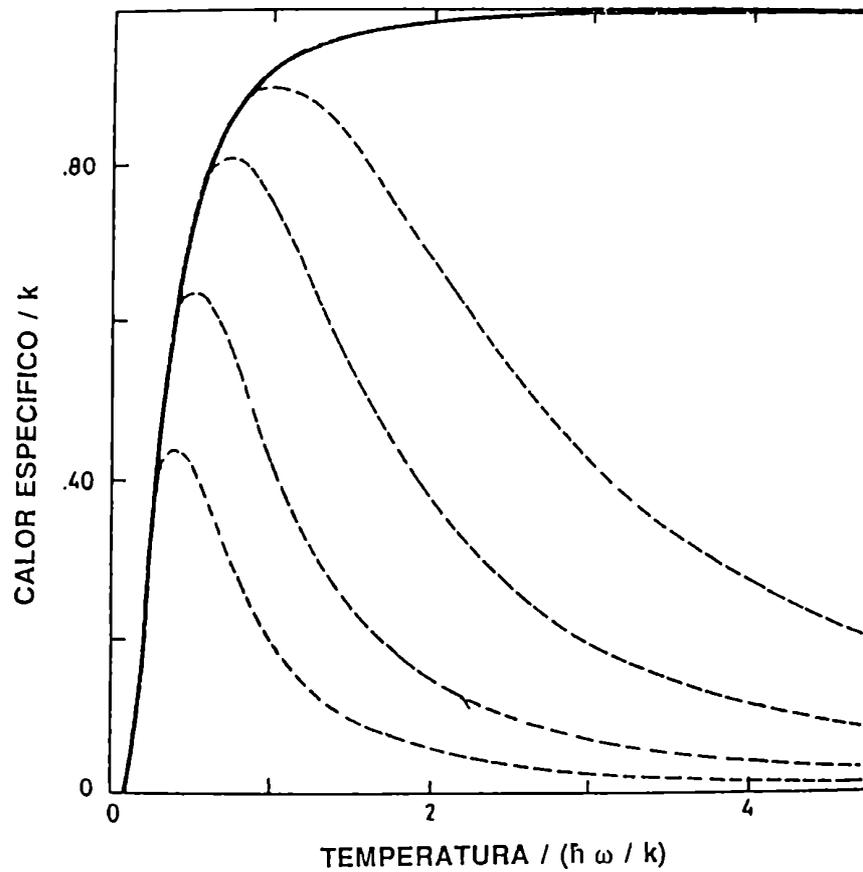


Figura 1: Calor específico en función de la temperatura. En la línea punteada se observa el efecto Schotthy para $N = 2,3,5,8$. En la línea llena se muestra el calor específico obtenido por Einstein para $N = \infty$.

La figura 2 muestra $\ln(N - C/2)$ y S versus la temperatura T para diferentes valores de N . En el límite de altas temperaturas ($K\beta$ mucho menor que $1/N$) se puede dar una expresión analítica para Δ :

$$\Delta \cong \frac{(K\beta)^2 N}{24}. \quad (\text{III.3.12})$$

Como se muestra en la figura 2 y se deduce de la Ec. (III.3.11), $\ln(N - C/2)$ es una cota superior de la entropía. Para altas temperaturas, Δ es despreciable y el conocimiento de N y C son suficientes para determinar el valor de la entropía. Para una dada temperatura, la aproximación se torna peor a medida que N crece; las correlaciones de orden superior se hacen más y más importantes y es necesario considerar todos los términos de la expansión dada por la Ec. (III.2.7), es decir las correlaciones de orden superior.

III.3.b Efecto Zeeman

Se estudiará ahora el problema de una partícula con momento angular \hat{J} en presencia de un campo magnético $B = B z$. El Hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = -\hat{\mu} B, \quad (\text{III.3.13})$$

donde el momento magnético $\hat{\mu}$ es proporcional a la componente de momento angular en la dirección del campo

$$\hat{\mu} = \gamma \hbar \hat{J}_z. \quad (\text{III.3.14})$$

Interesa en este punto estudiar el caso en que solamente se conocen $\langle \hat{J}_x \rangle$ y $\langle \hat{J}_y \rangle$. Por lo tanto, el conjunto de operadores relevantes que cierra un álgebra parcial con el

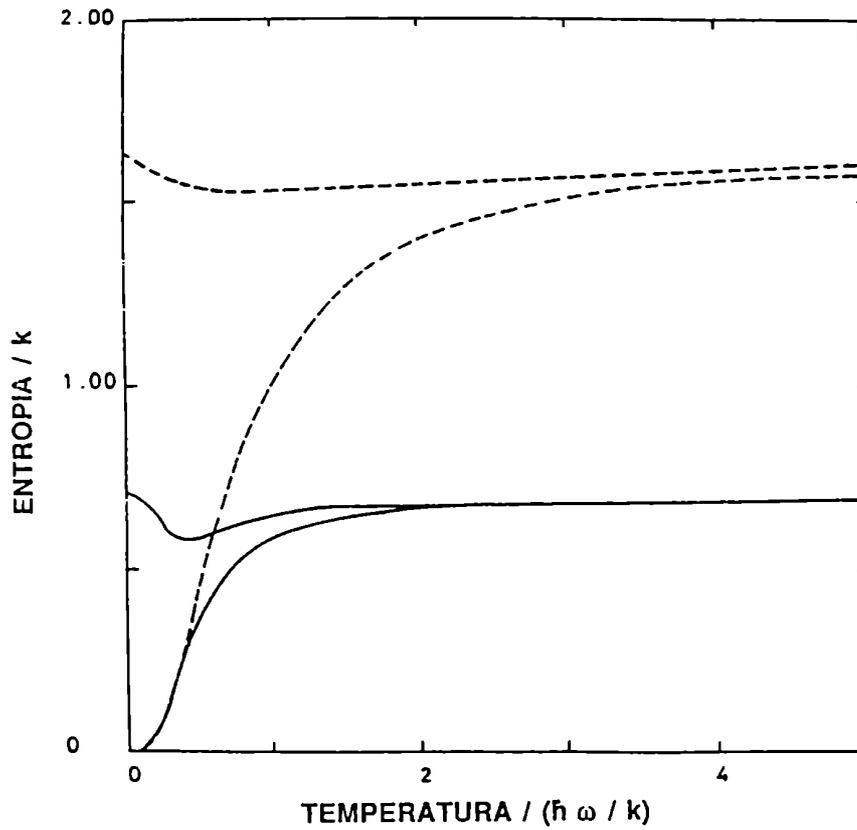


Figura 2: Entropía y $\ln \left(N - \frac{I^{(2)}}{2} \right)$ en función de la temperatura. La línea llena corresponde a $N = 2$ y la punteada a $N = 5$.

Hamiltoniano es $(\hat{O}_0=\hat{1}, \hat{O}_1=\hat{J}_x, \hat{O}_2=\hat{J}_y)$, y el operador densidad asociado a este problema es

$$\hat{\rho} = \exp(-\lambda_0 - \lambda_1 \hat{J}_x - \lambda_2 \hat{J}_y). \quad (\text{III.3.15})$$

El momento angular total vale j ; luego el número de estados accesibles es

$$N = 2j + 1. \quad (\text{III.3.16})$$

Para poder evaluar el valor medio de los operadores para cualquier conjunto de multiplicadores de Lagrange (λ_1, λ_2) se define

$$\beta = -i (\lambda_1 x + \lambda_2 y) = \beta n \quad (\text{III.3.17})$$

con

$$\beta = \sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2} \quad (\text{III.3.18})$$

Al aplicar la condición de normalización se obtiene

$$\lambda_0 = \ln \{ \text{Tr} [\exp(-i \beta \cdot J)] \} = \ln [\text{Tr} (\underline{R}_\beta)] \quad (\text{III.3.19})$$

donde \underline{R}_β es la matriz de rotación en el ángulo β . La teoría de rotaciones permite evaluar los elementos de la matriz \underline{R}_β para cualquier valor de j si se conoce el valor de \underline{R}_β para $j=\frac{1}{2}$.

En ese caso \underline{R}_β es

$$\underline{R}_\beta = \underline{1} \cosh(\hbar\beta / 2) - i \underline{\sigma}_\beta \sinh(\hbar\beta / 2) \quad (\text{III.3.20})$$

con

$$\mathcal{O}_\beta = (\mathcal{O}_x x + \mathcal{O}_y y) \cdot n, \quad (\text{III.3.21})$$

y \mathcal{O}_x y \mathcal{O}_y son las matrices de Pauli. Resulta

$$\mathbb{R}_\beta = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma^* \\ \gamma & \alpha \end{pmatrix} \quad (\text{III.3.22})$$

con

$$\begin{aligned} \alpha &= \cosh (\hbar\beta / 2) \\ \gamma &= -\sinh (\hbar\beta / 2) \frac{(\lambda_1 + i \lambda_2)}{\beta}. \end{aligned} \quad (\text{III.3.23})$$

Si j es distinto de $\frac{1}{2}$ los elementos de \mathbb{R}_β son

$$\langle jm' | \mathbb{R}_\beta | jm \rangle = \frac{N_{jm}}{N_{jm'}} \sum_{\substack{p,q \\ p+q=j+m'}} \binom{j+m}{p} \binom{j-m}{q} \alpha^{p+j-m-q} (\gamma^*)^{j-m-p} \gamma^q \quad (\text{III.3.24})$$

con $N_{jm} = \sqrt{(j+m)! (j-m)!}$.

Los valores medios de los operadores pueden ser calculados a partir de la Ec. (II.2.4)

$$\langle \hat{O}_i \rangle = \exp(-\lambda_0) \text{Tr} (\mathbb{R}_\beta \hat{O}_i). \quad (\text{III.3.25})$$

La evaluación de λ_0 se realiza aplicando nociones elementales de la teoría de momento angular,

$$\lambda_0 = \ln \left(\sum_{m=-j}^j \exp (m \beta \hbar) \right) \quad (\text{III.3.26})$$

donde m indica las proyecciones del momento angular ($m=-j, -j+1, \dots, j-1, j$). El valor medio de los operadores relevantes resulta entonces

$$\langle \hat{J}_x \rangle = - \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_1} = \quad (\text{III.3.27})$$

$$= - \hbar \lambda_1 \frac{\left(\sum_{m=-j}^j m \exp (m \beta \hbar) \right)}{\left(\beta \sum_{m=-j}^j \exp (m \beta \hbar) \right)}$$

$$\langle \hat{J}_y \rangle = - \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_2} = \quad (\text{III.3.28})$$

$$= - \hbar \lambda_2 \frac{\left(\sum_{m=-j}^j m \exp (m \beta \hbar) \right)}{\left(\beta \sum_{m=-j}^j \exp (m \beta \hbar) \right)}$$

Mediante las ecuaciones (III.3.25 - 28) se pueden evaluar los invariantes hallados en la sección III.1. A partir de la ecuación (III.1.4) se obtiene

$$I^{(2)} = \lambda_1^2 (\langle \hat{J}_x^2 \rangle - \langle \hat{J}_x \rangle^2) + \lambda_2^2 (\langle \hat{J}_y^2 \rangle - \langle \hat{J}_y \rangle^2) + \quad (\text{III.3.29})$$

$$+ 2 \lambda_1 \lambda_2 \left(\frac{1}{2} \langle [\hat{J}_x, \hat{J}_y]_+ \rangle - \langle \hat{J}_x \rangle \langle \hat{J}_y \rangle \right)$$

y por la Ec. (III.2.13) es posible asegurar que

$$I^{(2)} \geq 0. \quad (\text{III.3.30})$$

En este ejemplo los operadores relevantes no conmutan con el hamiltoniano y por lo tanto sus valores medios son dependientes del tiempo. Las constantes de estructura del álgebra no nulas (Ec. (II.3.3)) valen

$$g_{12} = \gamma \hbar B \quad g_{21} = -\gamma \hbar B \quad (\text{III.3.31})$$

El teorema de Ehrenfest (Ec. (II.3.6)) permite calcular la evolución temporal de los valores medios

$$\langle \hat{J}_x \rangle(t) = \langle \hat{J}_x \rangle_0 \cos(\omega t) - \langle \hat{J}_y \rangle_0 \sin(\omega t) \quad (\text{III.3.32})$$

$$\langle \hat{J}_y \rangle(t) = \langle \hat{J}_x \rangle_0 \sin(\omega t) + \langle \hat{J}_y \rangle_0 \cos(\omega t) \quad (\text{III.3.33})$$

con $\omega = \mu_B B / \hbar$.

Es posible calcular la métrica \underline{E} definida a partir de la ecuación (II.4.6), obteniéndose

$$\underline{E} = \begin{pmatrix} e_{00} & 0 & 0 \\ 0 & e_{11} & e_{12} \\ 0 & -e_{12} & e_{11} \end{pmatrix}. \quad (\text{III.3.34})$$

De esta forma el invariante de la Ec. (II.4.8) resulta,

$$\langle \hat{O} \rangle_t \langle \hat{O} \rangle^t = e_{00} \hat{I} + e_{11} (\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2) + e_{12} [\hat{J}_x, \hat{J}_y]. \quad (\text{III.3.35})$$

Como los coeficientes de la matriz \underline{E} son independientes, los invariantes cuadráticos del

sistema son

$$\{ \hat{I}, (\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2), [\hat{J}_x, \hat{J}_y] \} . \quad (\text{III.3.36})$$

Es importante notar la diferencia entre estos invariantes y los obtenidos a partir de la Ec. (III.1.3), que para este ejemplo son los invariantes de la Ec. (III.3.29). Los valores medios de los operadores dados en la Ec. (III.3.36) son independientes del tiempo porque los observables conmutan con el Hamiltoniano. En cambio el invariante de la Ec. (III.3.29) es una combinación particular de valores medios de observables y multiplicadores de Lagrange, que son dependientes del tiempo.

La entropía del sistema

$$S = \lambda_0 + \lambda_1 \langle \hat{J}_x \rangle + \lambda_2 \langle \hat{J}_y \rangle \quad (\text{III.3.37})$$

es el invariante I_2^1 y toma su máximo valor,

$$S = \ln(2j + 1) , \quad (\text{III.3.38})$$

cuando $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ (ver Ec.(III.2.19)). En este caso también es posible estimar la entropía mediante la Ec. (III.2.7)

$$S \cong \ln \left(2j + 1 - \frac{I^{(2)}}{2} \right) \quad (\text{III.3.39})$$

y la aproximación será buena para temperaturas en el rango

$$\hbar \beta \ll \frac{1}{2j + 1} . \quad (\text{III.3.40})$$

Es así como se ha generado un método para el cálculo de invariantes utilizando la estructura de grupo y de espacio de Riemann subyacente en el sistema dinámico.

IV Matriz densidad para operadores no-ligados

IV.1 Definición de traza para operadores no-ligados

La suposición que subyace en la definición de la matriz densidad (Ec. (II.1.8)), o en su versión dentro del contexto de la teoría de la información (Ec. (II.2.5)), es que existe una base $|\psi_i\rangle$ que expande el espacio de Hilbert correspondiente al sistema caracterizado por los observables $\{\hat{O}_1, \hat{O}_2, \dots, \hat{O}_n\}$ (cuyos valores medios conforman la información disponible) cumpliendo con la condición de normalización (II.2.6). Es importante recalcar que este conjunto de operadores, definido a partir de la Ec. (II.3.3) no es en general un conjunto de observables que conmutan. Por lo tanto, la construcción de un espacio de Hilbert apropiado no es una tarea sencilla^{12,13}. Un punto importante en este contexto es la definición de la operación "traza" que se utiliza en las Ecs.(II.1.7) y (II.2.4) cuando se consideran operadores no-ligados como \hat{p} y \hat{q} . Como es bien conocido, un operador densidad $\hat{\rho}(\hat{p}, \hat{q})$ presenta cierto grado de arbitrariedad en su definición o introduce probabilidades negativas¹². Ambas características son manifestaciones externas que remarcan la imposibilidad de medir simultáneamente observables que no conmutan. El problema, entonces, se circunscribe a encontrar una definición de traza que sea convergente¹⁴.

Este capítulo tendrá fundamentalmente dos objetivos: (a) encontrar una manera de construir subespacios del espacio de Hilbert, cuyo operador densidad esté bien definido, en el caso en que el problema contenga operadores que no conmutan (en particular \hat{p} y \hat{q}), analizando las perturbaciones que este método introduce en la dinámica del sistema y (b) estudiar la relación entre los multiplicadores de Lagrange y los valores medios de los observables (denominada "termodinámica" del problema por ser similar a las relaciones de la termodinámica), establecida por la Ec. (II.2.9), dado que estas no se pueden calcular si se considera el espacio de Hilbert total¹⁵.

El método que se sigue es el de redefinir nuestro problema de forma tal de tratar con un número finito de estados accesibles. Esto implica realizar una proyección del

correspondiente espacio de Hilbert infinito H en un subespacio finito. De acuerdo con el principio de Rayleigh¹⁶, un sistema continuo puede siempre ser aproximado por un sistema finito, de forma que los autovalores y autofunciones del sistema real sean estimados por un número finito de autovalores y autofunciones del sistema continuo. Esta formulación nos permite resolver el problema antes mencionado introduciendo efectos de borde que deberán ser evaluados. Estos están fuertemente relacionados con la base particular elegida, y por lo tanto con la estructura particular de $\hat{\rho}(\hat{p}, \hat{q})$.

IV.2 Aproximación para operadores no-ligados

A los efectos de encontrar una teoría que permita definir correctamente la operación de traza para operadores no-ligados se trabajará en la representación matricial de los operadores. Sea entonces un Hamiltoniano \hat{H} y una base B del espacio de Hilbert H en la cual el Hamiltoniano es diagonal. La representación matricial de \hat{H} será

$$\underline{H}^0 = \text{diag}(h_0, \dots, h_j, \dots), \quad (\text{IV.2.1})$$

donde el supraíndice cero indica que la matriz es diagonal. Además, cualquier operador que conmute con \hat{H} estará representado por una matriz diagonal (o una matriz diagonal por bloques si el Hamiltoniano es degenerado). Analizando la ecuación (II.3.3) se concluye que todo operador capaz de describir la evolución temporal del sistema será no-diagonal (en la base del Hamiltoniano).

Todo operador puede expresarse en forma matricial como

$$Q_i = Q_i' + Q_i'' \quad (\text{IV.2.2})$$

donde Q_i' y Q_i'' son matrices diagonales y nodiagonales respectivamente. Además, Q_i'' puede expresarse como (interesan solo operadores Hermíticos)

$$Q_i'' = Q_{\alpha i} + Q_{\beta i}, \quad (\text{IV.2.3})$$

donde $Q_{\alpha i}$ es una matriz real y simétrica y $Q_{\beta i}$ es antisimétrica e imaginaria. Para simplificar los cálculos, y sin pérdida de generalidad, se escribirá a $Q_{\alpha i}$ y $Q_{\beta i}$ como suma de matrices con solo una diagonal secundaria distinta de cero, $Q_{\alpha i}^k$, $Q_{\beta i}^k$, donde el supraíndice k indica la distancia a la diagonal principal. Luego

$$Q_{\alpha i} = \sum_{k \geq 1} Q_{\alpha i}^k, \quad Q_{\beta i} = \sum_{k \geq 1} Q_{\beta i}^k. \quad (\text{IV.2.4})$$

Consideremos ahora el caso en que el espacio de Hilbert H se proyecta en el subespacio G_N de dimensión N (la dimensión de H es infinita o L con $L \gg N$). Supongamos que se tiene un Hamiltoniano que es diagonal en la base del operador \hat{N}

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (\text{IV.2.5})$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (\text{IV.2.6})$$

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (\text{IV.2.7})$$

y también que es posible hallar una realización Hermítica de \hat{H} en término de n -uplas de \hat{a}^\dagger y \hat{a} . Esta realización no puede reordenarse usando técnicas normales de ordenamiento. De hecho, cualquier cálculo que utilice las relaciones de conmutación debe realizarse antes de tomar la representación de la estructura algebraica en el espacio proyectado, porque realizaciones diferentes obtenidas por este procedimiento son asociadas con diferentes representaciones. Debe recordarse que las relaciones de conmutación no se conservan cuando el espacio de Hilbert completo se proyecta en uno más reducido.

El proceso de proyección se expresa matemáticamente por la condición

$$\hat{a}^\dagger |N-1\rangle = 0 \quad (\text{IV.2.8})$$

y la representación, originalmente diagonal, de \hat{H} en H se transforma en G_N a

$$\underline{H}_N^j = \begin{pmatrix} \text{diag}(h_0, h_1, \dots, h_{N-j-1}) & \mathcal{Q}_{(N-j-1) \times j} \\ \mathcal{Q}_j \times (N-j-1) & \text{diag}(h'_{N-j}, h'_{N-j+1}, \dots, h'_{N-1}) \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.2.9})$$

donde la matriz \underline{H}_N^j ha sido dividida en dos bloques, la dimensión de la matriz diagonal inferior está definida por j , el número de operadores \hat{a}^+ contiguos que tiene en su representación en términos de \hat{a}^+ y \hat{a} , es decir,

$$\hat{a}^+ \hat{a}^+ \dots \hat{a}^+ \text{ (j veces) }. \quad (\text{IV.2.10})$$

La prima sobre los términos h_j indica que los autovalores de la energía son afectados por el proceso de proyección.

Hasta aquí se han definido dos tipos de índices diferentes, llamados k y j . El índice j depende de la realización Hermitiana de \hat{H} en términos de n -uplas de \hat{a}^+ y \hat{a} , mientras que k depende de la estructura de los \hat{O}_i . Estos índices satisfacen las condiciones

$$j \leq N, \quad (\text{IV.2.11})$$

y

$$k \leq N-1. \quad (\text{IV.2.12})$$

Cuando se aplica la Ec. (II.3.3) a una representación en H cada \mathcal{Q}_α^k genera otro \mathcal{Q}_β^k que cumple

$$[\mathcal{Q}_\alpha^k, \mathcal{Q}_\beta^k] = i \hbar \mathcal{Q}_\delta^0, \quad (\text{IV.2.13})$$

donde Q_8^0 es una matriz diagonal. En cambio, en el subespacio proyectado G_N las relaciones de conmutación resultan

$$[H_N^j, Q_{\alpha N}^k]_- = [H^j, Q_{\alpha}^k]_- \cdot N + i P_{\beta}^j(Q_{\alpha}^k), \quad (\text{IV.2.14})$$

$$[H_N^j, Q_{\beta N}^k]_- = [H^j, Q_{\beta}^k]_- \cdot N + i P_{\alpha}^j(Q_{\beta}^k), \quad (\text{IV.2.15})$$

con

$$[P^j(Q^k)]^+ = P^j(Q^k), \quad (\text{IV.2.16})$$

y los P^j tienen la estructura

$$P_{\alpha}^j(Q_{\beta}^k) = \begin{pmatrix} Q_{(N-j-k) \times (N-j-k)} & Q_{(N-j-k) \times k} & Q_{(N-j-k) \times j} \\ Q_{k \times (N-j-k)} & Q_{k \times k} & \text{diag}(p_1, p_2, \dots, p_j) \\ Q_{j \times (N-j-k)} & \text{diag}(p_1, p_2, \dots, p_j) & Q_{k \times k} \end{pmatrix} \quad (\text{IV.2.17})$$

y

$$P_{\beta}^j(Q_{\alpha}^k) = i \begin{pmatrix} Q_{(N-j-k) \times (N-j-k)} & Q_{(N-j-k) \times k} & Q_{(N-j-k) \times j} \\ Q_{k \times (N-j-k)} & Q_{k \times k} & \text{diag}(p_1, p_2, \dots, p_j) \\ Q_{j \times (N-j-k)} & \text{diag}(-p_1, -p_2, \dots, -p_j) & Q_{k \times k} \end{pmatrix} \quad (\text{IV.2.18})$$

tal que

$$[P_{\beta}^j(Q_{\alpha}^k), P_{\alpha}^j(Q_{\beta}^k)] = i \begin{pmatrix} Q_{(N-j) \times (N-j)} & Q_{(N-j) \times j} \\ Q_{j \times (N-j)} & \text{diag}(p_1^2, p_2^2, \dots, p_j^2) \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.2.19})$$

En la próxima sección se analizarán los efectos que producen los operadores \hat{P}^j , que son la manifestación de la aproximación realizada.

IV.3 Efectos de borde dependientes del tiempo

Para relacionar estos resultados con el operador densidad, se considerará un Hamiltoniano de una dimensión $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})$ y los operadores no-ligados \hat{p} y \hat{q} . Para fijar ideas se supondrá que la relación (II.3.3) es satisfecha por el conjunto $\{ \hat{O}_j \} = \{ \hat{I}, \hat{q}, \hat{p} \}$. Luego, de acuerdo con la ecuación (II.2.5), la matriz densidad resulta

$$\hat{\rho} = \exp(-\lambda_0 \hat{I} - \lambda_1 \hat{q} - \lambda_2 \hat{p}), \quad (\text{IV.3.1})$$

y, para $t=t_0$, se toma (Ec. (II.2.4))

$$\langle \hat{q} \rangle_{t_0} = q_0, \quad \langle \hat{p} \rangle_{t_0} = p_0. \quad (\text{IV.3.2})$$

Los multiplicadores de Lagrange, λ , se determinan de forma tal de cumplir con la ecuación (IV.3.2) si las trazas son convergentes. Pero los dominios de \hat{p} y \hat{q} son, por definición, no-ligados^{12,13} y por lo tanto el problema a resolver es hallar una definición de la operación traza que sea convergente.

En la solución de este problema se estudiará el caso particular del Hamiltoniano del oscilador armónico. Usando técnicas de segunda cuantificación, se tiene

$$\hat{q} = \gamma_1 (\hat{a}^+ + \hat{a}), \quad (\text{IV.3.3})$$

$$\hat{p} = i \gamma_2 (\hat{a}^+ - \hat{a}), \quad (\text{IV.3.4})$$

$$\gamma_1 = \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \omega}}, \quad (\text{IV.3.5})$$

$$\gamma_2 = \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}}. \quad (\text{IV.3.6})$$

La matriz densidad expresada en la Ec. (IV.3.1) puede reescribirse como

$$\hat{\rho} = \exp(-\lambda_0 \hat{I} - \mathbb{C}^* \hat{a}^+ - \mathbb{C} \hat{a}), \quad (\text{IV.3.7})$$

donde

$$\mathbb{C} = \lambda_1 \gamma_1 - i \lambda_2 \gamma_2, \quad (\text{IV.3.8})$$

$$\mathbb{C}^+ = \lambda_1 \gamma_1 + i \lambda_2 \gamma_2, \quad (\text{IV.3.9})$$

$$\mathbb{C} = \Lambda \exp(i \theta), \quad (\text{IV.3.10})$$

$$\theta = \text{arctg} \left(\frac{\lambda_2 \gamma_2}{\lambda_1 \gamma_1} \right). \quad (\text{IV.3.11})$$

El objetivo es calcular la función e^{λ_0} y los multiplicadores de Lagrange que componen la matriz densidad. A tal efecto se considera el espacio de Hilbert proyectado G_N , formado por N autovectores del Hamiltoniano del oscilador armónico

$$G_N = G \{ |0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle \}, \quad (\text{IV.3.12})$$

donde

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn}, \quad \forall m, n \leq N-1 \quad (\text{IV.3.13})$$

y también

$$\hat{a}_N^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad 0 < n < N-2, \quad (\text{IV.3.14})$$

$$\hat{a}_N^+ |N-1\rangle = 0, \quad (\text{IV.3.15})$$

$$\hat{a}_N |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad 0 < n < N-1, \quad (\text{IV.3.16})$$

$$\hat{a}_N |0\rangle = 0, \quad (\text{IV.3.17})$$

donde \hat{a}_N^+ y \hat{a}_N son los operadores de creación y destrucción que actúan en el subespacio proyectado G_N . Para este subespacio se tiene la matriz tridiagonal simétrica de traza nula y dimensión $N \times N$,

$$Q_N = \gamma_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & & 0 \\ & & & 0 & \sqrt{N-1} \\ 0 & & 0 & \sqrt{N-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.3.18})$$

y la matriz tridiagonal antisimétrica de traza nula y dimensión $N \times N$,

$$P_N = i \gamma_2 \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & 0 \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & & 0 \\ & & & 0 & -\sqrt{N-1} \\ 0 & & 0 & \sqrt{N-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.3.19})$$

donde el subíndice N significa que la representación matricial en el espacio de Hilbert proyectado G_N y γ_1, γ_2 están determinados por las ecuaciones (IV.3.5) y (IV.3.6). Las ecuaciones (IV.3.18-19) muestran que \hat{p}_N y \hat{q}_N son operadores del tipo $k=1$, y por lo tanto utilizando las ecuaciones (IV.2.2) y (IV.2.3) se puede definir

$$Q_1 \equiv Q_1'' \equiv q_N \equiv Q_{\alpha 1}^1, \quad (\text{IV.3.20})$$

$$Q_2 \equiv Q_2'' \equiv p_N \equiv Q_{\beta 2}^1. \quad (\text{IV.3.21})$$

Se le ha otorgado a los operadores $\{\hat{p} \text{ y } \hat{q}\}$ una representación matricial unívoca en G_N . Para obtener la evolución temporal de $\langle \hat{p}_N \rangle$ y $\langle \hat{q}_N \rangle$ se utilizará la ecuación (II.3.6) y la estructura matricial de la nueva álgebra se incorporará a través de la ecuación (II.3.3). La suposición que se realizará será asociar $\langle \hat{p}_N \rangle$ y $\langle \hat{q}_N \rangle$ con los valores medios medidos $\langle \hat{p} \rangle$ y $\langle \hat{q} \rangle$. Como se verá luego, esta hipótesis se justifica para valores de N grandes.

Usando la ecuación (II.3.3), la relación de conmutación en G_N es

$$[q_N, p_N] = i \hbar \begin{pmatrix} \text{diag}(1,1,\dots,1) & Q_{(N-1) \times 1} \\ Q_{1 \times (N-1)} & -(N-1) \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.3.22})$$

y la representación matricial del Hamiltoniano del oscilador armónico resulta

$$H^0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \text{diag}[1,3,5,\dots,2l+1,\dots,2(N-2)+1,N-1]. \quad (\text{IV.3.23})$$

Utilizando la ec. (II.3.3) se obtiene

$$[H_N, q_N] = (-i \hbar / m)(p_N + \underline{A}_N^{(1)}), \quad (\text{IV.3.24})$$

$$[H_N, p_N] = i \hbar m \omega (q_N + \underline{A}_N^{(2)}), \quad (\text{IV.3.25})$$

donde

$$\underline{A}_N^{(1)} = \frac{1}{2} i \gamma_2 [N \sqrt{N-1}] \begin{pmatrix} Q_{(N-2) \times (N-2)} & Q_{(N-2) \times 1} & Q_{(N-2) \times 1} \\ Q_{1 \times (N-2)} & 0 & 1 \\ Q_{1 \times (N-2)} & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.3.26})$$

$$\underline{A}_N^{(2)} = \frac{1}{2} i \gamma_1 [N \sqrt{N-1}] \begin{pmatrix} Q_{(N-2) \times (N-2)} & Q_{(N-2) \times 1} & Q_{(N-2) \times 1} \\ Q_{1 \times (N-2)} & 0 & 1 \\ Q_{1 \times (N-2)} & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.3.27})$$

Se observa que $\underline{A}_N^{(1)}$ y $\underline{A}_N^{(2)}$ son matrices cuadradas de $N \times N$ ($j=1, k=1$), con solo cuatro elementos distintos de cero, y con la forma de las matrices de spin σ_y y σ_x , respectivamente. Se define entonces (ver Ecs. (IV.2.2), (IV.2.3), (IV.2.14), (IV.2.15), (IV.2.16), (IV.2.17) y (IV.2.18))

$$Q_3 \equiv Q_3'' \equiv (-\hbar/m) \underline{A}_N^{(1)} \equiv Q_{\beta_3}^1 \equiv P_{\beta}^1(Q_{\alpha_1}^1), \quad (\text{IV.3.28})$$

$$Q_4 \equiv Q_4'' \equiv -\hbar m \omega^2 \underline{A}_N^{(2)} \equiv Q_{\alpha_4}^1 \equiv P_{\alpha}^1(Q_{\beta_2}^1), \quad (\text{IV.3.29})$$

y finalmente se obtiene

$$[H_N, \underline{A}_N^{(1)}] = i \hbar \frac{N-2}{2} m \omega^2 \underline{A}_N^{(2)}, \quad (\text{IV.3.30})$$

$$[H_N, \underline{A}_N^{(2)}] = (-i \hbar / m) \frac{N-2}{2} \underline{A}_N^{(1)}. \quad (\text{IV.3.31})$$

Se ha reemplazado entonces el conjunto de operadores relevantes $\{\hat{O}_j\} = \{\hat{1}, \hat{p}, \hat{q}\}$ pertenecientes al espacio de Hilbert general (en este caso infinito), por un conjunto equivalente $\{\hat{1}_N, \hat{p}_N, \hat{q}_N, \underline{A}_N^{(1)}, \underline{A}_N^{(2)}\}$ en el espacio proyectado finito G_N .

Mediante el principio de máxima entropía, es posible evaluar la nueva matriz densidad

$$\ln \hat{\rho}_N(t) = -\lambda_0 - \lambda_1 \hat{q}_N - \lambda_2 \hat{p}_N - \lambda_3 \hat{A}_N^{(1)} - \lambda_4 \hat{A}_N^{(2)}, \quad (\text{IV.3.32})$$

donde se ha utilizado la representación de operadores proyectados y su álgebra asociada.

La nueva matriz \underline{G} , en el espacio G_N , tiene los siguientes elementos no nulos

$$g_{12} = m \omega^2, \quad (\text{IV.3.33})$$

$$g_{21} = g_{31} = -1/m, \quad (\text{IV.3.34})$$

$$g_{42} = -m \omega^2, \quad (\text{IV.3.35})$$

$$g_{34} = -m \frac{N-2}{2}, \quad (\text{IV.3.36})$$

$$g_{43} = m \omega^2 \frac{N-2}{2}, \quad (\text{IV.3.37})$$

Con esta matriz \underline{G} es posible calcular las evoluciones temporales de los operadores proyectados utilizando el teorema de Ehrenfest (II.3.6), obteniéndose

$$\langle \hat{q}_N \rangle_t = \langle \hat{q}_N \rangle_0 \cos(\omega t) + \frac{\langle \hat{p}_N \rangle_0}{m\omega} \sin(\omega t) + \quad (\text{IV.3.38})$$

$$+ \frac{2}{N} \left\{ \frac{\langle \hat{A}_N^{(1)} \rangle_0}{m\omega} [\sin(\omega t) + \sin(\omega' t)] - \langle \hat{A}_N^{(2)} \rangle_0 [\cos(\omega t) - \cos(\omega' t)] \right\},$$

$$\langle \hat{p}_N \rangle_t = \langle \hat{p}_N \rangle_0 \cos(\omega t) - \langle \hat{q}_N \rangle_0 m\omega \sin(\omega t) +$$

$$(\text{IV.3.39})$$

$$+ \frac{2}{N} \left\{ \langle \hat{A}_N^{(2)} \rangle_0 m\omega [\sin(\omega t) + \sin(\omega' t)] + \langle \hat{A}_N^{(1)} \rangle_0 [\cos(\omega t) - \cos(\omega' t)] \right\},$$

$$\langle \hat{A}_N^{(1)} \rangle_t = \langle \hat{A}_N^{(1)} \rangle_0 \cos(\omega't) - \langle \hat{A}_N^{(2)} \rangle_0 m\omega \sin(\omega't) , \quad (\text{IV.3.40})$$

$$\langle \hat{A}_N^{(2)} \rangle_t = \langle \hat{A}_N^{(2)} \rangle_0 \cos(\omega't) + \frac{\langle \hat{A}_N^{(1)} \rangle_0}{m\omega} \sin(\omega't) , \quad (\text{IV.3.41})$$

donde

$$\omega' = \frac{N-2}{2} \omega , \quad (\text{IV.3.42})$$

Si

$$\langle \hat{q}_N \rangle_0, \frac{\langle \hat{p}_N \rangle_0}{m\omega} \gg \frac{2}{N} \frac{\langle \hat{A}_N^{(1)} \rangle_0}{m\omega} , \frac{2}{N} \langle \hat{A}_N^{(2)} \rangle_0 \quad (\text{IV.3.43})$$

se reobtienen los resultados clásicos. Para $N = 2$, \underline{H}_2 es proporcional a la matriz identidad, p_2 y q_2 conmutan con él, y por lo tanto sus valores medios son constantes. Para $N=4$, la frecuencia ω' , que representa los efectos de borde es igual a la frecuencia del oscilador ω . Esto ilustra el hecho que para N pequeños los efectos de borde pueden ser muy importantes. Se hará una discusión detallada de este punto en la sección IV.6.

La evolución temporal de los multiplicadores de Lagrange resulta (ver Ec. (II.3.4))

$$\lambda_0 = \lambda_{00} , \quad (\text{IV.3.44})$$

$$\lambda_1(t) = \lambda_{10} \cos(\omega t) + m\omega \lambda_{20} \sin(\omega t) , \quad (\text{IV.3.45})$$

$$\lambda_2(t) = \lambda_{20} \cos(\omega t) - \frac{\lambda_{10}}{m\omega} \sin(\omega t) , \quad (\text{IV.3.46})$$

$$\lambda_3(t) = \lambda_{30} \cos(\omega't) - \frac{\lambda_{40}}{m\omega} \text{sen}(\omega't) + \quad (\text{IV.3.47})$$

$$+ \frac{2}{N} \left\{ \lambda_{20} [\cos(\omega t) - \cos(\omega't)] - \frac{\lambda_{10}}{m\omega} [\text{sen}(\omega t) + \text{sen}(\omega't)] \right\},$$

$$\lambda_4(t) = \lambda_{40} \cos(\omega't) + \lambda_{30} m\omega \text{sen}(\omega't) + \quad (\text{IV.3.48})$$

$$+ \frac{2}{N} \left\{ \lambda_{10} [\cos(\omega't) - \cos(\omega t)] - \lambda_{20} m\omega [\text{sen}(\omega t) + \text{sen}(\omega't)] \right\}.$$

La entropía del sistema es una constante de movimiento y por lo tanto se la puede expresar en términos de las condiciones iniciales

$$S = \sum_{i=0}^4 \lambda_i(t) \langle \hat{O}_{N_i} \rangle_t = \sum_{i=0}^4 \lambda_{i0} \langle \hat{O}_{N_i} \rangle_0. \quad (\text{IV.3.49})$$

Para completar la solución del problema es necesario calcular explícitamente el valor de los multiplicadores de Lagrange tal como lo indica la Ec. (II.2.9). Esto se hará en la próxima sección.

IV.4 Cálculo de los multiplicadores de Lagrange

Para el caso que estamos considerando, los valores medios de dos de los operadores relevantes, $\langle \hat{A}_N^{(1)} \rangle$ y $\langle \hat{A}_N^{(2)} \rangle$, aparecen como resultado de considerar un subespacio G_N y de aplicar el cierre del álgebra (Ec. II.3.3). Por lo tanto ellos no forman parte del espacio físico original. Es por ello que podemos considerar

$$\lambda_{30} = \lambda_{40} = 0, \quad t = t_0 \quad (\text{IV.4.1})$$

dado que de acuerdo con el principio de máxima entropía no existe información

relacionada con los operadores $\hat{A}_N^{(1)}$ y $\hat{A}_N^{(2)}$. Por lo tanto, las condiciones iniciales son

$$\langle \hat{q}_N \rangle_0 = q_0, \quad (\text{IV.4.2})$$

$$\langle \hat{p}_N \rangle_0 = p_0, \quad (\text{IV.4.3})$$

$$\langle \hat{I}_N \rangle_0 = 1, \quad (\text{IV.4.4})$$

y la matriz densidad a $t=0$ resulta

$$\ln \hat{\rho}_N(0) = -\lambda_0^0 \hat{I}_N - \lambda_1^0 \hat{q}_N - \lambda_2^0 \hat{p}_N. \quad (\text{IV.4.5})$$

Es de notar que los supraíndices y subíndices cero indican que se consideran las condiciones iniciales dadas por las Ecs. (IV.4.2-4) y por la Ec. (IV.4.1). Es decir que las condiciones iniciales son "mixtas", una parte sobre los valores medios y otra sobre los multiplicadores de Lagrange.

Para poder calcular explícitamente el multiplicador λ_0 , y obtener los valores medios a través de la Ec. (II.2.9), es necesario diagonalizar la matriz

$$\begin{aligned} \omega_N &= -\lambda_1^0 \hat{q}_N - \lambda_2^0 \hat{p}_N \\ &= C^* \hat{a}_N^+ + C \hat{a}_N \\ &= \Lambda [\exp(-i\theta) \hat{a}_N^+ + \exp(i\theta) \hat{a}_N] \end{aligned} \quad (\text{IV.4.6})$$

donde C y C^* fueron definidos en las ecuaciones (IV.3.8-10). Trabajando en el plano λ , θ es posible escribir el problema de autovalores como

$$\det(\omega_N - \alpha_j \hat{I}_N) = F(N, \alpha_j) = 0, \quad j=1,2,\dots,N, \quad (\text{IV.4.7})$$

donde N es el número de autoestados y α_j los autovalores de $\underline{\omega}_N$, es decir las N raíces de F . La Ec. (IV.4.7) puede llevarse a una expresión recursiva del tipo

$$F(N, \alpha_j) = -\alpha_j F(N-1, \alpha_j) - (N-1) \Lambda^2 F(N-2, \alpha_j), \quad N > 2. \quad (\text{IV.4.8})$$

Para $N \leq 2$ se obtiene

$$F(0, \alpha_j) = 1, \quad (\text{IV.4.9})$$

$$F(1, \alpha_j) = -\alpha_j, \quad (\text{IV.4.10})$$

$$F(2, \alpha_j) = \alpha_j^2 - \Lambda^2. \quad (\text{IV.4.11})$$

Utilizando estas propiedades es fácil demostrar que las funciones $F(N, \alpha_j)$ están relacionadas con los polinomios de Hermite, \bar{H}_N ,

$$F(N, \alpha_j) = (-\Lambda)^N 2^{-N/2} \bar{H}_N(\alpha_j / \Lambda \sqrt{2}). \quad (\text{IV.4.12})$$

Los $F(N, \alpha_j)$ son generados por la ecuación

$$F(N, \alpha_j) = \Lambda^{2N} \exp(\alpha_j / 2 \Lambda^2) \frac{d[\exp(-\alpha_j / 2 \Lambda^2)]^N}{d\alpha_j^N}, \quad (\text{IV.4.13})$$

y por lo tanto las ecuaciones (IV.4.8-11) se transforman en las relaciones de recurrencia conocidas para los polinomios de Hermite. Definiendo

$$\mu_j = \alpha_j / \Lambda \quad (\text{IV.4.14})$$

y reemplazando en las Ec. (IV.4.8-11) se obtienen ecuaciones adimensionales y se definen estos polinomios adimensionales como

$$H_N(\mu_j) = (-\Lambda)^{-N} F(N, \alpha_j). \quad (\text{IV.4.15})$$

Utilizando la ecuación (IV.4.8) se obtiene la solución de la Ec. (IV.4.5)

$$\exp(\lambda_0^0) = \sum_{j=1}^N \exp(-\mu_j \Lambda), \quad (\text{IV.4.16})$$

donde $\mu_j \Lambda$ es la j -ésima raíz de $F(N, \alpha_j)$. Es importante notar que λ_0^0 es una función de Λ , pero no de θ . De las ecuaciones (IV.4.8) y (IV.4.15) se puede demostrar que si μ_j es raíz de H_N , $-\mu_j$ también lo es. La figura 3 muestra las diferentes raíces para $N < 26$. También, por las propiedades de los polinomios de Hermite, las raíces μ_j son todas diferentes y dependen solo de la dimensión del espacio de Hilbert N . Estas tienen un valor máximo, μ_{MAX} , que satisface la relación

$$\mu_{\text{MAX}} < N \quad (\text{IV.4.17})$$

para cada N .

La función de partición resulta

$$\exp(\lambda_0^0) = 2 \sum_{\mu_j > 0} \cosh(\mu_j \Lambda), \quad \text{si } N \text{ es par}, \quad (\text{IV.4.18})$$

y

$$\exp(\lambda_0^0) = 1 + 2 \sum_{\mu_j > 0} \cosh(\mu_j \Lambda), \quad \text{si } N \text{ es impar}. \quad (\text{IV.4.19})$$

La solución de la ecuación de autovalores de $\underline{\omega}_N$ (Ec. (IV.4.7)) es

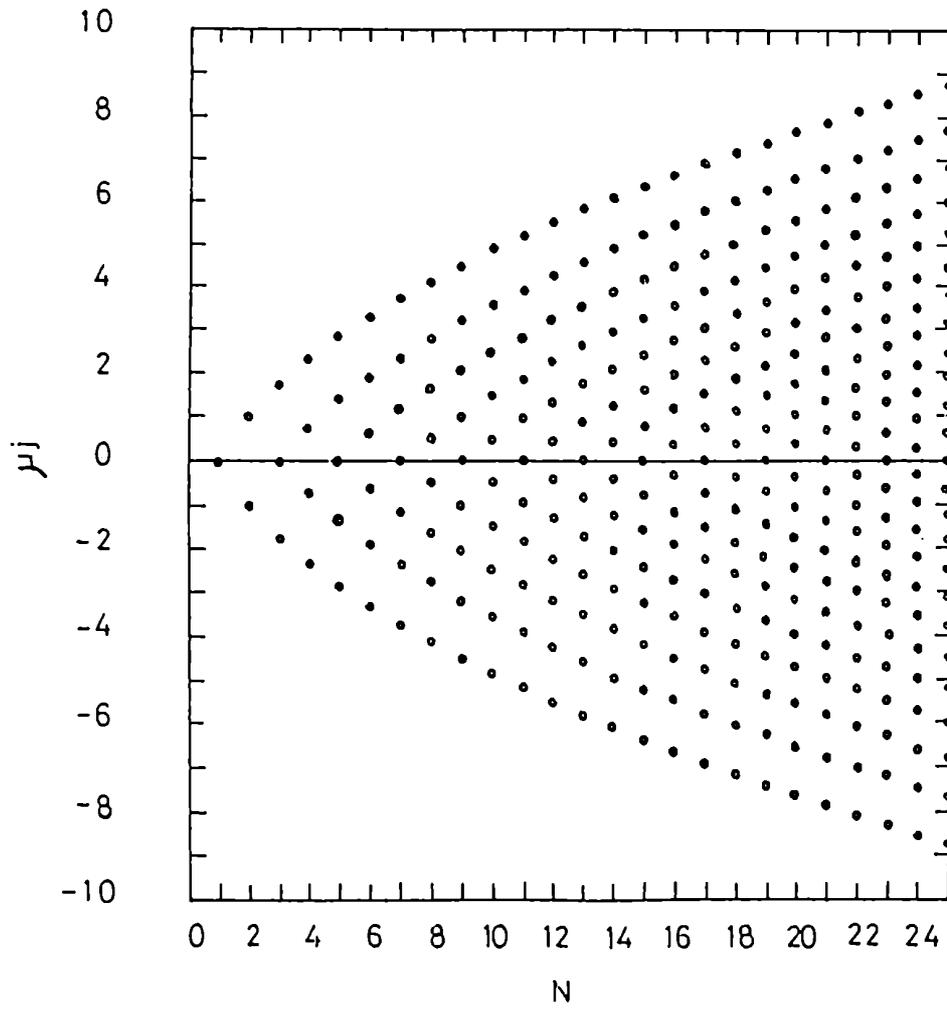


Figura 3: Raíces de H_N , μ_j , para $N < 26$.

$$\omega_N |\mu_j, \Lambda, \theta\rangle = \mu_j \Lambda |\mu_j, \Lambda, \theta\rangle, \quad (\text{IV.4.20})$$

donde

$$|\mu_j, \Lambda, \theta\rangle = \frac{\sum_{k=0}^{N-1} \exp(-i \theta k) a_k^j |k\rangle}{\sqrt{\sum_{k=0}^{N-1} |a_k^j|^2}}, \quad (\text{IV.4.21})$$

y por la Ec. (IV.4.15)

$$a_k^j = \frac{H_k(\mu_j)}{\sqrt{k!}}. \quad (\text{IV.4.22})$$

El ket $|k\rangle$ es la autofunción del oscilador armónico y k su correspondiente autovalor. De las ecuaciones (IV.4.15-15) y (IV.4.21), es fácil de ver que los autovalores dependen solo de Λ y las autofunciones de θ .

De la Ec. (IV.4.6) se observa que si λ_1^0 o λ_2^0 son cero, ω_N es proporcional a p_N o q_N respectivamente. Es por ello que si $\lambda_2^0=0$, por la Ec. (IV.3.11), se tiene $\theta = 0, \pi$ (o $n\pi$) y luego la Ec. (IV.4.21) lleva a

$$|\mu_j, n \pi\rangle = |q_N\rangle = \frac{\sum_{k=0}^{N-1} (-1)^k a_k^j |k\rangle}{\sqrt{\sum_{k=0}^{N-1} |a_k^j|^2}}. \quad (\text{IV.4.23})$$

Si se compara la Ec. (IV.4.23) con la expresión usual de $|q\rangle$ en términos de los kets $|k\rangle$ del oscilador armónico,

$$\begin{aligned}
|q\rangle &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k k!}{(2\pi\gamma_1^2)^{-1/4}} \exp(-q^2/4\gamma_1^2) \bar{H}_k(q/\sqrt{2}\gamma_1) |k\rangle \\
&= \frac{\exp(-q^2/4\gamma_1^2)}{(2\pi\gamma_1^2)^{-1/4}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{H_k(q/\gamma_1) |k\rangle}{\sqrt{k!}} \\
&= \frac{\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k a_k^j |k\rangle}{\sqrt{\sum_{k=0}^{\infty} |a_k^j|^2}}, \tag{IV.4.24}
\end{aligned}$$

se encuentra que los coeficientes asociados a $|k\rangle$ son todos iguales, excepto por el factor de normalización. Luego, $|\mu_j, n \pi\rangle = |q_N\rangle$ es la proyección de $|q\rangle$ en el espacio finito G_N . Al comparar las ecuaciones (IV.4.23) y (IV.4.24) se tiene que (con una normalización adecuada)

$$|q\rangle_N = |q_N\rangle, \quad \theta = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{IV.4.25}$$

Un resultado análogo se obtiene para \hat{p} , pero con $\theta = \pi/2, n\pi/2$. Luego se verá que sucede con los operadores \hat{q}^2 y \hat{p}^2 , que son importantes para el cálculo de las dispersiones de \hat{q} y \hat{p} .

El resultado obtenido en el párrafo anterior permite calcular los valores de expectación de los operadores \hat{O}_N^i utilizando

$$\begin{aligned}
\hat{p}_N(0) |\mu_j, \theta\rangle &= \exp(-\lambda_0 \hat{1} - \hat{\omega}_N) |\mu_j, \theta\rangle \\
&= \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda) |\mu_j, \theta\rangle, \tag{IV.4.26}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O}_N^i \rangle_0 &= \text{Tr} [\hat{\rho}_N(0) \hat{O}_N^i] \\
&= \sum_{j=0}^{N-1} \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda) \langle \mu_j; \theta | \hat{O}_N^i | \mu_j; \theta \rangle . \quad (\text{IV.4.27})
\end{aligned}$$

De las ecuaciones (IV.4.20-22), (IV.4.26-27) se tiene

$$\langle \mu_j; \theta | \hat{q}_N | \mu_j; \theta \rangle = 2 \gamma_1 \cos(\theta) \frac{\sum_{k=0}^{N-2} \frac{H_k(\mu_j) H_{k+1}(\mu_j)}{k!}}{\sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{k!}} , \quad (\text{IV.4.28})$$

$$\langle \mu_j; \theta | \hat{p}_N | \mu_j; \theta \rangle = -2 \gamma_2 \text{sen}(\theta) \frac{\sum_{k=0}^{N-2} \frac{H_k(\mu_j) H_{k+1}(\mu_j)}{k!}}{\sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{k!}} , \quad (\text{IV.4.29})$$

$$\langle \mu_j; \theta | \hat{A}_N^{(1)} | \mu_j; \theta \rangle = \gamma_2 \text{sen}(\theta) N \frac{\left(\frac{H_{N-2}(\mu_j) H_{N-1}(\mu_j)}{(N-2)!} \right)}{\sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{k!}} , \quad (\text{IV.4.30})$$

$$\langle \mu_j; \theta | \hat{A}_N^{(2)} | \mu_j; \theta \rangle = \gamma_1 \cos(\theta) N \frac{\left(\frac{H_{N-2}(\mu_j) H_{N-1}(\mu_j)}{(N-2)!} \right)}{\sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{k!}} . \quad (\text{IV.4.31})$$

La relación de recurrencia (IV.4.8) permite demostrar que

$$\mu_j \sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{k!} |k\rangle = 2 \sum_{k=0}^{N-2} \frac{H_k(\mu_j) H_{k+1}(\mu_j)}{k!} \quad (\text{IV.4.32})$$

usando que $H_N(\mu_j) = 0$.

Además, los polinomios de Hermite cumplen la regla de suma

$$\sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k(x) H_k(y)}{k!} = \frac{H_N(x) H_{N-1}(y) - H_{N-1}(x) H_N(y)}{(N-1)! (x-y)}, \quad (\text{IV.4.33})$$

y entonces

$$\lim_{y \rightarrow x} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k(x) H_k(y)}{k!} = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{k!} = \frac{N H_{N-1}(x) H_{N-2}(x)}{(N-2)! x}, \quad (\text{IV.4.34})$$

donde se utilizó la Ec. (IV.4.32), la regla de L'Hospital y la relación de recurrencia

$$H_n'(y) = n H_{n-1}(y). \quad (\text{IV.4.35})$$

Luego reemplazando las Ecs. (IV.4.31) y (IV.4.34) en las ecuaciones (IV.4.27-30), se demuestra que

$$\langle \mu_j; \theta | \hat{q}_N | \mu_j; \theta \rangle = \mu_j \gamma_1 \cos(\theta), \quad (\text{IV.4.36})$$

$$\langle \mu_j; \theta | \hat{p}_N | \mu_j; \theta \rangle = -\mu_j \gamma_2 \sin(\theta), \quad (\text{IV.4.37})$$

$$\langle \mu_j; \tilde{\theta} | \hat{A}_N^{(1)} | \mu_j; \theta \rangle = -\langle \mu_j; \theta | \hat{p}_N | \mu_j; \theta \rangle, \quad (\text{IV.4.38})$$

$$\langle \mu_j; \theta | \hat{A}_N^{(2)} | \mu_j; \theta \rangle = \langle \mu_j; \theta | \hat{q}_N | \mu_j; \theta \rangle. \quad (\text{IV.4.39})$$

De las Ecs. (IV.4.2-4) se concluye que

$$\langle \hat{q}_N \rangle_0 = \langle \hat{A}_N^{(2)} \rangle_0 = q_0, \quad (\text{IV.4.40})$$

$$\langle \hat{p}_N \rangle_0 = - \langle \hat{A}_N^{(1)} \rangle_0 = p_0. \quad (\text{IV.4.41})$$

Además, de las Ecs. (II.2.9) y (IV.4.16) se tiene

$$q_0 = \langle \hat{q}_N \rangle_0 = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_1} = \gamma_1 \cos(\theta) \sum_{j=1}^N \mu_j \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda), \quad (\text{IV.4.42})$$

$$p_0 = \langle \hat{p}_N \rangle_0 = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_2} = \gamma_2 \sin(\theta) \sum_{j=1}^N \mu_j \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda), \quad (\text{IV.4.43})$$

por lo que los valores medios de \hat{q}_N y \hat{p}_N son la suma sobre los autoestados $\mu_j \gamma_1$ y $\mu_j \gamma_2$, respectivamente, pesada por los factores $\cos(\theta) \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda)$ o $\sin(\theta) \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda)$.

Utilizando las ecuaciones (IV.3.11), (IV.4.42) y (IV.4.43) es posible definir

$$\text{tang}(\theta) = -\frac{\gamma_2 \lambda_2^0}{\gamma_1 \lambda_1^0} = -\frac{\gamma_1 p_0}{\gamma_2 q_0} = \text{tang}(\theta_0) \quad (\text{IV.4.44})$$

y

$$\sqrt{\left(\frac{p_0}{\gamma_2}\right)^2 + \left(\frac{q_0}{\gamma_1}\right)^2} = \left| \sum_{j=1}^N \mu_j \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda) \right| \equiv \chi_0(\Lambda). \quad (\text{IV.4.45})$$

Tanto $\chi_0(\Lambda)$ como θ_0 están expresados en términos de las condiciones iniciales de q_N y p_N . Por lo tanto se puede trabajar en el plano de coordenadas polares de multiplicadores

de Lagrange (Λ, θ) definido por la Ec. (IV.3.11) o en este nuevo plano de condiciones iniciales sobre los valores medios (χ_0, θ_0) . El subíndice cero indica que se utilizó la Ec. (IV.4.5) para efectuar el cálculo. Este cambio de variables permite obtener

$$\left| -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \Lambda} \right| = |\langle \mu \rangle| \equiv \chi_0(\Lambda), \quad t = t_0, \quad (\text{IV.4.46})$$

que lleva a interpretar a las raíces μ_j como los autovalores de un operador en el espacio G_N .

Estos resultados pueden relacionarse fácilmente con los de un ensamble canónico, en el sentido que Λ y μ_j actúan como β y e_j , respectivamente. En la figura 4 se muestra el comportamiento de χ_0 versus Λ para distintos valores de N . Finalmente, es de observar que usando la ecuación (IV.4.46), resulta

$$\chi_0 \leq \mu_{\text{MAX}} \quad (\text{IV.4.47})$$

y por lo tanto, por la Ec. (IV.4.17)

$$\chi_0 \leq \mu_{\text{MAX}} \leq N. \quad (\text{IV.4.48})$$

De esta forma, la dimensión de G_N , N , puede estimarse aproximadamente para el caso en que las condiciones iniciales sean dadas por las ecuaciones (IV.4.1-4).

El resultado mas importante de esta sección es el cálculo aproximado de los multiplicadores de Lagrange para una matriz densidad construída con operadores no-ligados. La tarea a realizar será evaluar las propiedades termodinámicas de un sistema como el que se está tratando y finalmente analizar la validez del procedimiento de proyección.

Es de destacar que, a pesar de que se ha ilustrado este procedimiento con el Hamiltoniano del oscilador armónico, este método de proyección tiene un carácter

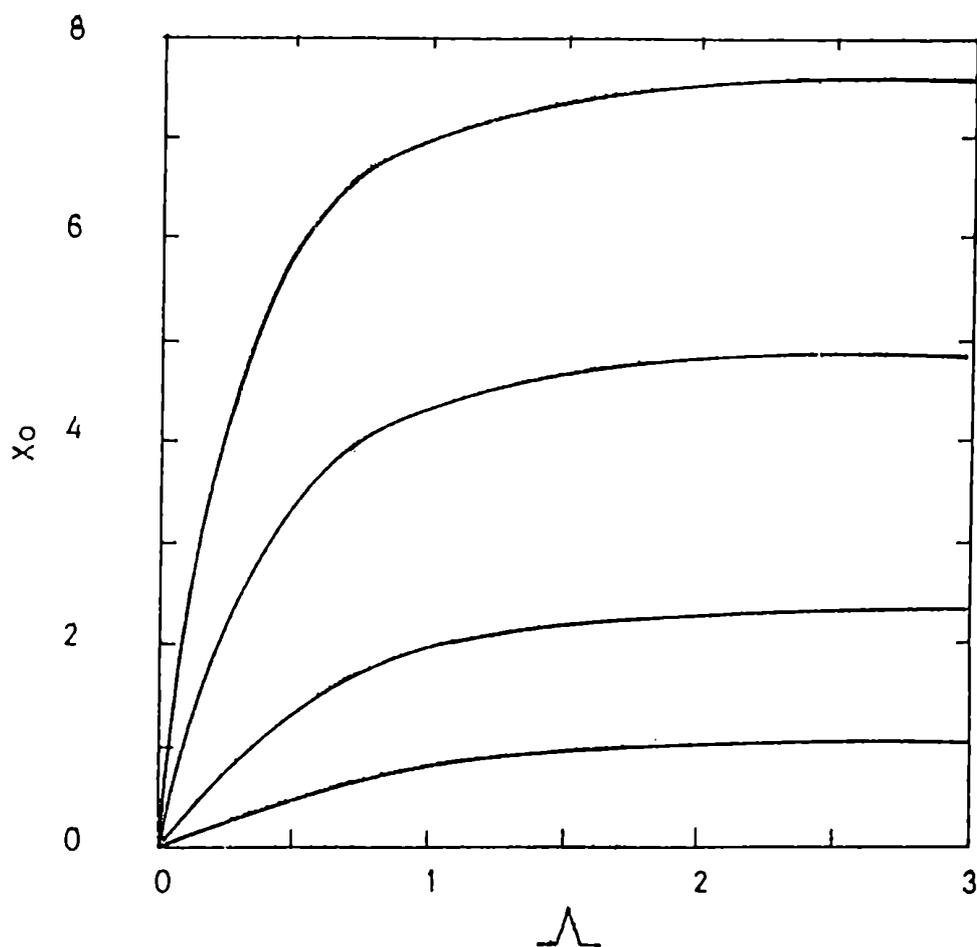


Figura 4: χ_0 versus λ para $N = 2, 4, 10, 20$. Esta figura muestra la relación entre los multiplicadores de Lagrange y los valores medios iniciales.

general, como se ha mostrado en la sección IV.2, ya que el Hamiltoniano particular ha sido utilizado al solo efecto de obtener una expresión concreta para $A^{(1)}$ y $A^{(2)}$. La existencia de este tipo de operadores no es una peculiaridad de este Hamiltoniano sino una consecuencia del hecho de trabajar con un subespacio finito de un espacio de Hilbert infinito.

IV.5 Propiedades termodinámicas

La entropía del sistema descrito en la sección anterior, dada por la Ec. (II.2.3), evaluada en el subespacio G_N a $t = t_0$ es

$$S(t = t_0) = \lambda_0^0 + \lambda_1^0 \langle q_N \rangle_0 + \lambda_2^0 \langle p_N \rangle_0 = S(t) . \quad (\text{IV.5.1})$$

La ecuación (IV.5.1) es una cota superior de la entropía y se la llamará "experimental" ya que ha sido determinada en base a los valores medidos. Como la entropía de Gibbs, la entropía experimental es una constante de movimiento ya que no es más que la entropía del espacio G_N con condiciones iniciales dadas por las ecuaciones (IV.4.1-4). Utilizando las Ecs. (IV.4.16), (IV.4.44-46), se obtiene

$$\begin{aligned} S &= \lambda_0 + \Lambda \langle \mu \rangle = \lambda_0 + \Lambda \chi_0 \\ &= \lambda_0(\Lambda) - \Lambda \frac{\partial \lambda_0}{\partial \Lambda} . \end{aligned} \quad (\text{IV.5.2})$$

El comportamiento de la entropía versus χ_0 o Λ se muestra en las figuras 5 y 6 para distintos valores de N . Por las propiedades de simetría, la entropía no es una función de θ (ver Ec. (IV.4.16)) y la superficie definida por las condiciones iniciales es una cúpula cuyo máximo corresponde a $S = \ln N$ ($\Lambda = 0$ o $\chi_0 = 0$). En ese caso todos los estados son igualmente probables y el sistema se encontrará en un estado estacionario, que en

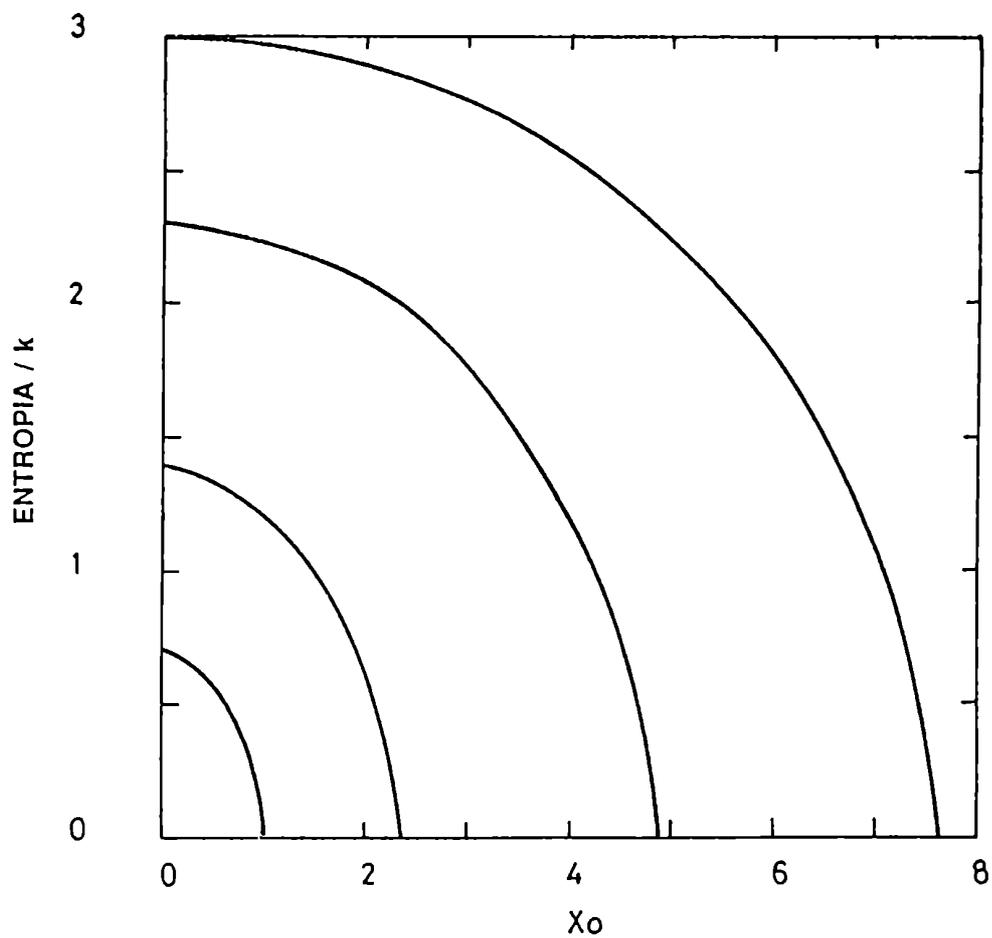


Figura 5: S (en unidades de la constante de Boltzmann) versus χ_0 para $N = 2, 4, 10, 20$.
S toma el máximo valor ($\ln N$) para $\chi_0=0$, y $S=0$ para $\chi_0=\mu_{MAX}$.

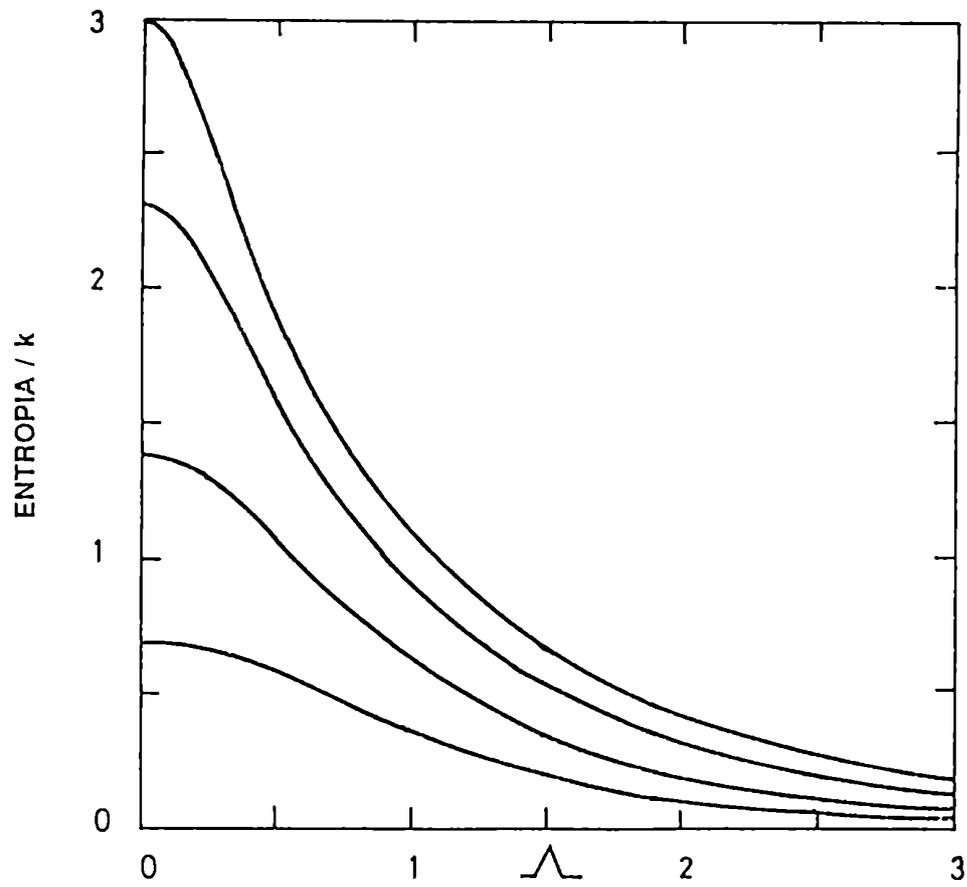


Figura 6: S (en unidades de la constante de Boltzmann) versus χ_0 para $N = 2, 4, 10, 20$.

$S \rightarrow 0$ cuando $\Lambda \rightarrow \infty$.

términos de la teoría de la Información corresponderá a un estado de equilibrio⁴. Para $\Lambda \rightarrow \infty$, $S \rightarrow 0$ y χ_0 toma su proyección máxima, que corresponde a una combinación lineal particular de los N autoestados de \hat{H} , $|k\rangle$ ($k=0, 1, \dots, N-1$). Por ejemplo, (ver Ec. (IV.4.21))

$$N=2: \quad | -1, \theta \rangle = \frac{|0\rangle - \exp(-i\theta) |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (\text{IV.5.3})$$

$$N=3: \quad | -\sqrt{3}, \theta \rangle = \frac{|0\rangle - \sqrt{3} \exp(-i\theta) |1\rangle + \sqrt{2} \exp(-2i\theta) |2\rangle}{\sqrt{6}}. \quad (\text{IV.5.4})$$

La relación entre χ_0 y Λ (Ec. (IV.4.45)) puede asociarse para $N=2$ con la ecuación de estado de un gas paramagnético

$$\chi_0(\Lambda) = \tanh(\Lambda). \quad (\text{IV.5.5})$$

De hecho es la expresión de una magnitud intensiva en términos de una extensiva. Para N grande es posible evaluar otra magnitud termodinámica, el calor específico

$$C_\chi = -\Lambda \cdot \frac{\partial S}{\partial \Lambda}, \quad (\text{IV.5.6})$$

donde Λ actúa como un parámetro de temperatura (β).

Como se indicó en el capítulo anterior, al ser este un sistema con espacio de Hilbert finito, el calor específico muestra el característico efecto Schottky anómalo (ver Fig. 7). El valor máximo de C_χ divide a la curva en dos regiones, correspondientes a orden máximo ($\Lambda \rightarrow \infty$) o desorden máximo ($\Lambda \rightarrow 0$).

Utilizando las Ecs. (IV.4.21) y (IV.4.27) se puede calcular el valor medio de la energía

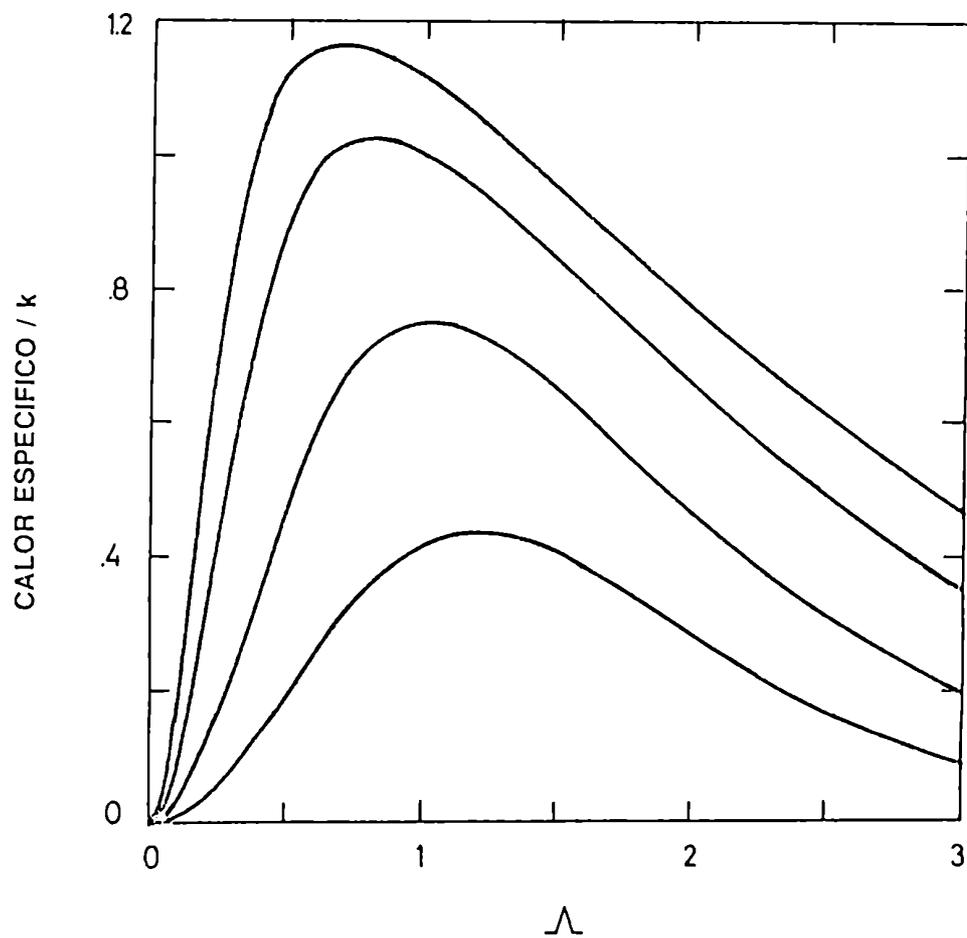


Figura 7: Calor específico (en unidades de la constante de Boltzmann) versus Λ para $N = 2, 4, 10, 20$. El máximo es característico de sistemas finitos (efecto Schottky anómalo).

$$H_N |\mu_j, \theta\rangle = \frac{\sum_{k=0}^{N-1} \epsilon_k \alpha_k^j |k\rangle}{\sqrt{K_j}}, \quad (\text{IV.5.7})$$

donde

$$\alpha_k^j = \exp(-i \theta k) a_k^j \quad (\text{IV.5.8})$$

y

$$\epsilon_k = \begin{cases} (2k+1) \frac{\hbar \omega}{2}, & 0 < k < N-1 \\ (N-1) \frac{\hbar \omega}{2}, & k = N-1; \end{cases} \quad (\text{IV.5.9})$$

$$K_j = \sum_{k=0}^{N-1} |a_k^j|^2. \quad (\text{IV.5.10})$$

Luego,

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_N \rangle_0 &= \text{Tr}(\hat{\rho}_0 \hat{H}_N) \\ &= \exp(-\lambda_0^0) \sum_{j=1}^N \frac{\exp(-\mu_j \Lambda)}{K_j} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon_k |a_k^j|^2 \\ &= \langle (p_N)^2 \rangle \gamma_2^2 + \langle (q_N)^2 \rangle \gamma_1^2 = \langle \hat{H}_N \rangle_t. \end{aligned} \quad (\text{IV.5.11})$$

Con $(O_N)^2$ se desea indicar que la proyección sobre G_N se realizó antes de multiplicar a la matriz por si misma. Luego, desde el punto de vista de la energía, la presencia de

$\langle A_N^{(1),(2)} \rangle$ no es detectable.

En la figura 8 se muestra el comportamiento de $\langle \hat{H}_N \rangle / \hbar \omega$, S y C_χ versus χ_0 . La analogía con el gas paramagnético es evidente. Es interesante observar que para $N \rightarrow \infty$, $\chi(\Lambda)$ puede obtenerse solo para $\Lambda \rightarrow 0$. El estado puro de máxima proyección no puede ser alcanzado. Este resultado ilustra la imposibilidad de obtener $\chi(\Lambda)$ para el espacio de Hilbert original, infinito, H .

IV.6 Efectos del proceso de proyección

En la sección anterior se han resaltado las ventajas de trabajar en el subespacio proyectado G_N , que permite definir una operación de traza convergente para la matriz densidad. No obstante, como se demostró en la sección IV.2, el proceso de proyección conlleva una modificación en el número de operadores relevantes. En esta sección se analizará la influencia de estos nuevos operadores en el cálculo de valores medios y en la dinámica del sistema.

A tal efecto se evaluará el principio de incerteza sobre los autoestados $|k\rangle$ de H^0 . En ese caso se obtiene

$$\Delta^k(p_N) = \sqrt{\langle k | (p_N)^2 | k \rangle - (\langle k | p_N | k \rangle)^2}, \quad (\text{IV.6.1})$$

$$\Delta^k(q_N) = \sqrt{\langle k | (q_N)^2 | k \rangle - (\langle k | q_N | k \rangle)^2}, \quad (\text{IV.6.2})$$

y utilizando las Ecs. (IV.3.18-19),

$$\Delta^k(q_N) \Delta^k(p_N) = \begin{cases} \frac{\hbar(2k+1)}{2}, & 0 < k < N-1 \\ \frac{\hbar(N-1)}{2}; & k = N-1. \end{cases} \quad (\text{IV.6.3})$$

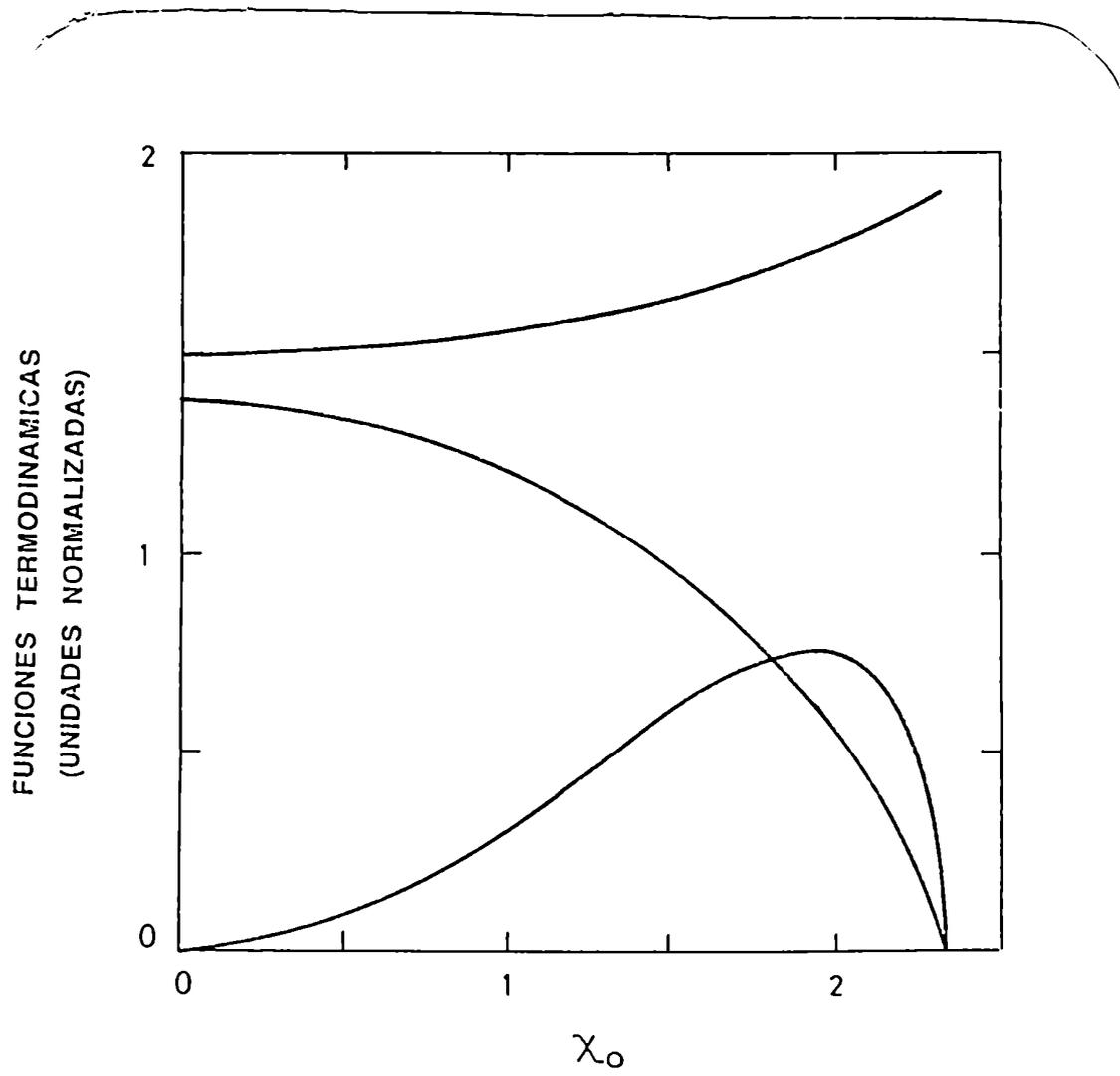


Figura 8: S , $\langle \hat{H}_N \rangle / \hbar \omega$ y C_χ versus χ_0 para $N = 4$.

Además, la desigualdad de Heisenberg provee una cota inferior para el producto de las raíces cuadradas de las dispersiones cuadráticas medias:

$$\Delta^k(q_N) \Delta^k(p_N) \geq \frac{\langle k | [\hat{q}_N, \hat{p}_N] | k \rangle}{2} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (\text{IV.6.4})$$

donde fue utilizada la Ec. (IV.3.22) en la última desigualdad. Las ecuaciones (IV.6.3) y (IV.6.4) demuestran que las dispersiones de q_N y p_N evaluadas en una base de autoestados de \underline{H}^0 satisfacen el principio de incerteza.

Dentro del contexto de la teoría de la información, es interesante evaluar estas dispersiones para los valores medios definidos por la Ec. (IV.4.27),

$$\Delta^0(p_N) = \sqrt{\langle (p_N)^2 \rangle_0 - (\langle p_N \rangle_0)^2}, \quad (\text{IV.6.5})$$

$$\Delta^0(q_N) = \sqrt{\langle (q_N)^2 \rangle_0 - (\langle q_N \rangle_0)^2}. \quad (\text{IV.6.6})$$

Se obtiene

$$\begin{aligned} \text{Tr} [\hat{\rho}_N(0) \hat{q}_N^2] &= \langle \hat{q}_N^2 \rangle_0 = \\ &= \sum_{j=0}^{N-1} \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda) \langle \mu_j; \theta | \hat{q}_N^2 | \mu_j; \theta \rangle. \end{aligned} \quad (\text{IV.6.7})$$

donde

$$\langle \mu_j; \theta | \hat{q}_N^2 | \mu_j; \theta \rangle = \gamma_1^2 \left(\mu_j^2 \cos(2\theta) + 2 [1 - \cos(2\theta)] \frac{\sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{(k-1)!}}{\sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{k!}} \right) \quad (\text{IV.6.8})$$

y

$$\langle (\hat{p}_N)^2 \rangle_0 = \sum_{j=0}^{N-1} \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda) \langle \mu_j; \theta | (\hat{p}_N)^2 | \mu_j; \theta \rangle. \quad (\text{IV.6.9})$$

donde

$$\langle \mu_j; \theta | (\hat{p}_N)^2 | \mu_j; \theta \rangle = \gamma^2 \left(-\mu_j^2 \cos(2\theta) + 2 [1 + \cos(2\theta)] \frac{\sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{(k-1)!}}{\sum_{k=0}^{N-1} \frac{H_k^2(\mu_j)}{k!}} \right) \quad (\text{IV.6.10})$$

Ahora es posible evaluar el miembro izquierdo de la desigualdad de Heisemberg (Ec. (IV.6.4)) para $\hat{\rho}_N(0)$

$$\Delta^0(q_N) \Delta^0(p_N) \geq \frac{1}{2} \left| \sum_{j=0}^{N-1} \exp(-\lambda_0 - \mu_j \Lambda) \langle \mu_j; \theta | [\hat{q}_N, \hat{p}_N] | \mu_j; \theta \rangle \right|. \quad (\text{IV.6.11})$$

El miembro derecho de la Ec. (IV.6.11) puede calcularse mediante la Ec. (IV.3.22) y (IV.4.21). obteniéndose

$$\langle \mu_j; \theta | [\hat{q}_N, \hat{p}_N] | \mu_j; \theta \rangle = 0. \quad (\text{IV.6.12})$$

Esto implica que la cota inferior de $\Delta^0(q_N) \Delta^0(p_N)$ es cero, y que toma este valor cuando $\hat{\rho}_N(0)$ describe un estado puro. Dentro del contexto de nuestra aproximación esto es posible solo cuando Λ tiende a infinito, como lo muestra la Fig. 4.

Es posible calcular numéricamente la región del espacio de fases que satisface

$$\Delta^0(q_N) \Delta^0(p_N) \leq \frac{\hbar}{2}, \quad (\text{IV.6.13})$$

es decir, la región en la que las Ecs. (IV.4.44-45), (IV.5.2), (IV.5.6) y (IV.5.11) no tienen significado físico. La figura 9 muestra el resultado correspondiente. El área sombreada indica la zona donde el proceso de proyectar $H \rightarrow G_N$ viola un postulado básico de la mecánica cuántica (Ec. (IV.6.4)). El ancho máximo de esta región es γ_N , donde γ_N es un número obtenido en forma numérica a partir de la Ec. (IV.6.13). Mediante un análisis cuidadoso sobre la forma en que varía la región sombreada con N , es posible seguir la forma en que trabaja el proceso de proyección. De la figura 3 es posible observar que la distancia entre dos raíces adyacentes μ_j disminuye a medida que N crece. En particular, el conjunto formado por los μ_j se transforma en un continuo cuando $N \rightarrow \infty$. Por lo tanto, un parámetro característico del proceso de proyección puede definirse como

$$\delta = \frac{(\mu_{\text{MAX}} - \mu_{\text{MAX}-1})}{\gamma_N}, \quad (\text{IV.6.14})$$

donde μ_{MAX} y $\mu_{\text{MAX}-1}$ son las dos últimas raíces para cada N de la Fig. 1. El valor de δ versus N resulta:

N	δ
3	2.1
5	6.8
8	7.1
10	8.5
15	9.0

La ecuación (IV.6.13) es más restrictiva para $\theta = 0, \pi/2, \pi$ y $3\pi/2$, dado que esos

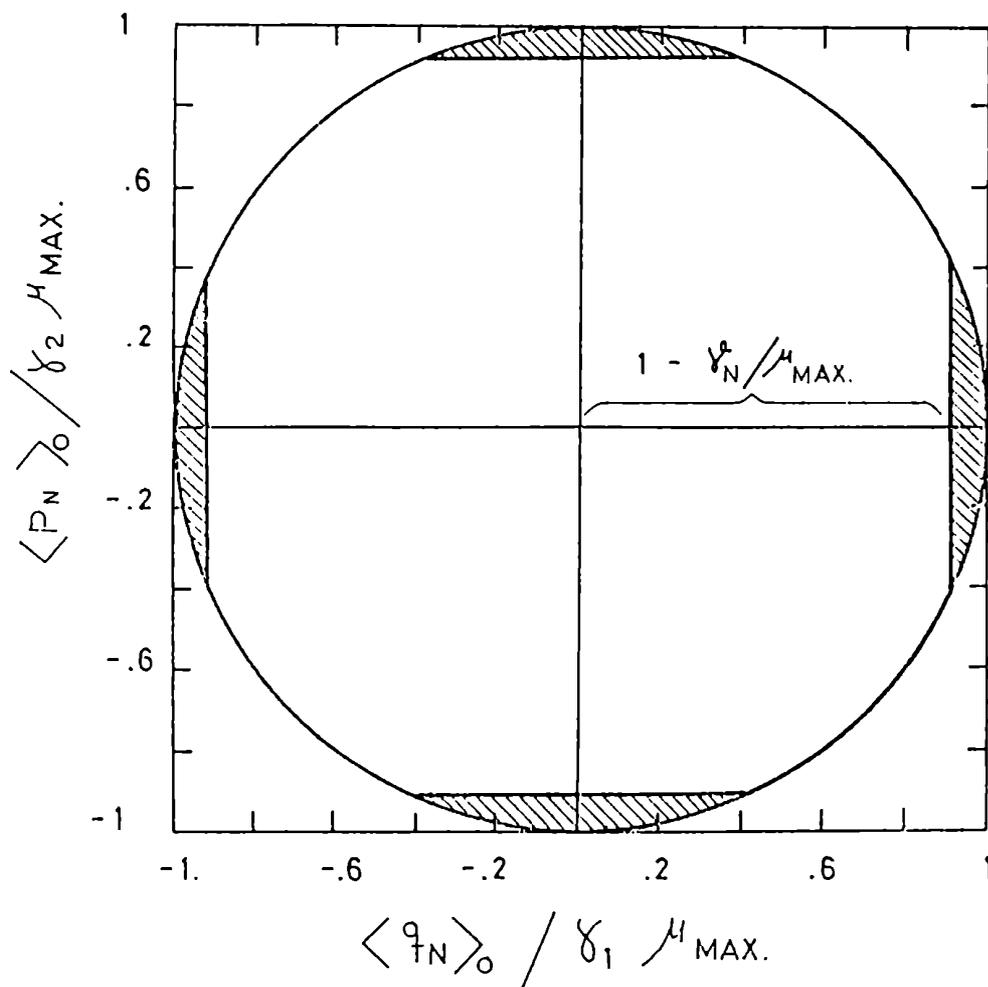


Figura 9: χ_0 como función de $\langle q_N \rangle / \gamma_1 \mu_{MAX}$ y $\langle p_N \rangle / \gamma_2 \mu_{MAX}$ (círculo unitario) para $N=5$. El área sombreada muestra la región donde el procedimiento empleado para proyectar H en G_N viola el principio de incerteza. (Su ancho máximo es γ_N / μ_{MAX} .)

valores corresponden a autovalores de \hat{q}_N y \hat{p}_N . Esto es razonable ya que la incerteza tiende a cero cuando $\Delta^0(q_N)$ o $\Delta^0(p_N)$ tienden a cero.

Se estudiarán ahora la influencia de los efectos de borde sobre la dinámica del sistema. La evolución temporal de $\langle \hat{q}_N / \hat{\rho}_N(0) \rangle_t$ y $\langle \hat{p}_N / \hat{\rho}_N(0) \rangle_t$ pueden verse en la figura 10. La diferencia entre esas curvas y el resultado senoidal clásico es debido a la contribución de $\langle \hat{A}_N^{(1)} / \hat{\rho}_N(0) \rangle_t$ y $\langle \hat{A}_N^{(2)} / \hat{\rho}_N(0) \rangle_t$, que aparecen por el proceso de proyección. Ambos generan un efecto de "ruido" en $\langle \hat{q}_N / \hat{\rho}_N(0) \rangle$ y $\langle \hat{p}_N / \hat{\rho}_N(0) \rangle$, dado por la combinación de las ecuaciones de evolución (IV.3.38-41) y las condiciones iniciales (IV.4.40-41). El ruido resulta

$$r_q = \frac{2}{N} \left\{ -\langle \hat{q}_N \rangle_0 [\cos(\omega t) - \cos(\omega' t)] - \frac{\langle \hat{p}_N \rangle_0}{m\omega} [\sin(\omega t) + \sin(\omega' t)] \right\}, \quad (\text{IV.6.15})$$

$$r_p = \frac{2}{N} \left\{ -\langle \hat{p}_N \rangle_0 [\cos(\omega t) - \cos(\omega' t)] - \langle \hat{q}_N \rangle_0 m\omega [\sin(\omega t) + \sin(\omega' t)] \right\}, \quad (\text{IV.6.16})$$

y, como es lógico, el ruido disminuye a medida que N crece.

Resta aun formularse una pregunta. ¿Será el proceso de proyección válido para todo N ? Para encontrar la respuesta es posible construir

$$\chi^0(\Lambda) - \chi_{i(\text{MAX})}^0 \equiv r_\chi, \quad (\text{IV.6.17})$$

donde $\chi^0(\Lambda)$ está dado por la Ec. (IV.4.45) y $\chi_{i(\text{MAX})}^0$ el el máximo valor de

$$\chi_{i}^0 = \sqrt{\left(\frac{\langle \hat{p}_N / \hat{\rho}_N(0) \rangle}{\gamma_2} \right)^2 + \left(\frac{\langle \hat{q}_N / \hat{\rho}_N(0) \rangle}{\gamma_1} \right)^2}. \quad (\text{IV.6.18})$$

Tanto $\chi^0(\Lambda)$ como $\chi_{i(\text{MAX})}^0$ se muestran en la figura 11. En particular, $\chi^0(\Lambda)$ es el círculo de condiciones iniciales, que también se muestra en la figura 9. Se observa que

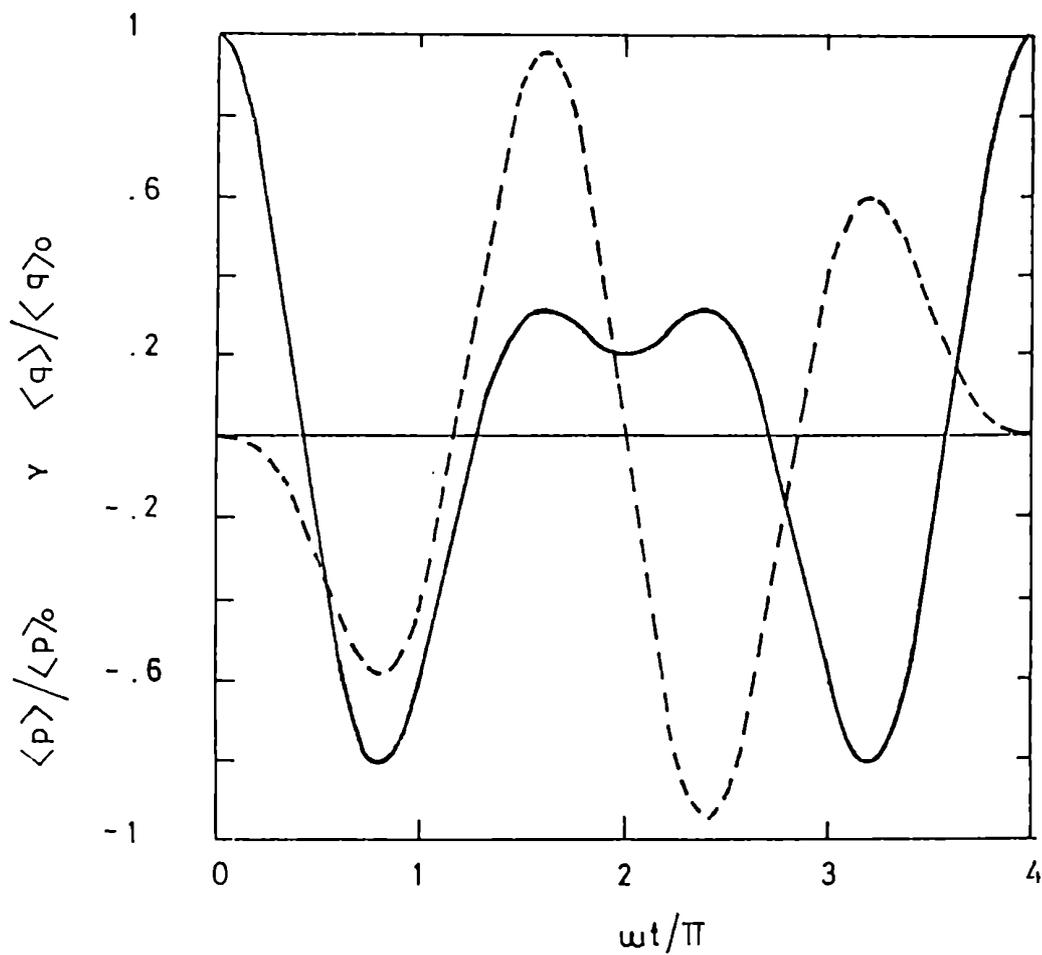


Figura 10: Evolución temporal de los valores medios para $N=5$ con $\lambda_{20} = 0$.

($\langle p_N \rangle / \gamma_2 \mu_{MAX}$ en líneas punteadas)

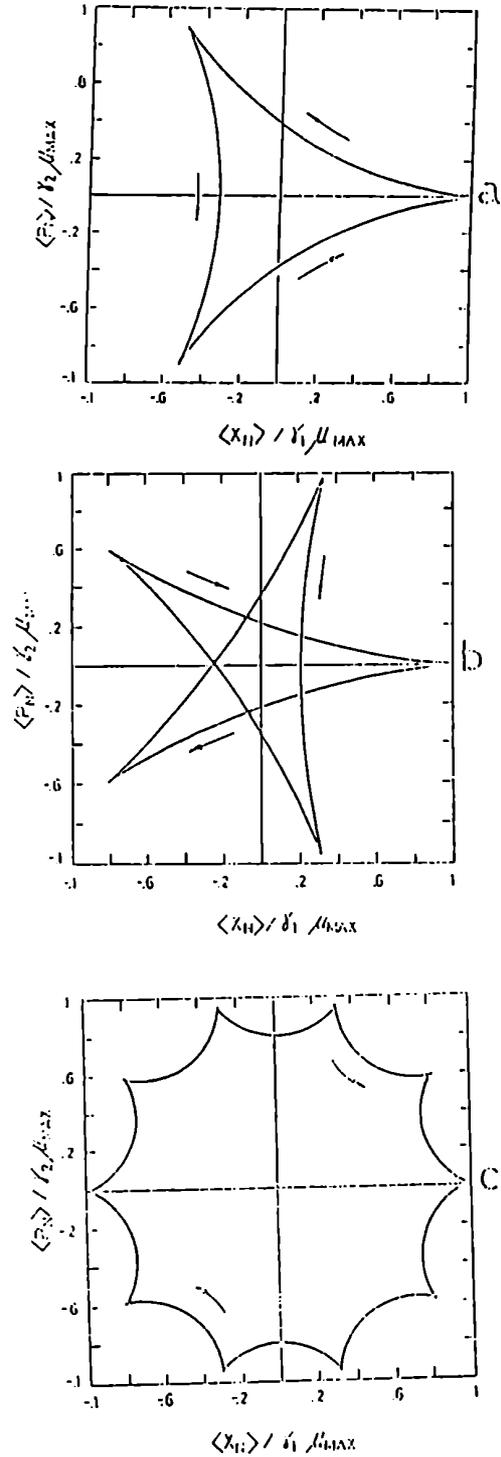


Figura 11: Evolución temporal de $\chi_0(t)$. a) $N=3$, b) $N=5$, y c) $N=20$. La evolución clásica recorre el círculo unitario en sentido horario. En cambio, para $N=3$, la trayectoria evoluciona en sentido antihorario.

$$r_{\chi}^{\text{MAX}} = \frac{4 \chi_0}{N}, \quad (\text{IV.6.19})$$

donde el lado derecho de la ecuación fue obtenido utilizando las ecuaciones (IV.6.17-18).

Entonces, la variación de $\langle p_N \rangle$ y $\langle q_N \rangle$,

$$F(\langle p_N \rangle) = \frac{r_{\chi}^{\text{MAX}} \gamma_1}{r(2)}, \quad (\text{IV.6.20})$$

$$F(\langle q_N \rangle) = \frac{r_{\chi}^{\text{MAX}} \gamma_2}{r(2)}, \quad (\text{IV.6.21})$$

se calcula proyectando r_{χ}^{MAX} sobre los ejes de la figura 11. Se obtiene que

$$F(\langle q_N \rangle) F(\langle p_N \rangle) < \bar{n}, \quad (\text{IV.6.22})$$

donde se utilizó la Ec. (IV.4.17). El efecto de borde está entonces automáticamente controlado por la Ec. (IV.4.17), lo que indica la autoconsistencia del procedimiento.

Por lo tanto, el espacio truncado G_N permite una dinámica cuántica exacta, de acuerdo con la información disponible. Obviamente, existe una cota inferior para χ_0 , por debajo de la cual es imposible observar cualquier evolución dinámica del sistema. En ese caso, solo se observan transiciones cuánticas entre estados, a pesar que el álgebra de operadores predice una evolución temporal del tipo del teorema de Ehrenfest.

En este ejemplo simple se muestra que la posibilidad de observar la completitud del espacio de Hilbert está definitivamente impedida por el principio de incerteza. Es así como la figura 11 a) muestra que $\langle p_N \rangle$ y $\langle q_N \rangle$ no evolucionan en la misma dirección ($N=3$), lo que es un efecto estrictamente cuántico.

V Termodinámica cuántica y teoría de la información

V.1 Termodinámica cuántica

En la sección 5 del capítulo anterior se estudiaron los aspectos termodinámicos de un sistema descrito por una matriz densidad compuesta por operadores no-ligados. En ese contexto, se llamó termodinámica al estudio de la relación entre multiplicadores de Lagrange y valores medios de operadores. Se hizo también una analogía entre el sistema estudiado y un gas paramagnético, pero no fue definida la temperatura del sistema. Es la intención de este capítulo especificar claramente cual es la información necesaria para poder definir las magnitudes del sistema con las que se trabaja usualmente en termodinámica. Esta definición se hará dentro del contexto de teoría de la información y será aplicable tanto a sistemas clásicos como a sistemas cuánticos, cuyos operadores relevantes pueden conmutar o no con \hat{H} . Este último caso dará lugar a una verdadera "termodinámica", en la que las variables intensivas y extensivas son funciones del tiempo¹⁷.

En la teoría clásica, la entropía estuvo usualmente asociada con estados de equilibrio^{4,18,19}. Se la considera una función de estado, donde el estado está definido por la temperatura, presión y otras variables macroscópicas. Dentro del contexto de la teoría de la información, se puede definir al estado de equilibrio utilizando el principio de máxima entropía (PME). Este estado será aquel asociado con la máxima entropía, para una dada configuración, en el que el valor medio del número de partículas, la energía, el momento total, etc., se mantienen constantes. El estado que tiene estas características es único, y para partículas clásicas lleva a la conocida distribución de probabilidad de Gibbs¹⁸. La idea central de este capítulo es reexaminar el concepto de temperatura para sistemas cuánticos utilizando el PME, ya que como ha sido sugerido previamente por Cyranski²⁰, el PME ha sido muy útil para reconciliar a la teoría cuántica con otras teorías físicas.

Como es sabido²¹, la termodinámica esta basada en la existencia de variables de

estado. Estas son de dos tipos: intensivas, que son independientes del número de partículas y extensivas, que son proporcionales al número de partículas. La formulación teórica de la termodinámica está construída sobre pares de variables de estado, donde cada par describe una manera particular de modificar el comportamiento macroscópico del sistema.

Para reobtener las ecuaciones termodinámicas a partir de consideraciones mecanico-cuánticas, el primer punto es reconocer a la Ec. (II.2.7) como la entropía del sistema e incluir al Hamiltoniano como operador relevante. Obviamente, la inclusión de \hat{H} como operador relevante no es lo que se propone en la referencia 6. Sin embargo, esta inclusión no altera la descripción dinámica del sistema, dada por las ecuaciones (II.3.3), (II.3.4) y (II.3.6), y es necesaria para poder avanzar en esta formulación. Como en termodinámica clásica, se define la temperatura del sistema utilizando la Ec. (II.2.7) ($k=1$)

$$\beta = \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial \langle \hat{H} \rangle} \Big|_{\langle \hat{O}_i \rangle}, \quad i=2, \dots, N. \quad (\text{V.1.1})$$

Luego, se reescribe la Ec. (II.2.7),

$$\frac{S}{\beta} = \frac{\lambda_0}{\beta} + \sum_{i=0}^N \lambda_i \langle \hat{O}_i \rangle + \langle \hat{H} \rangle, \quad (\text{V.1.2})$$

donde $\lambda_i' = \lambda_i / \beta$.

El segundo paso importante es asociar los valores medios de los observables como variables extensivas y los λ_i' como variables intensivas. Si \hat{H} no forma parte del conjunto de operadores relevantes del problema, la variable intensiva temperatura permanece indefinida y no es posible formular una teoría termodinámica. En esta forma se introduce la definición de la *temperatura de un sistema cuántico*.

Desde este punto de vista, se definirá al conjunto de operadores relevantes para el problema termodinámico como $\{ \hat{O}_0 = \hat{1}, \hat{O}_1 = \hat{H}, \hat{O}_2, \dots, \hat{O}_N \}$. Se asumirá que \hat{H} es independiente del tiempo. En este caso es fácil demostrar que β es también una constante

de movimiento. Este formalismo es válido también para Hamiltonianos dependientes del tiempo, pero en ese caso la temperatura también será dependiente del tiempo.

En las próximas secciones se desarrollará una teoría termodinámica semejante a la termodinámica usual, pero dentro del contexto de la mecánica cuántica. Debe destacarse que aunque las variables intensivas se comportan como las variables intensivas usuales, las variables extensivas, debido al carácter cuántico de los operadores, muestran efectos de correlación que no se encuentran en la termodinámica clásica. Se describirán dos tipos de procesos: a) aquellos en los que tanto el conjunto $\{ \lambda_i \}$ como el $\{ \langle \hat{O}_i \rangle \}$ siguen la evolución canónica dada por las Ecs. (II.3.4) y (II.3.6), y b) aquellos en los que aparecen ciertos vínculos (sobre $\{ \lambda_i \}$ o $\{ \langle \hat{O}_i \rangle \}$) no descritos en la dinámica, que permiten variaciones tanto en la temperatura como en la energía media. El primer tipo de procesos será llamado "canónico" (la entropía permanece constante) y el segundo "termodinámico" (la entropía puede variar).

V.2 Procesos canónicos

Se considerará que las variables intensivas y extensivas evolucionan como lo indican las Ecs. (II.3.4) y (II.3.6). Deben entonces distinguirse dos casos: a) todos los operadores que entran en la Ec. (II.3.3) conmutan con \hat{H} ($g_{ij} = 0$ para todo i y j), y b) se consideran operadores que no conmutan con \hat{H} . Se estudiará primero el caso b) ya que es el más general.

Para ese caso, dentro del contexto de la teoría de la información, $\hat{\rho}$ es una matriz densidad de no-equilibrio^{18,22}. Como se vio en el capítulo III, la entropía, dada por la Ec. (VI.1.2), es un invariante. Se introducirá el calor específico, a partir de su definición usual, como:

$$C(\beta, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta} = -\beta^2 \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial \beta} + \sum_{j=2}^N \lambda_j \frac{\partial \hat{O}_j}{\partial \beta} \right). \quad (\text{V.2.1})$$

Es posible reemplazar las derivadas utilizando las Ecs. (II.5.2) y (II.5.7), resultando

$$C(\beta, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = -\beta^2 \sum_{j=2}^N \lambda_j' K_{1j} = -\beta \sum_{j=2}^N \lambda_j K_{1j}, \quad (\text{V.2.2})$$

y de esta forma asociar el calor específico, dentro del contexto de la teoría de la información, con las correlaciones cuántico-estadísticas entre la energía y todos los operadores relevantes. Para el caso a), en el que todos los operadores conmutan con \hat{H} los coeficientes de correlación resultan

$$K_{1j} = \langle \hat{H} \hat{O}_j \rangle - \langle \hat{O}_j \rangle \langle \hat{H} \rangle, \quad (\text{V.2.3})$$

y $\hat{\rho}$ describe una situación de equilibrio, con correlaciones estadísticas entre estados mixtos.

Es importante analizar el comportamiento temporal de C cuando se lo calcula a través de una matriz densidad de no-equilibrio. La respuesta a este interrogante se puede encontrar en el análisis de invariantes hecho en el capítulo III. Allí se demostró que

$$\Gamma^{(2)} = \sum_{r,j=1}^N \lambda_r \lambda_j K_{rj} \geq 0. \quad (\text{V.2.4})$$

es un invariante del sistema. Pero como se mencionó anteriormente, la inclusión de $\hat{H} = \hat{O}_1$ en el conjunto de operadores relevantes no modifica la matriz \underline{G} , ya que le agrega una fila y una columna de ceros. Luego, se puede asegurar que

$$\Gamma^{(2)} = \sum_{r,j=2}^N \lambda_r \lambda_j K_{rj} \geq 0. \quad (\text{V.2.5})$$

es también un invariante del sistema. Pero

$$I^{(2)} = 2 C + I'^{(2)}, \quad (\text{V.2.6})$$

por lo que el calor específico C , definido a partir de la Ec. (V.2.2), es un invariante aún en el caso en que las variables intensivas y extensivas sean dependientes del tiempo. Este resultado permite concluir que si se observa un calor específico dependiente del tiempo, entonces se puede deducir que el Hamiltoniano del sistema es también dependiente del tiempo.

V.3 Procesos termodinámicos

Los procesos termodinámicos usuales se producen a volumen (o presión) constante y por lo tanto solo pueden variar la temperatura (energía) y la presión (o volumen) del sistema. En este punto se considerará el caso general de un conjunto de $N-1$ magnitudes constantes, que en principio puede ser cualquier combinación de variables extensivas e intensivas, y que se llamará $F = \{A_2 = \text{const}, \dots, A_N = \text{const}\}$ con $A_i = \langle \hat{O}_i \rangle$ o λ_i' . Al considerar a las variables λ_i' , el conjunto $\{\lambda_i' = \lambda_i / \beta\}$ pasa a ser dependiente de β . Además, por tomar un conjunto de magnitudes constantes y variar la temperatura o la energía, los multiplicadores de Lagrange dejan de ser linealmente independientes, por lo que ecuaciones como (II.2.9) y (II.5.7) deben ser recalculadas. Es importante aclarar que la variación que se produce en $\langle \hat{H} \rangle$ puede no estar bien definida (ya sea este un proceso estático o cuasiestático). $\langle \hat{H} \rangle$ solo debe estar bien definido para aquellos estados donde se desean evaluar las funciones termodinámicas.

En estas condiciones, la Ec. (II.2.9) que relaciona los valores medios con los multiplicadores de Lagrange debe recalcularse teniendo en cuenta el vínculo impuesto por el conjunto F . Se obtiene

$$\left. \frac{\partial \lambda_0}{\partial \beta} \right|_F = - \langle \hat{H} \rangle - \sum_{i=2}^N \left. \frac{\partial \lambda_i}{\partial \beta} \right|_F \langle \hat{O}_i \rangle, \quad (\text{V.3.1})$$

donde el símbolo $|_F$ indica que las variaciones con respecto a β deben ser evaluadas manteniendo el conjunto de variables F constantes. Las relaciones que se derivaron de la Ec. (II.2.9) en la sección 5 del capítulo 2 también se alteran por el nuevo vínculo impuesto.

$$\left. \frac{\partial \langle \hat{O}_i \rangle}{\partial \beta} \right|_F = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\left[\left. \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \beta} \right|_F, \hat{O}_i \right]_+ \right), \quad (\text{V.3.2})$$

con

$$\left. \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \beta} \right|_F = -\hat{\rho} \left(\hat{H} + \sum_{i=2}^N \left. \frac{\partial \lambda_i}{\partial \beta} \right|_F \hat{O}_i - \langle \hat{H} \rangle - \sum_{i=2}^N \left. \frac{\partial \lambda_i}{\partial \beta} \right|_F \langle \hat{O}_i \rangle \right). \quad (\text{V.3.3})$$

$\hat{\tilde{O}}$ es la transformada Kubo de \hat{O} definida en la Ec. (II.5.6) y que aparece por trabajar con operadores que no conmutan entre sí.

Entonces, se obtiene

$$\left. \frac{\partial \langle \hat{O}_i \rangle}{\partial \beta} \right|_F = \left(\frac{\langle [\hat{H}, \hat{O}_i]_+ \rangle}{2} - \langle \hat{H} \rangle \langle \hat{O}_i \rangle + \sum_{r=2}^N \left. \frac{\partial \lambda_r}{\partial \beta} \right|_F \left(\frac{\langle [\hat{\tilde{O}}_r, \hat{O}_i]_+ \rangle}{2} - \langle \hat{O}_r \rangle \langle \hat{O}_i \rangle \right) \right). \quad (\text{V.3.4})$$

La variación de la entropía con respecto a β es

$$\left. \frac{\partial S}{\partial \beta} \right|_F = \left. \frac{\partial \lambda_0}{\partial \beta} \right|_F + \langle \hat{H} \rangle + \beta \left. \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \beta} \right|_F + \sum_{i=2}^N \left. \frac{\partial \lambda_i}{\partial \beta} \right|_F \langle \hat{O}_i \rangle + \sum_{i=2}^N \lambda_i \left. \frac{\partial \langle \hat{O}_i \rangle}{\partial \beta} \right|_F.$$

$$(V.3.5)$$

y utilizando la Ec. (V.3.1) se obtiene

$$\left. \frac{\partial S}{\partial \beta} \right|_F = \beta \left. \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \beta} \right|_F + \sum_{i=2}^N \lambda_i \left. \frac{\partial \langle \hat{O}_i \rangle}{\partial \beta} \right|_F. \quad (V.3.6)$$

Si $A_i = \langle \hat{O}_i \rangle$,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial S}{\partial \beta} \right|_{\langle \hat{O}_i \rangle} &= \beta \left. \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \beta} \right|_{\langle \hat{O}_i \rangle}, \quad i = 2, \dots, N \\ &= -\beta \left(\mathcal{K}_{11} + \sum_{r=2}^N \left. \frac{\partial \lambda_r}{\partial \beta} \right|_{\langle \hat{O}_i \rangle} \mathcal{K}_{r1} \right) \end{aligned} \quad (V.3.7)$$

con

$$\mathcal{K}_{ji} = \frac{1}{2} \text{Tr} (\hat{\rho} [\hat{O}_j, \hat{O}_i]_+) - \langle \hat{O}_j \rangle \langle \hat{O}_i \rangle. \quad (V.3.8)$$

Si el conjunto de operadores relevantes conmuta, entonces $\mathcal{K}_{ji} = \mathcal{K}_{ij}$. Es importante notar que

$$\mathcal{K}_{ji} \neq \mathcal{K}_{ij}. \quad (V.3.9)$$

Se puede entonces evaluar el calor específico a "variable extensiva constante", que será una extensión de C_V , obteniéndose

$$C_{\langle \hat{O}_i \rangle} = -\beta \left. \frac{\partial S}{\partial \beta} \right|_{\langle \hat{O}_i \rangle} = -\beta^2 \left. \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \beta} \right|_{\langle \hat{O}_i \rangle}$$

$$= \beta^2 \left(\mathcal{K}_{11} + \sum_{r=2}^N \frac{\partial \lambda_r}{\partial \beta} \Big|_{\langle \hat{O}_i \rangle} \mathcal{K}_{r1} \right) \quad (\text{V.3.10})$$

Para calcular la derivada, todas las variables extensivas ($\langle \hat{O}_j \rangle$, $j=2, \dots, N$) se mantienen constantes. En ese proceso

$$\frac{\partial \langle \hat{O}_i \rangle}{\partial \beta} \Big|_{\langle \hat{O}_i \rangle} = 0, \quad j = 2, \dots, N \quad (\text{V.3.11})$$

y los coeficientes de correlación satisfacen

$$\mathcal{K}_{1i} = - \sum_{r=2}^N \frac{\partial \lambda_r}{\partial \beta} \Big|_{\langle \hat{O}_j \rangle} \mathcal{K}_{ri}, \quad i = 2, \dots, N \quad (\text{V.3.12})$$

Si $A_i = \lambda_i' = \lambda_i / \beta$, todos los multiplicadores de Lagrange resultan proporcionales a β y

$$\frac{\partial S}{\partial \beta} \Big|_{\{\lambda_i\}} = \beta \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \beta} \Big|_{\{\lambda_i\}} + \sum_{r=2}^N \lambda_r \frac{\partial \langle \hat{O}_r \rangle}{\partial \beta} \Big|_{\{\lambda_i\}}, \quad i = 2, \dots, N \quad (\text{V.3.13})$$

$$= - \left(\frac{\langle [\hat{H}, \beta \hat{H} + \sum_{i=2}^N \lambda_i \hat{O}_i]_+ \rangle}{2} - \langle \hat{H} \rangle \left(\beta \langle \hat{H} \rangle + \sum_{i=2}^N \lambda_i \langle \hat{O}_i \rangle \right) \right) - \sum_{r=2}^N \frac{\partial \lambda_r}{\partial \beta} \Big|_{\{\lambda_i\}} \left(\frac{\langle [\hat{O}_r, \beta \hat{H} + \sum_{i=2}^N \lambda_i \hat{O}_i]_+ \rangle}{2} - \langle \hat{O}_r \rangle \left(\beta \langle \hat{H} \rangle + \sum_{i=2}^N \lambda_i \langle \hat{O}_i \rangle \right) \right)$$

Utilizando el hecho que

$$\hat{H} + \sum_{i=2}^N \lambda_i \hat{O}_i = -\ln \hat{\rho} - \lambda_0 \hat{I} \quad (\text{V.3.14})$$

conmuta con $\hat{\rho}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \langle [\hat{O}_j, \hat{H} + \sum_{i=2}^N \lambda_i \hat{O}_i]_{+} \rangle &= \text{Tr} (\hat{\rho} [\hat{O}_j, \hat{H} + \sum_{i=2}^N \lambda_i \hat{O}_i]_{+}) \\ &= \langle [\hat{O}_j, \hat{H} + \sum_{i=2}^N \lambda_i \hat{O}_i]_{+} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{V.3.15})$$

donde se ha utilizado la permutación cíclica bajo el símbolo de traza. De las Ecs. (V.3.13) y (V.3.15), se puede calcular el calor específico a variables intensivas constantes, extensión de C_P ,

$$\begin{aligned} C_{(\lambda_i)} &= -\beta \left. \frac{\partial S}{\partial \beta} \right|_{(\lambda_i)} \\ &= -\beta \left(\beta \left. \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \beta} \right|_{(\lambda_i)} + \sum_{r=2}^N \lambda_r \left. \frac{\partial \langle \hat{O}_r \rangle}{\partial \beta} \right|_{(\lambda_i)} \right) \\ &= \beta^2 \sum_{k;r=1}^N \lambda_k' \lambda_r' K_{rk}, \quad \lambda_1' = 1. \end{aligned} \quad (\text{V.3.16})$$

Luego, mediante la Ec. (V.2.5) resulta

$$C_{(\lambda_i)} = I^{(2)} \geq 0. \quad (\text{V.3.17})$$

Tanto $C_{(\lambda_i)}$ como $C_{\langle \hat{O}_i \rangle}$ son independientes del tiempo ya que las variables dinámicas intensivas y extensivas se mantienen constantes. Si en el instante t_0 estas condiciones de contorno desaparecen, tanto $\langle \hat{O}_i \rangle(t)$ como $\lambda_i'(t)$ evolucionarán como lo indican las Ecs.

(II.3.4) y (II.3.6), pero el calor específico se mantendrá constante ($C(t) = C(t_0)$). Esto quiere decir que cualquier variación canónica de los conjuntos $\{\langle \hat{O}_i \rangle\}$ o $\{\lambda_i^j\}$ no afectará a C , y quedará solo determinado por las condiciones iniciales.

En ambos procesos, canónicos o termodinámicos, es posible extender el concepto de "ecuación de estado", nombre que usualmente se da al conjunto de ecuaciones que conecta las variables extensivas con las intensivas. De acuerdo con la Ec. (II.2.9)

$$\langle \hat{O}_i / \hat{\rho} \rangle = \text{Tr} \left(\hat{O}_j \exp(-\lambda_0 - \sum_i \lambda_i \hat{O}_i) \right), j=1, 2, \dots, n. \quad (\text{V.3.18})$$

La ecuación (V.3.18) puede ser interpretada como la ecuación de estado cuántica. De esta forma el estado del sistema está definido por el conjunto $\{ \langle \hat{O}_{i_1} \rangle, \dots, \langle \hat{O}_{i_l} \rangle, \lambda_{j_1}, \dots, \lambda_{j_k}; l+k = N-1 \}$ de condiciones iniciales mixtas que fueron introducidas en el capítulo anterior (Ec. (IV.4.1-4)). Si el número de variables medidas (r) es menor que el número de operadores relevantes (N), se asumirá (por ser la mejor aproximación de la teoría de la información)

$$\lambda_T^j = 0, t = t_0, r < j < N. \quad (\text{V.3.19})$$

donde el subíndice T indica que estos multiplicadores de Lagrange deben ser considerados como de "prueba".

Es importante recalcar que todas las funciones termodinámicas usuales ($S, \langle \hat{H} \rangle, C$) son independientes del tiempo, aun cuando el estado del sistema está descrito por una matriz densidad de no-equilibrio. Notese que la relación de clausura de la semi-álgebra (Ec. (II.3.3)) garantiza que el sistema es cuánticamente cerrado, caracterizado por $S = \text{const}, \langle \hat{H} \rangle = \text{const}$. No obstante, como los operadores relevantes pueden no ser constantes de movimiento, sus valores medios (variables extensivas) evolucionarán en el tiempo. Sin embargo, el formalismo es suficientemente consistente como para generar un

V.4.a Ejercicio Zeman dependiente del tiempo

Este problema fue tratado en la sección 3.b del capítulo III, como ejemplo del cálculo de invariantes. En este caso se utilizará para aplicar los resultados expuestos en las secciones anteriores.

El Hamiltoniano del sistema estará dado por la Ec. (III.3.13) y el conjunto de operadores relevantes que cierra un álgebra parcial con el Hamiltoniano será $\{\hat{O}_0=1, \hat{O}_1=\hat{H}=\alpha\hat{J}_z, \hat{O}_2=\hat{J}_x, \hat{O}_3=\hat{J}_y\}$. Con respecto al conjunto utilizado en el capítulo

III, fue incluido el Hamiltoniano a los efectos de poder efectuar el estudio termodinámico. Como se aclaró en las secciones anteriores, la evolución dinámica de los valores medios de los observables sigue siendo la determinada por las Ecs. (III.3.32-33), ya que la inclusión del Hamiltoniano como operador relevante no modifica la dinámica. El operador densidad asociado a este problema es

$$\hat{\rho} = \exp(-\lambda_0 - \beta \alpha \hat{J}_z - \lambda_x \hat{J}_x - \lambda_y \hat{J}_y) \quad (V.4.1)$$

Para poder evaluar el valor medio de los operadores para cualquier conjunto de multiplicadores de Lagrange $(\beta, \lambda_x, \lambda_y)$ se define

$$\gamma = -i (\beta z + \lambda_x x + \lambda_y y) = \gamma n \quad (V.4.2)$$

con

$$\gamma = \sqrt{\beta^2 + \lambda_x^2 + \lambda_y^2} \quad (\text{V.4.3})$$

El valor medio de los operadores relevantes resulta entonces

$$\langle \hat{J}_x \rangle = - \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_x} = \quad (\text{V.4.4})$$

$$= - \hbar \lambda_x \frac{\left(\sum_{m=-j}^j m \exp (m \gamma \hbar) \right)}{\left(\gamma \sum_{m=-j}^j \exp (m \gamma \hbar) \right)},$$

$$\langle \hat{J}_y \rangle = - \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_y} = \quad (\text{V.4.5})$$

$$= - \hbar \lambda_y \frac{\left(\sum_{m=-j}^j m \exp (m \gamma \hbar) \right)}{\left(\gamma \sum_{m=-j}^j \exp (m \gamma \hbar) \right)},$$

$$\langle \hat{J}_z \rangle = - \frac{\partial \lambda_0}{\partial \beta} = \quad (\text{V.4.6})$$

$$= - \hbar \beta \frac{\left(\sum_{m=-j}^j m \exp (m \gamma \hbar) \right)}{\left(\gamma \sum_{m=-j}^j \exp (m \gamma \hbar) \right)}.$$

La entropía y el calor específico valen

$$S = \lambda_0 + \beta \alpha \langle \hat{J}_z \rangle + \lambda_x \langle \hat{J}_x \rangle + \lambda_y \langle \hat{J}_y \rangle, \quad (\text{V.4.7})$$

$$\begin{aligned}
C &= -\beta^2 \left\{ \alpha \frac{\partial \langle \hat{J}_z \rangle}{\partial \beta} + \lambda'_x \frac{\partial \langle \hat{J}_x \rangle}{\partial \beta} + \lambda'_y \frac{\partial \langle \hat{J}_y \rangle}{\partial \beta} \right\} \\
&= \beta (\beta K_{11} + \lambda_x K_{12} + \lambda_y K_{13}) . \quad (V.4.8)
\end{aligned}$$

Como se demostró en la sección V.2, C es un invariante del movimiento aunque $\langle \hat{J}_x \rangle$, $\langle \hat{J}_y \rangle$, λ_x y λ_y sean dependientes del tiempo. La entropía puede ser imaginada como una cúpula en el hiperespacio formado por $\langle \hat{H} \rangle$, $\langle \hat{J}_x \rangle$ y $\langle \hat{J}_y \rangle$. En la figura 12 se muestra el comportamiento de S versus $\langle \hat{H} \rangle$, como función de β , para distintos valores de $\langle \hat{J}_x \rangle$ y con $\langle \hat{J}_y \rangle = 0$. Como el espacio de Hilbert es finito, la temperatura del sistema (la derivada de las curvas de la Fig. 12) puede ser tanto positiva como negativa²¹.

En la figura 13 se muestra el calor específico a variables extensivas constantes, definido por la ecuación

$$C_{\langle \hat{J}_x \rangle, \langle \hat{J}_y \rangle} = -\alpha \beta^2 \frac{\partial \langle \hat{J}_z \rangle}{\partial \beta} \Big|_{\langle \hat{J}_x \rangle, \langle \hat{J}_y \rangle} , \quad (V.4.9)$$

en función de β . Los dos máximos que aparecen se deben, como se mencionó en el capítulo anterior al carácter finito del espacio de Hilbert del sistema. Las curvas son simétricas porque el sistema presenta simetría rotacional con respecto al eje z . El valor de $\langle \hat{J}_x \rangle$ se mantiene constante para cada una de las curvas.

Análogamente, se puede mantener constante para cada curva a λ'_x . En ese caso se obtendrá un calor específico a variable extensiva constante definido por

$$C_{\lambda'_x; \lambda'_y} = -\beta^2 \sum_{r=2}^N \lambda'_r \frac{\partial \langle \hat{O}_r \rangle}{\partial \beta} \Big|_{\lambda'_x; \lambda'_y} \quad (V.4.10)$$

La figura 14 muestra los valores obtenidos a partir de la Ec. (V.4.10). Se observa que, por la simetría del problema, mantener λ'_x y λ'_y constantes es equivalente a redefinir la

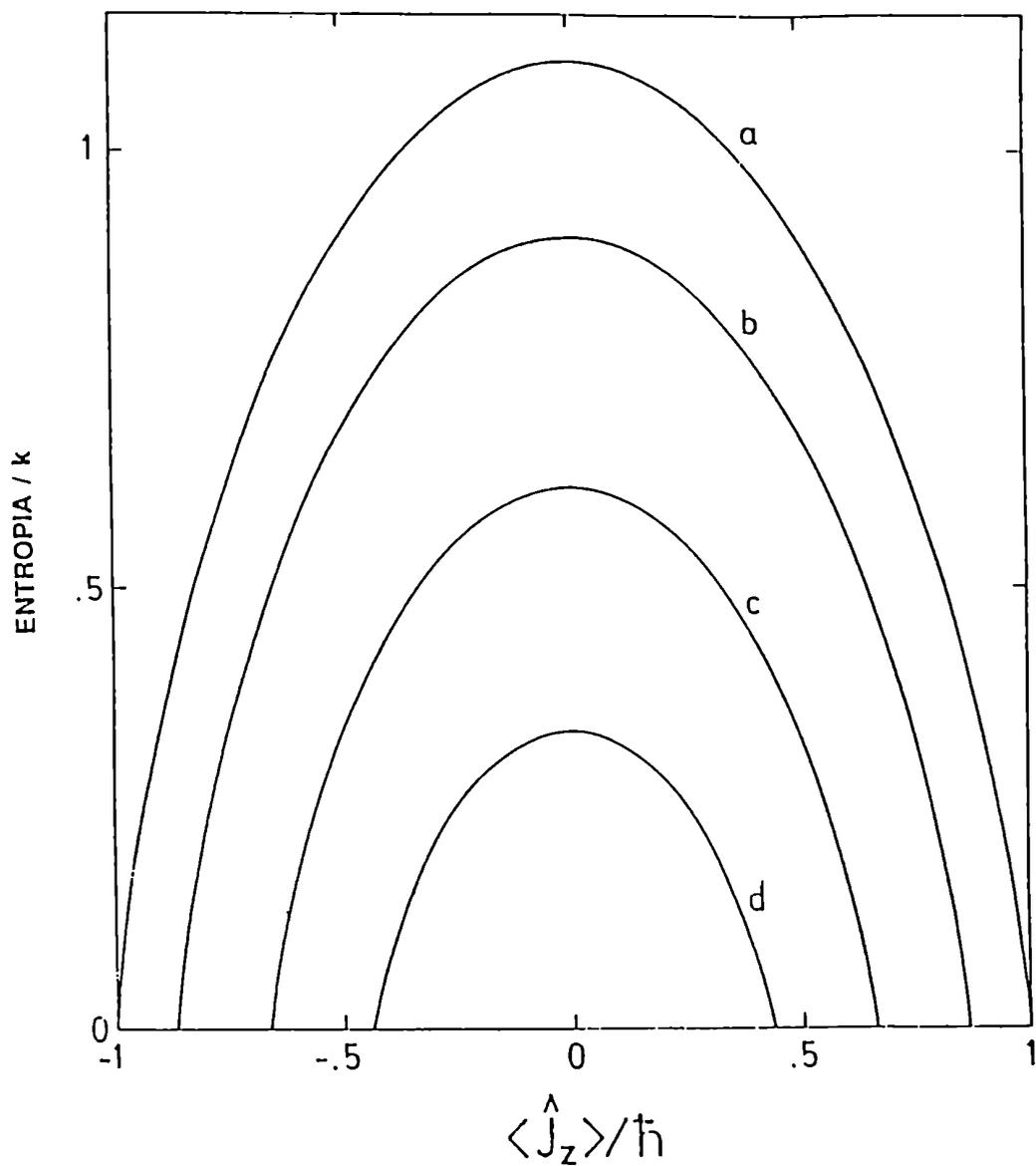


Figura 12: Efecto Zeeman dependiente del tiempo. Entropía versus $\langle \hat{H} \rangle$ para diferentes valores de $\langle \hat{J}_x \rangle / \hbar$. (a=0.0, b=0.5, c=0.75, d=0.9; $j=1$; $\langle \hat{J}_y \rangle = 0$.)

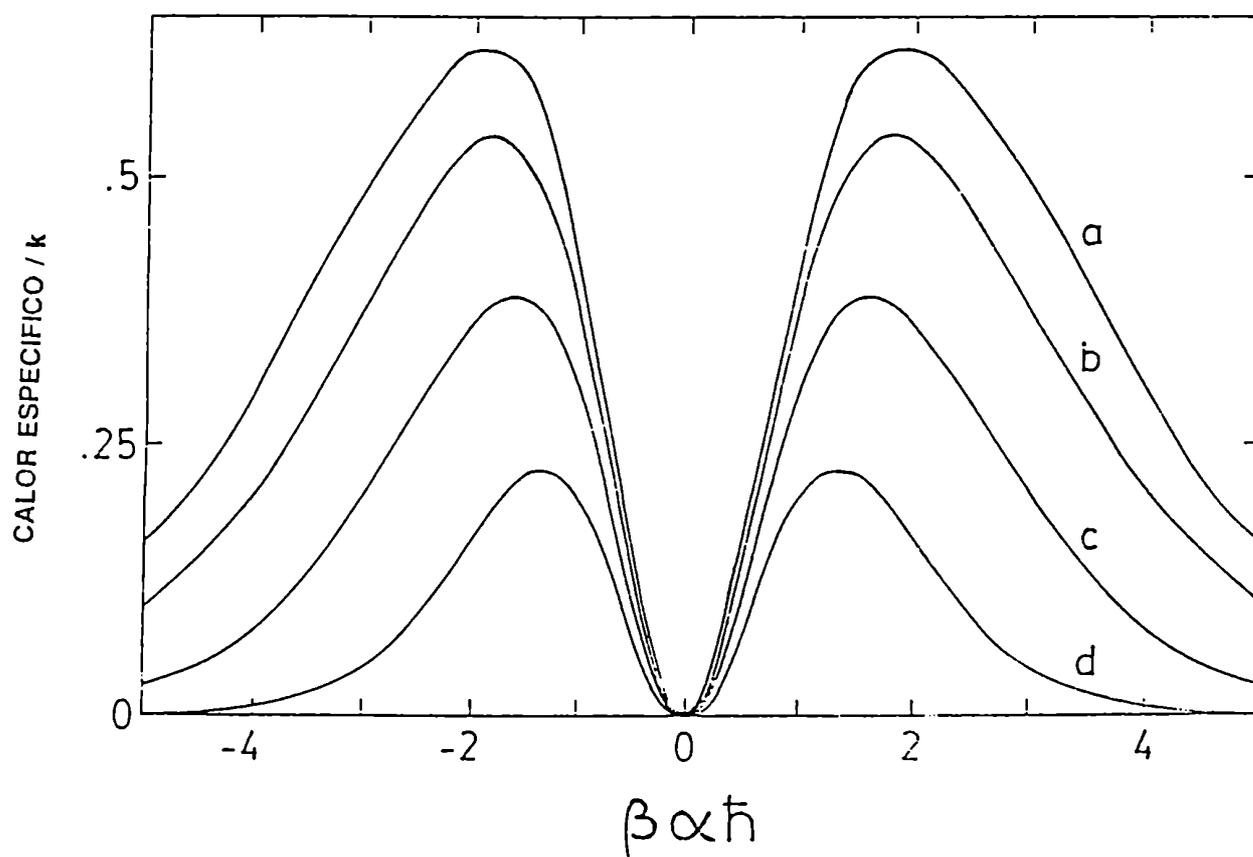


Figura 13: Efecto Zeeman dependiente del tiempo. Calor específico versus $\alpha \hbar \beta$ para diferentes valores de $\langle \hat{J}_x \rangle / \hbar$. ($a=0.0$, $b=0.5$, $c=0.75$, $d=0.9$; $j=1$; $\langle \hat{J}_y \rangle = 0$.)

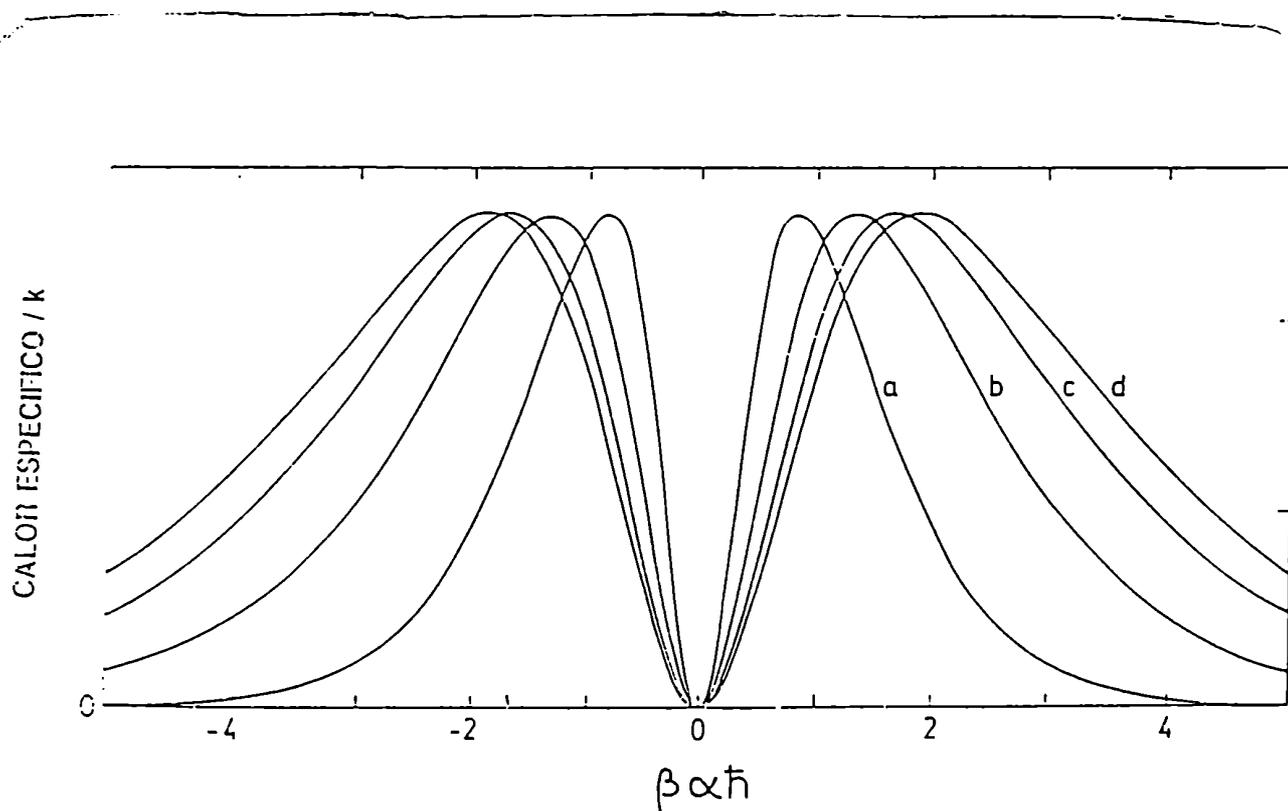


Figura 14: Efecto Zeeman dependiente del tiempo. Calor específico versus $\alpha \hbar \beta$ para diferentes valores de λ'_x / α . (a=0.0, b=0.5, c=1.0, d=2.0; $j=1$; $\langle \hat{J}_y \rangle = 0$.)
 escala de temperaturas sin cambiar la información.

La "ecuación de estado" dada por las Ecs. (V.4.4-6) está graficada en las figuras 15 y 16. En ellas se han fijado algunas variables a cero (ver epígrafes de las figuras) para obtener proyecciones de dimensión adecuada. A partir de estas figuras se puede dibujar una imagen pictórica tridimensional que se muestra en la figura 17.

V.4.b Efecto Zeeman independiente del tiempo

Supongamos ahora que el conjunto de operadores relevantes está formado por $(\hat{O}_0=\hat{1}, \hat{O}_1=\hat{H}=\alpha\hat{J}_z, \hat{O}_2=\alpha^2\hat{J}_z^2)$, por lo que \hat{J}_z y \hat{J}_z^2 son constantes de movimiento. Luego, la matriz densidad estará formada por operadores conmutantes y por lo tanto será de equilibrio,

$$\hat{\rho} = \exp(-\lambda_0 - \beta \alpha \hat{J}_z - \lambda \alpha^2 \hat{J}_z^2), \quad (\text{V.4.11})$$

a partir de la cual se calcula

$$\exp(\lambda_0) = \sum_{m=-j}^j \exp(-\beta \alpha m - \lambda \alpha^2 m^2), \quad (\text{V.4.12})$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \alpha \langle \hat{J}_z \rangle = \exp(-\lambda_0) \sum_{m=-j}^j \alpha m \exp(-\beta \alpha m - \lambda \alpha^2 m^2), \quad (\text{V.4.13})$$

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \alpha^2 \langle \hat{J}_z^2 \rangle = \exp(-\lambda_0) \sum_{m=-j}^j \alpha^2 m^2 \exp(-\beta \alpha m - \lambda \alpha^2 m^2). \quad (\text{V.4.14})$$

La entropía del sistema está dada por

$$S = \lambda_0 + \beta \alpha \langle \hat{J}_z \rangle + \lambda \alpha^2 \langle \hat{J}_z^2 \rangle, \quad (\text{V.4.15})$$

Esta función se muestra en la figura 18 en función de $\langle \hat{H} \rangle$. Los gráficos se obtienen

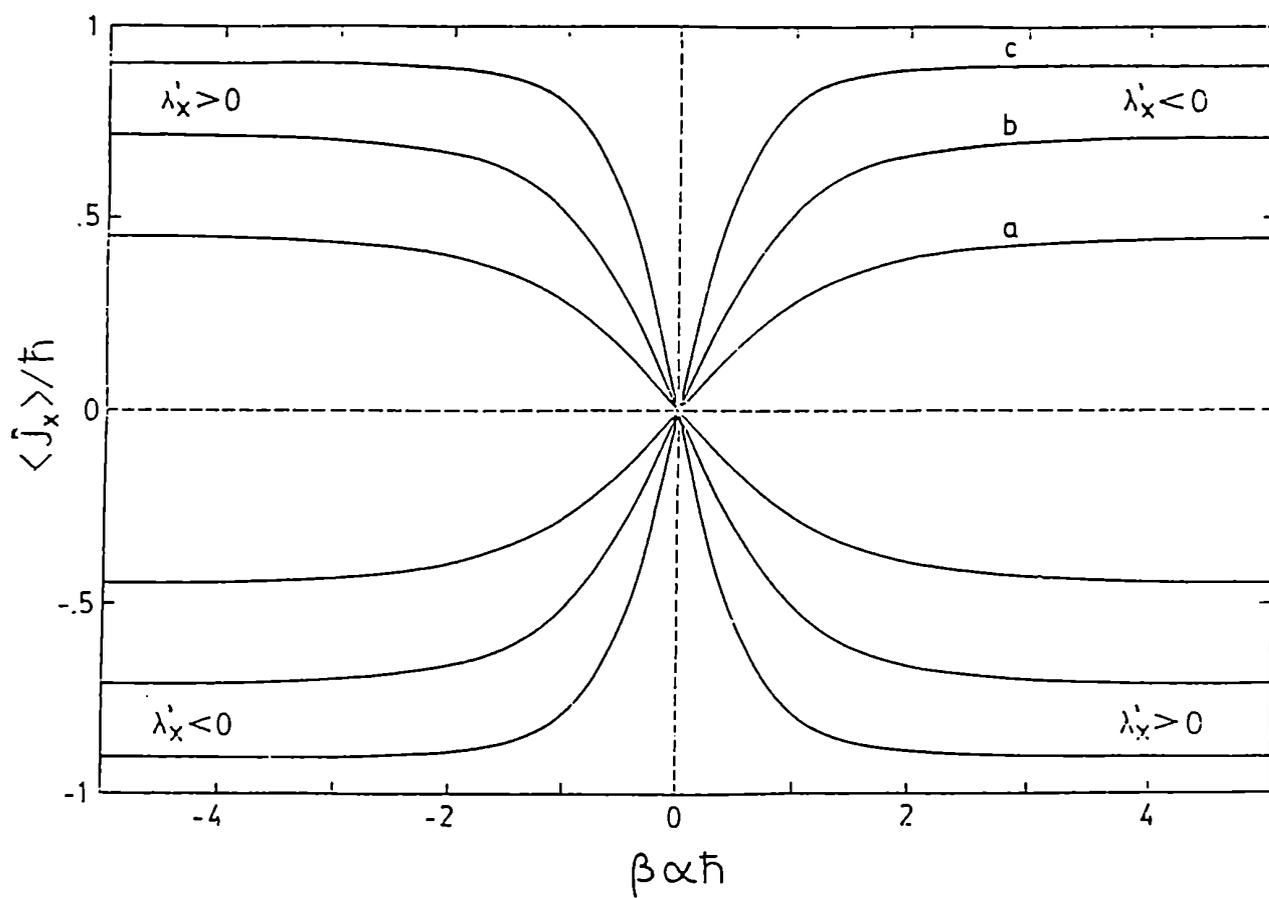


Figura 15: Efecto Zeeman dependiente del tiempo. $\langle \hat{J}_x \rangle$ versus $\alpha \hbar \beta$ para diferentes valores de λ'_x / α . ($a=0.5$, $b=1.0$, $c=2.0$; $j=1$)

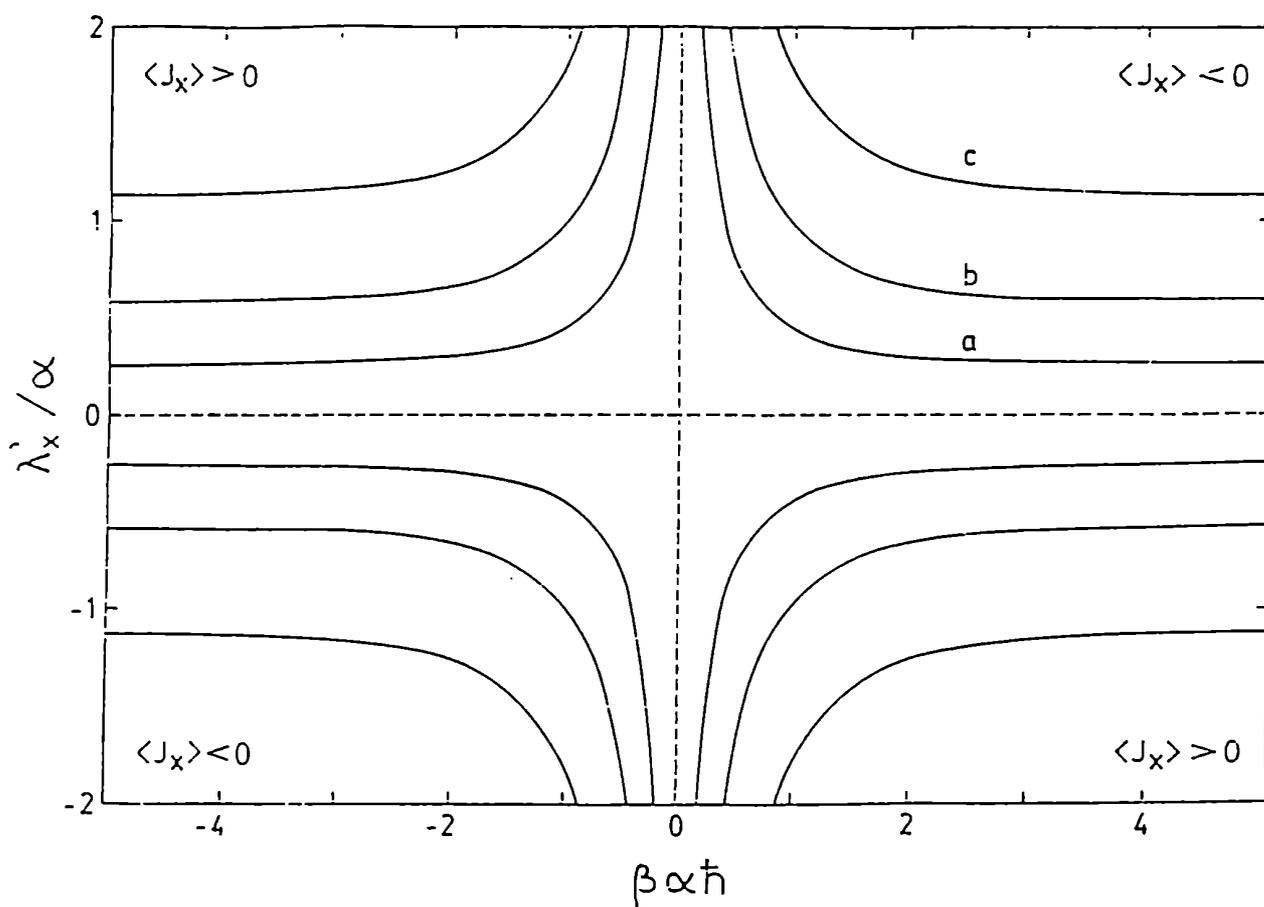


Figura 16: Efecto Zeeman dependiente del tiempo. λ'_x / α versus $\alpha \hbar \beta$ para diferentes valores de $\langle \hat{J}_x \rangle / \hbar$. ($a=0.25$, $b=0.5$, $c=0.75$; $j=1$)

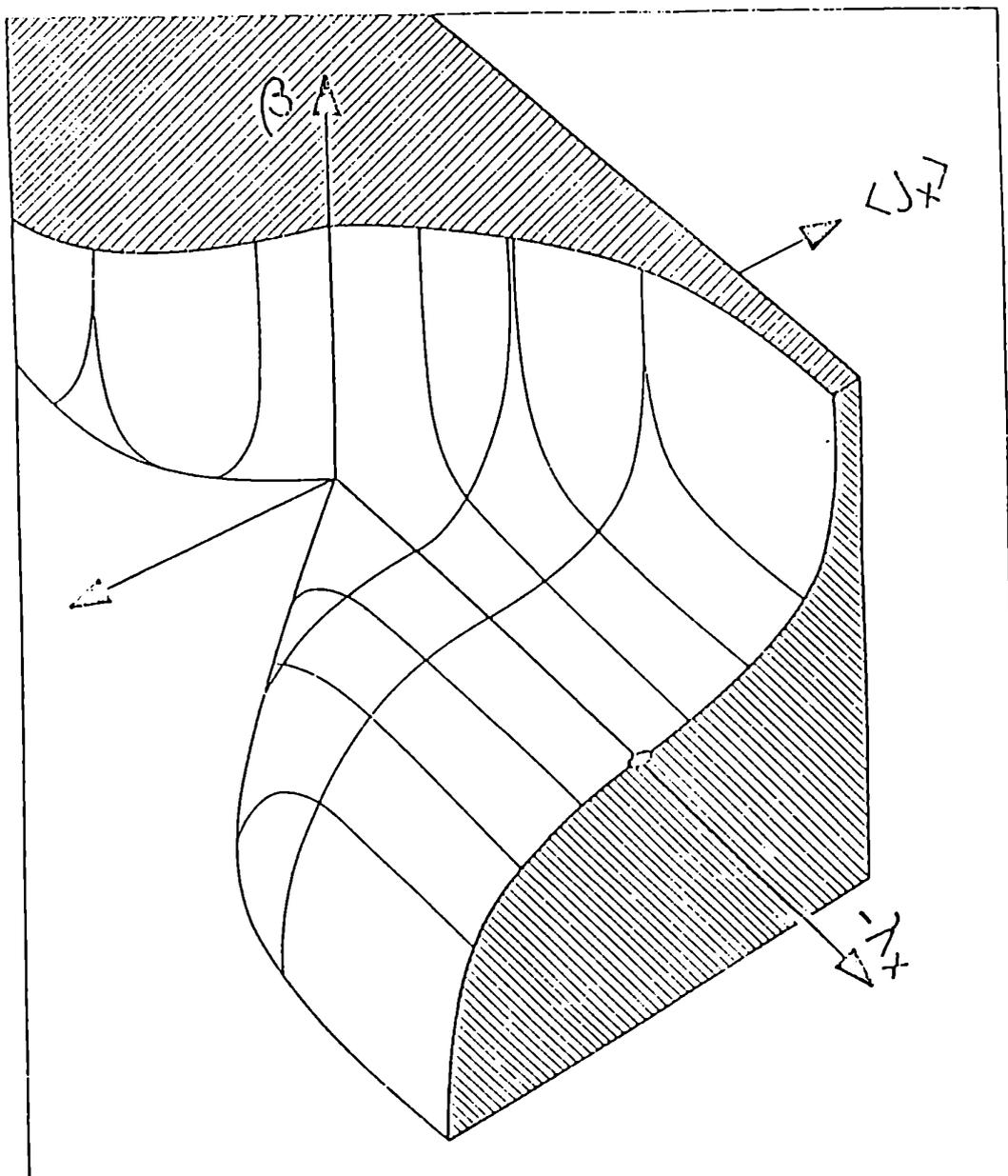


Figura 17: Efecto Zeeman dependiente del tiempo. Dibujo pictórico de la ecuación de estado. (relación entre $\langle \hat{J}_x \rangle$, λ_x' , y β con $\lambda_y' = 0$ y $\langle \hat{J}_y \rangle = 0$; $j=1$.)

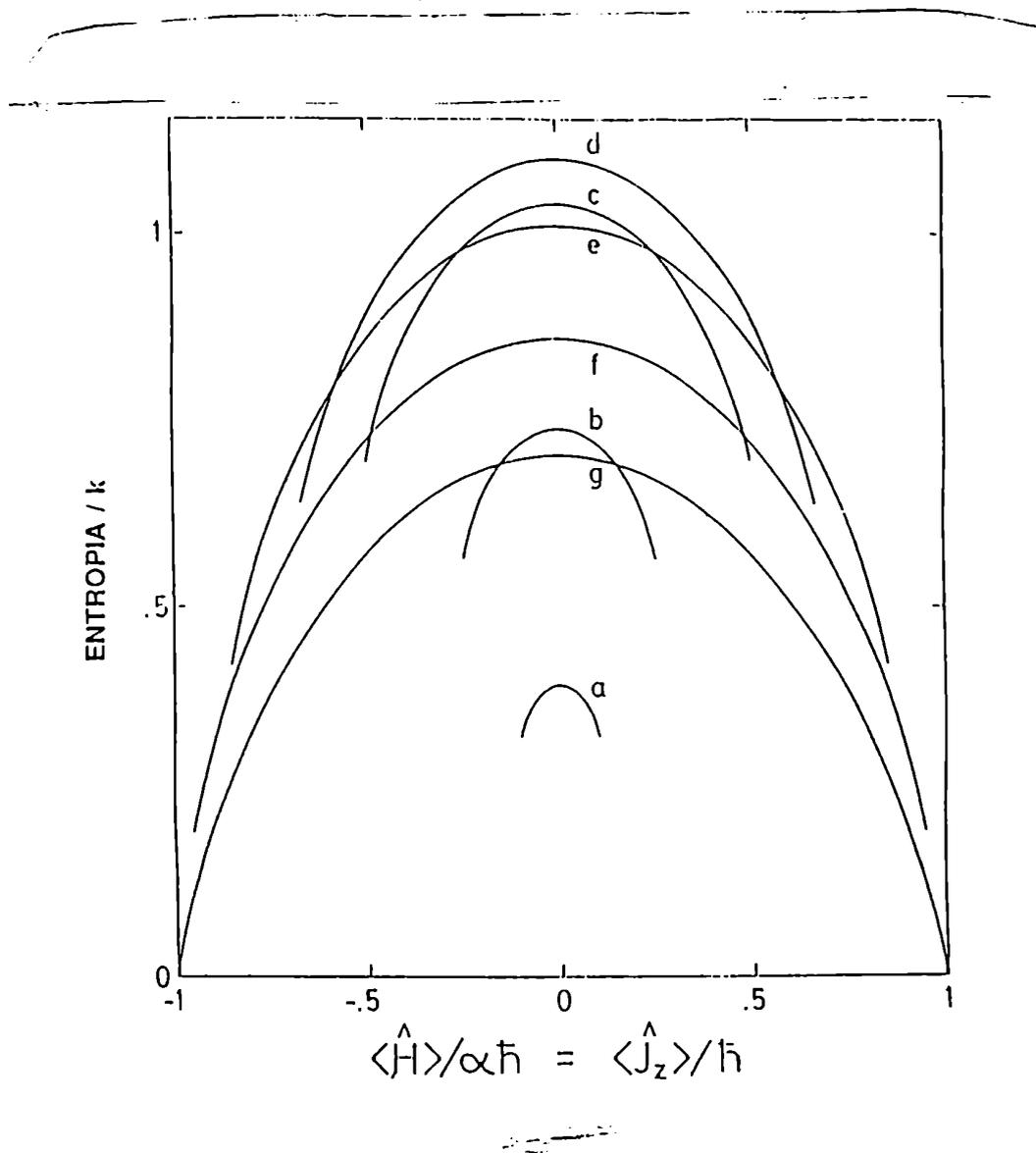


Figura 18: Efecto Zeeman independiente del tiempo. Entropía versus $\langle \hat{H} \rangle$ para diferentes valores de $\langle \hat{J}_z^2 \rangle / \hbar^2$. (a=0.1, b=0.25, c=0.5, d= $\frac{2}{3}$, e=0.85, f=0.95, g=0.999; j=1)

para distintos valores de $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$. Para una dada curva con $\langle \hat{J}_z^2 \rangle = \text{const}$, los valores de $\langle \hat{J}_z \rangle$ satisfacen $|\hbar \langle \hat{J}_z \rangle| \leq \langle \hat{J}_z^2 \rangle$, donde la igualdad se obtiene cuando $|\beta| \rightarrow \infty$. Obviamente, las curvas con $\langle \hat{J}_z^2 \rangle = \text{const}$ no son de máxima entropía. Estas curvas se obtienen cuando se considera el conjunto de operadores relevantes $\{\hat{O}_0 = \hat{I}, \hat{O}_1 = \hat{H} = \alpha \hat{J}_z\}$ (Fig. 12.(a)). Si se evalúa $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$ mediante este conjunto relevante para $\langle \hat{J}_z \rangle = 0$, se obtiene $\langle \hat{J}_z^2 \rangle = \frac{2}{3}$, que corresponde al estado con mínima información ($S = \ln 3$). Es interesante notar que hay una región en la figura 18 en la cual para cada par $(S, \langle \hat{J}_z \rangle)$ hay dos posibles valores de $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$ porque el conocimiento de S y $\langle \hat{J}_z \rangle$ no determina en forma unívoca el estado del sistema. Para este caso de equilibrio se necesitarían conocer tantos valores medios de operadores que conmuten como la dimensión del espacio de Hilbert.

Utilizando la Ec. (V.2.1) resulta

$$C = -\beta^2 \left\{ \alpha \frac{\partial \langle \hat{J}_z \rangle}{\partial \beta} + \delta \alpha^2 \frac{\partial \langle \hat{J}_z^2 \rangle}{\partial \beta} \right\}, \quad (\text{V.4.16})$$

con $\delta = \lambda / \beta$. También se puede definir

$$\begin{aligned} C_{\langle \hat{J}_z^2 \rangle}(\beta) &= -\alpha \beta^2 \left. \frac{\partial \langle \hat{J}_z \rangle}{\partial \beta} \right|_{\langle \hat{J}_z^2 \rangle} \\ &= \beta^2 \left(K_{11} + \left. \frac{\partial \lambda}{\partial \beta} \right|_{\langle \hat{J}_z^2 \rangle} K_{12} \right) \end{aligned} \quad (\text{V.4.17})$$

En la figura 19 se muestra $C_{\langle \hat{J}_z^2 \rangle}$ versus β para distintos valores de $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$. Se obtienen nuevamente dos máximos simétricos. Sin embargo, el calor específico a variables intensivas constantes resulta

$$C_{\delta}(\beta) = -\beta^2 \left(\alpha \left. \frac{\partial \langle \hat{J}_z \rangle}{\partial \beta} \right|_{\delta} + \delta \alpha^2 \left. \frac{\partial \langle \hat{J}_z^2 \rangle}{\partial \beta} \right|_{\delta} \right)$$

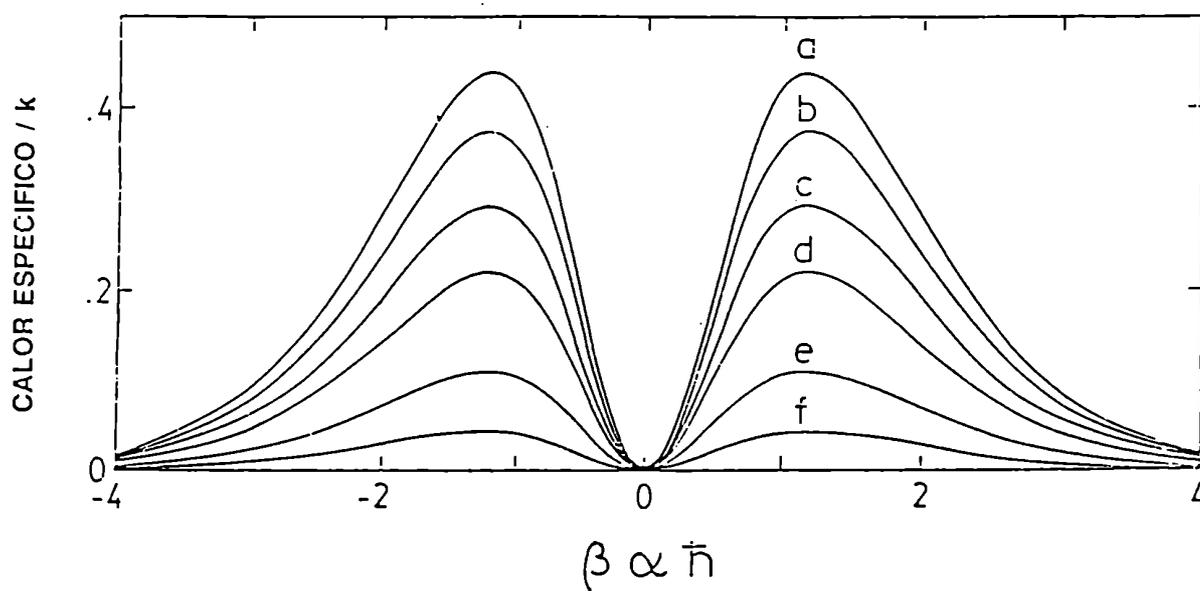


Figura 19: Efecto Zeeman independiente del tiempo. Calor específico versus $\alpha \hbar \beta$ para diferentes valores de $\langle \hat{J}_z^2 \rangle / \hbar^2$. (a=0.999, b=0.85, c= $\frac{2}{3}$, d=0.5, e=0.25, f=0.1; j=1)

$$= \beta^2 (K_{11} + \delta K_{12}) . \quad (V.4.18)$$

En las figuras 20 y 21 se muestra $C_\delta(\beta)$ versus β para dos casos distintos, $\delta < 1$ y $\delta \geq 1$. Se observa el máximo característico del efecto Schottky, pero las regiones con temperaturas positivas y negativas se comportan en forma diferente. Cuando $\delta \approx 0.5$ y $\beta > 0$ aparece un tercer máximo y su evolución a medida que varía δ se puede observar en el gráfico. Este máximo, que cambia de posición a medida que $\delta \rightarrow 1$, está relacionado con la correlación K_{12} entre \hat{J}_z y \hat{J}_z^2 . Cuando $\delta = 1$ este máximo desaparece y se reobtienen los máximos del efecto Schottky. En ambos casos los máximos no son simétricos, y son mayores que los que aparecieron en $C_{\langle \hat{J}_x^2 \rangle}$. Como puede observarse de esta descripción, el comportamiento del calor específico es el que corresponde a estados mixtos. Aún cuando se están considerando operadores de partículas independientes, los estados mixtos representan la información parcial que se posee sobre el sistema. Sin embargo, como es usual, el sistema puede ser considerado como un conjunto de partículas no interactuantes y la ignorancia estará asociada al estado de cada una de ellas.

V.4.c Aproximación para espacios de Hilbert infinitos

En el capítulo IV se desarrolló un método para calcular matrices densidad compuestas por operadores no-ligados con espacio de Hilbert infinito. Allí se presentó el modelo general y se particularizaron los resultados para el caso del Hamiltoniano del oscilador armónico. Se calcularon las evoluciones temporales y los valores medios para un espacio de Hilbert finito, que aproxima al espacio total. Se utilizarán los resultados presentados para efectuar el cálculo de la termodinámica de dicho sistema. Se recalca que el hecho de incorporar el Hamiltoniano al conjunto de operadores relevantes no modificará los resultados obtenidos para las dinámicas del sistema (Ecs. (IV.3.38-41)).

El conjunto de operadores relevantes será $\{\hat{O}_j\} = \{\hat{O}_0 = \hat{1}, \hat{O}_1 = \hat{H}, \hat{O}_2 = \hat{q}, \hat{O}_3 = \hat{p}\}$ pertenecientes al espacio de Hilbert general (en este caso infinito) y la matriz densidad

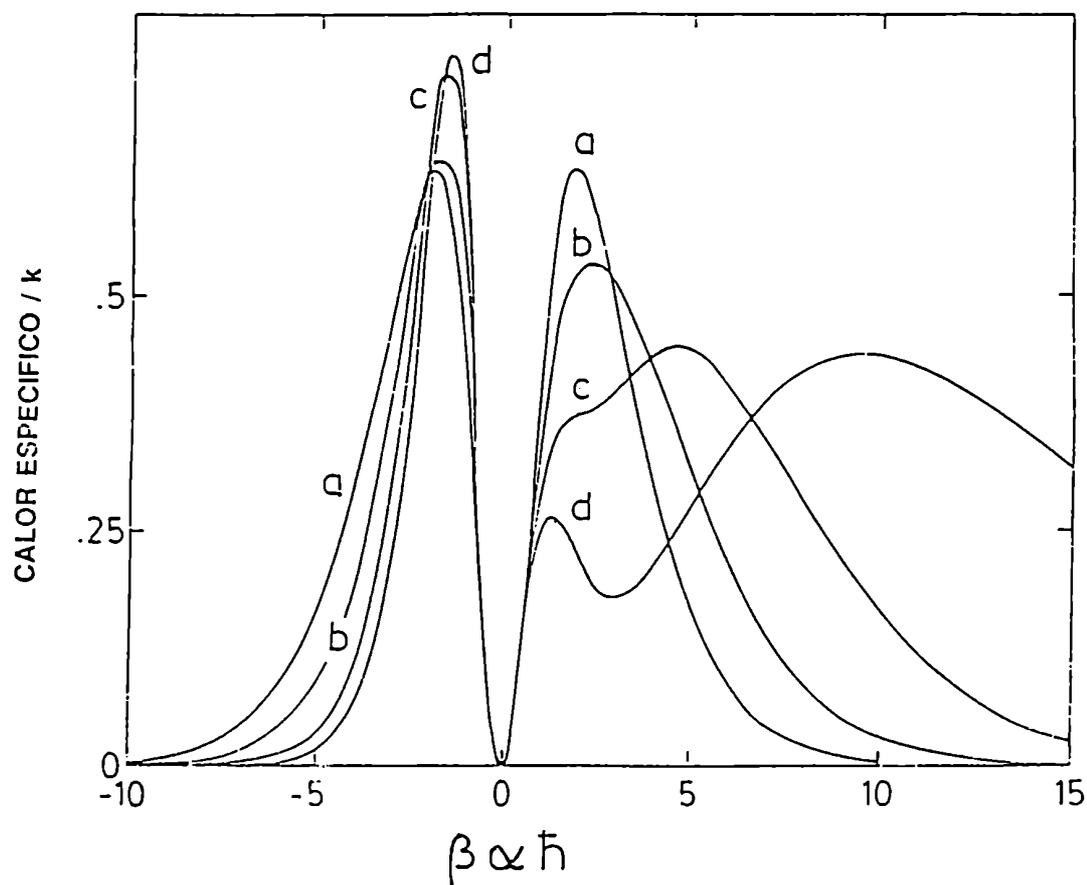


Figura 20: Efecto Zeeman independiente del tiempo. Calor específico versus $\alpha \hbar \beta$ para diferentes valores de $\delta \hbar / \alpha < 1$. (a=0.0, b=0.25, c=0.5, d=0.75; j=1.)

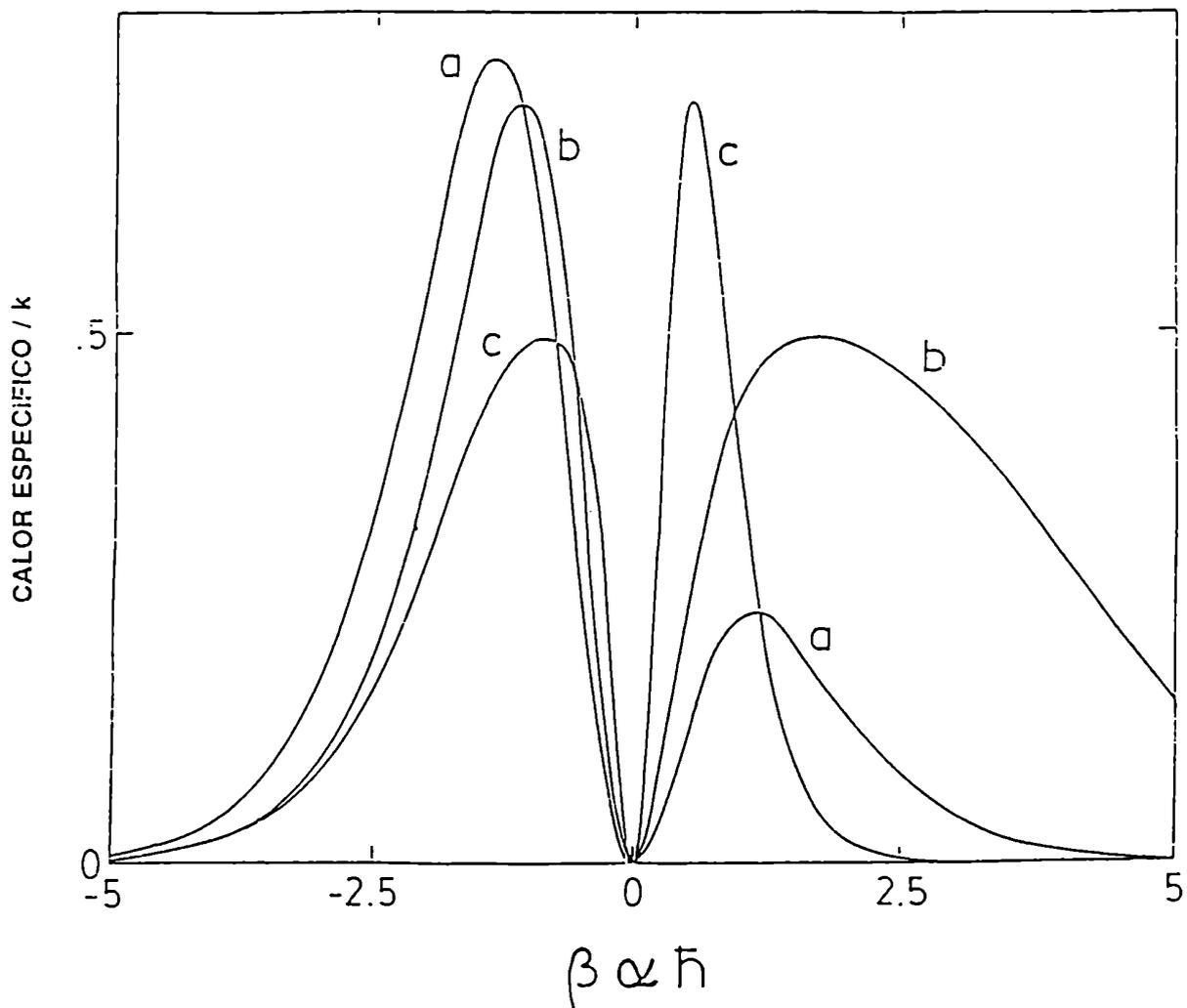


Figura 21: Efecto Zeeman independiente del tiempo. Calor específico versus $\alpha \hbar \beta$ para diferentes valores de $\delta \hbar / \alpha \geq 1$. (a=1.0, b=2.05, c=5.0; j=1.)

resultará

$$\ln \hat{\rho} = -\lambda_0 - \beta \hat{H} - \lambda_q \hat{q} - \lambda_p \hat{p} . \quad (\text{V.4.19})$$

El conjunto de operadores relevantes será reemplazado por el conjunto equivalente $\{ \hat{1}_N, \hat{H}_N, \hat{q}_N, \hat{p}_N, \hat{A}_N^{(1)}, \hat{A}_N^{(2)} \}$ en el espacio proyectado de dimensión finita G_N . Se utilizarán las siguientes condiciones iniciales mixtas:

$$\langle \hat{H}_N \rangle (t=0) = \langle \hat{H} \rangle_0 , \quad (\text{V.4.20})$$

$$\langle \hat{q}_N \rangle (t=0) = \langle \hat{q} \rangle_0 , \quad (\text{V.4.21})$$

$$\langle \hat{p}_N \rangle (t=0) = \langle \hat{p} \rangle_0 , \quad (\text{V.4.22})$$

$$\lambda_{\hat{A}_N^{(1)}} (t=0) = 0 , \quad (\text{V.4.23})$$

$$\lambda_{\hat{A}_N^{(2)}} (t=0) = 0 . \quad (\text{V.4.24})$$

La entropía del sistema será

$$S = \lambda_0^0 + \beta \langle \hat{H} \rangle_0 + \lambda_q^0 \langle \hat{q} \rangle_0 + \lambda_p^0 \langle \hat{p} \rangle_0 . \quad (\text{V.4.25})$$

La entropía, la energía, el calor específico y la ecuación de estado pueden ser evaluadas utilizando técnicas de cálculo numérico.

Como es de interés evaluar la exactitud de los resultados que se obtienen al truncar el espacio de Hilbert, se aprovechará el hecho que para este Hamiltoniano la matriz densidad de la Ec. (V.4.19) puede calcularse en forma exacta. Siguiendo la referencia 23 se define un nuevo operador de creación

$$\hat{b}^+ = \hat{a}^+ - \Omega \hat{1}, \quad (\text{V.4.26})$$

con

$$\Omega = \frac{-\lambda_q \gamma_1 + i \lambda_p \gamma_2}{\beta \hbar \omega}. \quad (\text{V.4.27})$$

El multiplicador de Lagrange λ_0 resulta

$$\lambda_0 = \beta^2 \hbar \omega |\Omega|^2 - \ln (2 \sinh (\beta \hbar \omega / 2)), \quad (\text{V.4.28})$$

y por lo tanto el valor medio de la energía será

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \hbar \omega |\Omega|^2 + \frac{\hbar \omega}{2} \coth (\beta \hbar \omega / 2) \\ &= \frac{\hbar \omega}{4} \left\{ \left(\frac{p_0}{\gamma_2} \right)^2 + \left(\frac{q_0}{\gamma_1} \right)^2 + 2 \coth (\beta \hbar \omega / 2) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{V.4.29})$$

En la referencia 23 se ha asociado el primer término de esta ecuación con la energía de una señal electromagnética y el segundo con la energía media asociada al ruido. La entropía exacta resulta

$$S = k \left\{ -\ln \left(2 \sinh \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) \right) - \frac{\beta \hbar \omega}{2} \coth \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) \right\}. \quad (\text{V.4.30})$$

En este cálculo exacto se ve que la entropía es independiente de los valores de $\langle \hat{q} \rangle$ y $\langle \hat{p} \rangle$. Esto implica que la falta de información sobre el sistema depende solo del ruido (β) pero no de la señal ($\langle \hat{q} \rangle$, $\langle \hat{p} \rangle$). Nótese que $\langle \hat{H} \rangle$ es una función de la señal y el ruido (Ec. (V.4.29)). Si $\langle \hat{H} \rangle = \text{const}$, cuando disminuye la relación señal ruido la entropía aumenta (variación termodinámica de la señal) y es máxima en ausencia de señal.

Esto puede apreciarse en la figura 22. Desde otro punto de vista, una disminución de la entropía implica moverse en la dirección $a \rightarrow d$ de las curvas, es decir incrementos en

$$\chi^2 = \left(\frac{p_0}{\gamma_2} \right)^2 + \left(\frac{q_0}{\gamma_1} \right)^2, \quad (\text{V.4.31})$$

que es la señal según la referencia 23. (En la figura 22, $\langle \hat{p} \rangle = 0$). Utilizando la Ec.(II.2.9) se obtiene

$$\langle \hat{q} \rangle = - \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_q} = - \frac{2 \gamma_1^2 \lambda_q}{\beta \hbar \omega} = \frac{2 \gamma_1^2 \lambda_q'}{\hbar \omega}, \quad (\text{V.4.32})$$

$$\langle \hat{p} \rangle = - \frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_p} = - \frac{2 \gamma_2^2 \lambda_p}{\beta \hbar \omega} = \frac{2 \gamma_2^2 \lambda_p'}{\hbar \omega}. \quad (\text{V.4.33})$$

Luego, las variables extensivas ($\langle \hat{q} \rangle$, $\langle \hat{p} \rangle$) resultan proporcionales a las variables intensivas (λ_q' , λ_p'). Mediante las Ecs. (II.5.2) y (II.5.7) se obtienen los valores iniciales de los coeficientes de correlación K_{ij}

$$K_{11} = - \frac{2 \hbar \omega |\Omega|^2}{\beta} - \frac{\hbar \omega}{2} \sinh (\beta \hbar \omega / 2) \quad (\text{V.4.34})$$

$$K_{12} = K_{21} = \frac{2 \gamma_1^2 \lambda_q}{(\beta \hbar \omega)^2} = - \frac{\langle \hat{q} \rangle}{\beta \hbar \omega}, \quad (\text{V.4.35})$$

$$K_{13} = K_{31} = \frac{2 \gamma_2^2 \lambda_p}{(\beta \hbar \omega)^2} = - \frac{\langle \hat{p} \rangle}{\beta \hbar \omega}, \quad (\text{V.4.36})$$

y por la Ec. (V.2.2),

$$C = k \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2} \sinh (\beta \hbar \omega / 2) \right). \quad (\text{V.4.37})$$

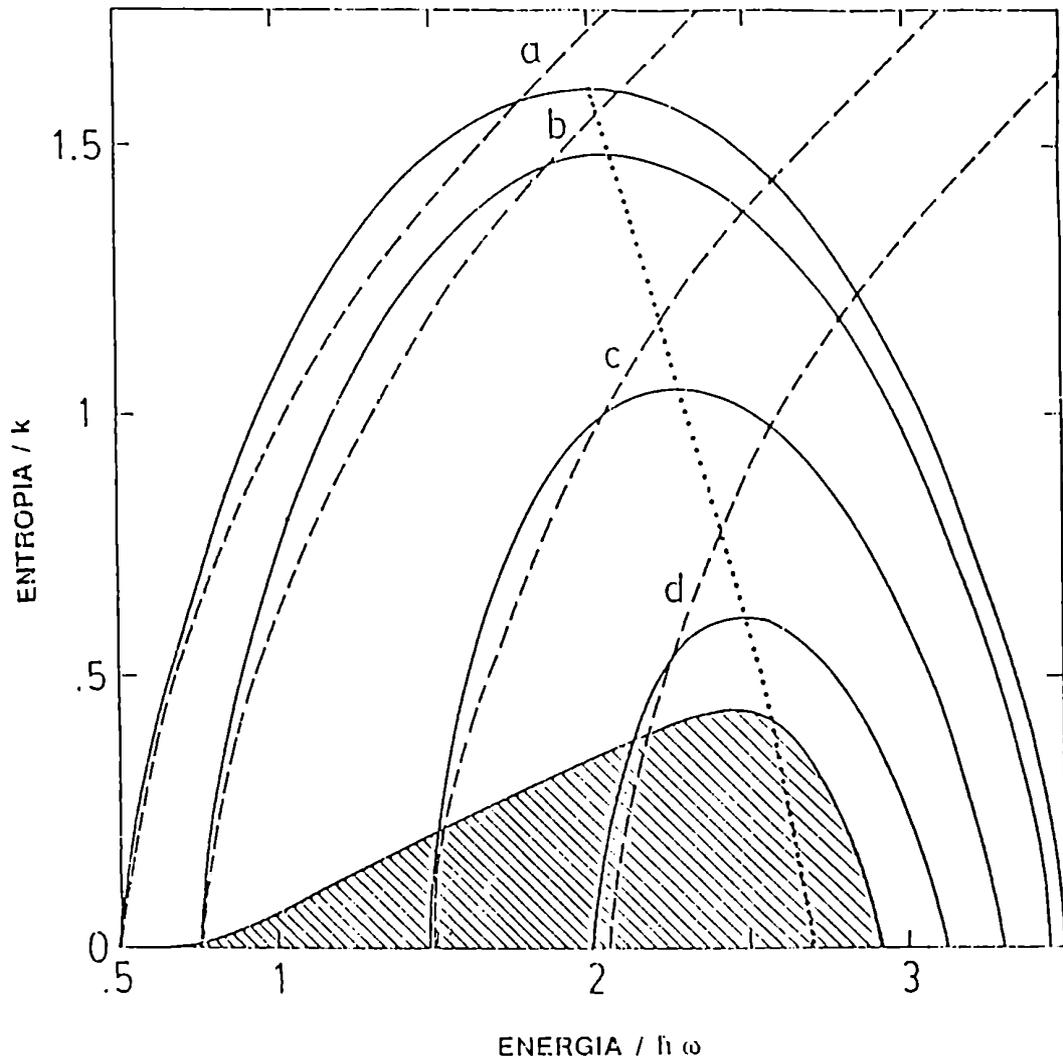


Figura 22: Oscilador armónico. Entropía versus $\langle \hat{H} \rangle$ para diferentes valores de $\langle \hat{q}_N \rangle / \gamma$. ($a=0.0$, $b=1.0$, $c=2.0$, $d=2.5$; $\langle \hat{p}_N \rangle = 0$.) evaluada en G_N , $N = 5$. Las líneas punteadas muestran las soluciones exactas. La línea punteada corresponde a $\beta = 0$ (las temperaturas positivas (negativas) se encuentran a la izquierda (derecha) de la línea punteada). En la zona sombreada se viola el principio de incerteza (Ec. (IV.6.13)).

Entonces, el calor específico canónico (ver sección V.2) depende solo de β y utilizando las Ecs. (V.3.10) y (V.3.16)

$$C = C_{\langle \hat{q} \rangle, \langle \hat{p} \rangle} = C_{\lambda'_q, \lambda'_p} \geq 0. \quad (\text{V.4.38})$$

Luego, el calor específico canónico, a variables extensivas constantes y a variables intensivas constantes son equivalentes. En la figura 22 se muestra la entropía versus $\langle \hat{H} \rangle$ como función de β , para distintos valores de $\langle \hat{q} \rangle$ con $\langle \hat{p} \rangle = 0$. La línea llena corresponde al cálculo numérico para $N = 5$. La solución exacta se graficó en líneas rayadas. La línea punteada, que corresponde a $\beta = 0$, pasa como es obvio por los máximos de las líneas llenas. En la zona rayada se viola el principio de Heisenberg, que fue calculado en la sección 6 del capítulo 4. Esta región fue evaluada numéricamente calculando

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - (\langle \hat{p} \rangle)^2}, \quad (\text{V.4.39})$$

$$\Delta q = \sqrt{\langle \hat{q}^2 \rangle - (\langle \hat{q} \rangle)^2}. \quad (\text{V.4.40})$$

para todos los casos considerados en la figura 22. Nótese que las regiones de temperaturas positivas y negativas no son simétricas como en la figura 12 (Sec. 4.a). Esto es consecuencia de la falta de simetría rotacional. Para temperaturas bajas, de la figura 22 se puede concluir que la aproximación es buena, a pesar que el número de estados es bajo ($N=5$). Para valores de $\langle \hat{q}_N \rangle$ pequeños, comparados con la dimensión del espacio truncado G_N , la aproximación mejora.

En la figura 23 se muestra $C_{\langle \hat{q} \rangle, \langle \hat{p} \rangle}$ versus β para distintos valores de $\langle \hat{q} \rangle$, con $\langle \hat{p} \rangle = 0$. En el espacio de Hilbert aproximado, $C_{\langle \hat{q} \rangle, \langle \hat{p} \rangle}$ es dependiente de $\langle \hat{q} \rangle$. En esta figura los puntos señalan la solución exacta. La figura 24 muestra $\langle \hat{q}_N \rangle$ versus λ'_q para distintos valores de $|\beta|$. La línea puntada corresponde a la solución exacta. En la figura 25 se muestra $\langle \hat{q}_N \rangle$ versus β para distintos valores de λ'_q .

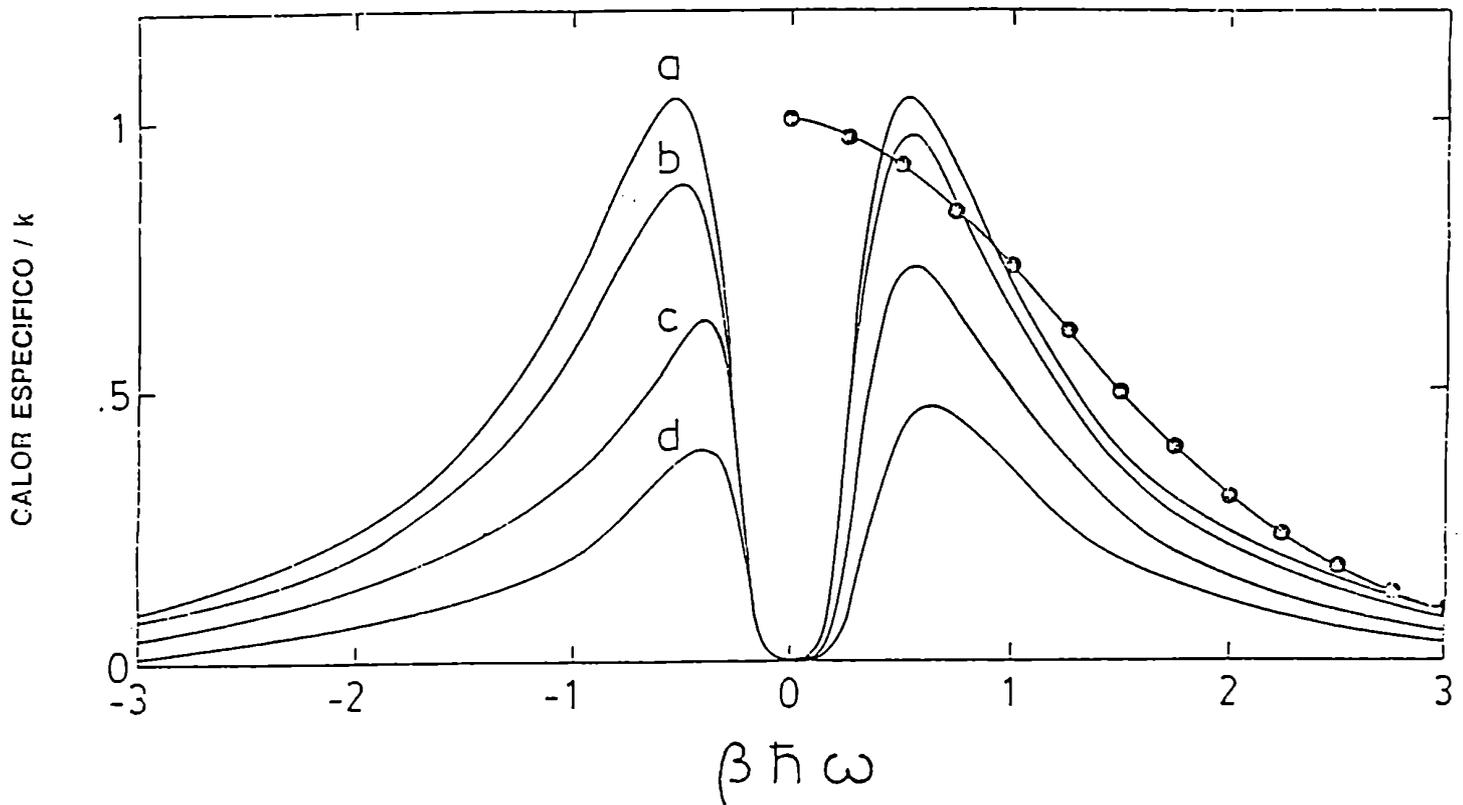


Figura 23: Oscilador armónico. Calor específico versus β para diferentes valores de $\langle \hat{q}_N \rangle / \gamma$. ($a=0.0$, $b=0.5$, $c=1.0$, $d=2.0$; $\langle \hat{p}_N \rangle = 0$.) evaluada en G_N , $N = 5$. Las líneas punteadas muestran las soluciones exactas.

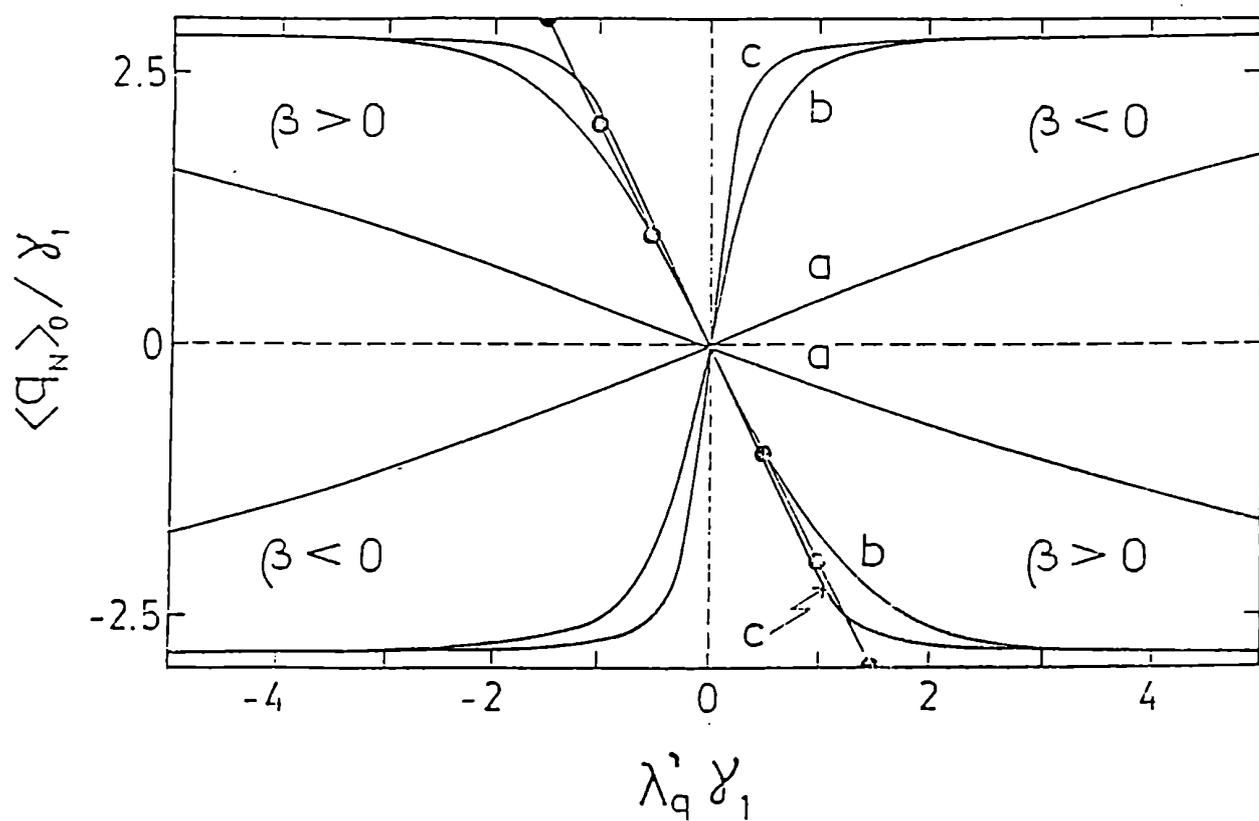


Figura 24: Oscilador armónico. $\langle \hat{q}_N \rangle / \gamma_1$ versus $\lambda'_q \gamma / \hbar \omega$ para diferentes valores de $|\beta| \hbar \omega$. ($a=0.1$, $b=1.0$, $c=5.0$; $\langle \hat{p}_N \rangle = 0$.) evaluada en G_N , $N = 5$. Las líneas punteadas muestran las soluciones exactas.

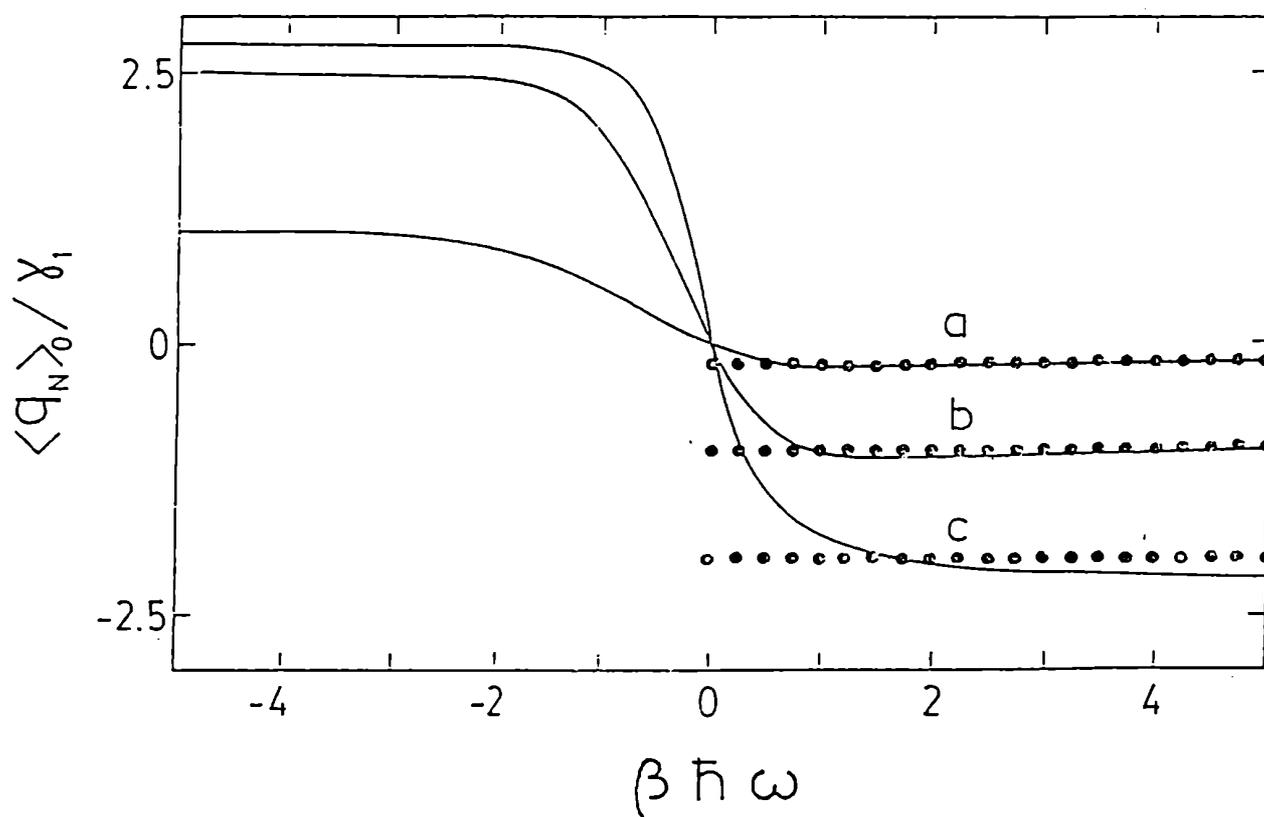


Figura 25: Oscilador armónico. $\langle \hat{q}_N \rangle / \gamma_1$ versus $\beta \hbar \omega$ para diferentes valores de $\lambda'_q \gamma / \hbar \omega$. (a=0.1, b=0.5, c=1.0; $\langle \hat{p}_N \rangle = 0$.) evaluada en G_N , $N = 5$. Las líneas punteadas muestran las soluciones exactas.

Si λ_q' y la temperatura son pequeños el resultado aproximado se torna independiente de N (dimensión de G_N).

A partir de las figuras 24 y 25, en la figura 26 se muestra un dibujo pictórico de la "ecuación de estado" El plano de líneas rayadas corresponde a la solución exacta. La solución aproximada tiende a ese plano cuando $N \rightarrow \infty$ (α y α' tienden a cero).

Se ha realizado de esta forma, un estudio termodinámico del problema y se ha evaluado al mismo tiempo el proceso de proyección desarrollado en el capítulo anterior. La aproximación demuestra ser buena, lo que hace posible su aplicación a sistemas en los que la solución exacta no existe.

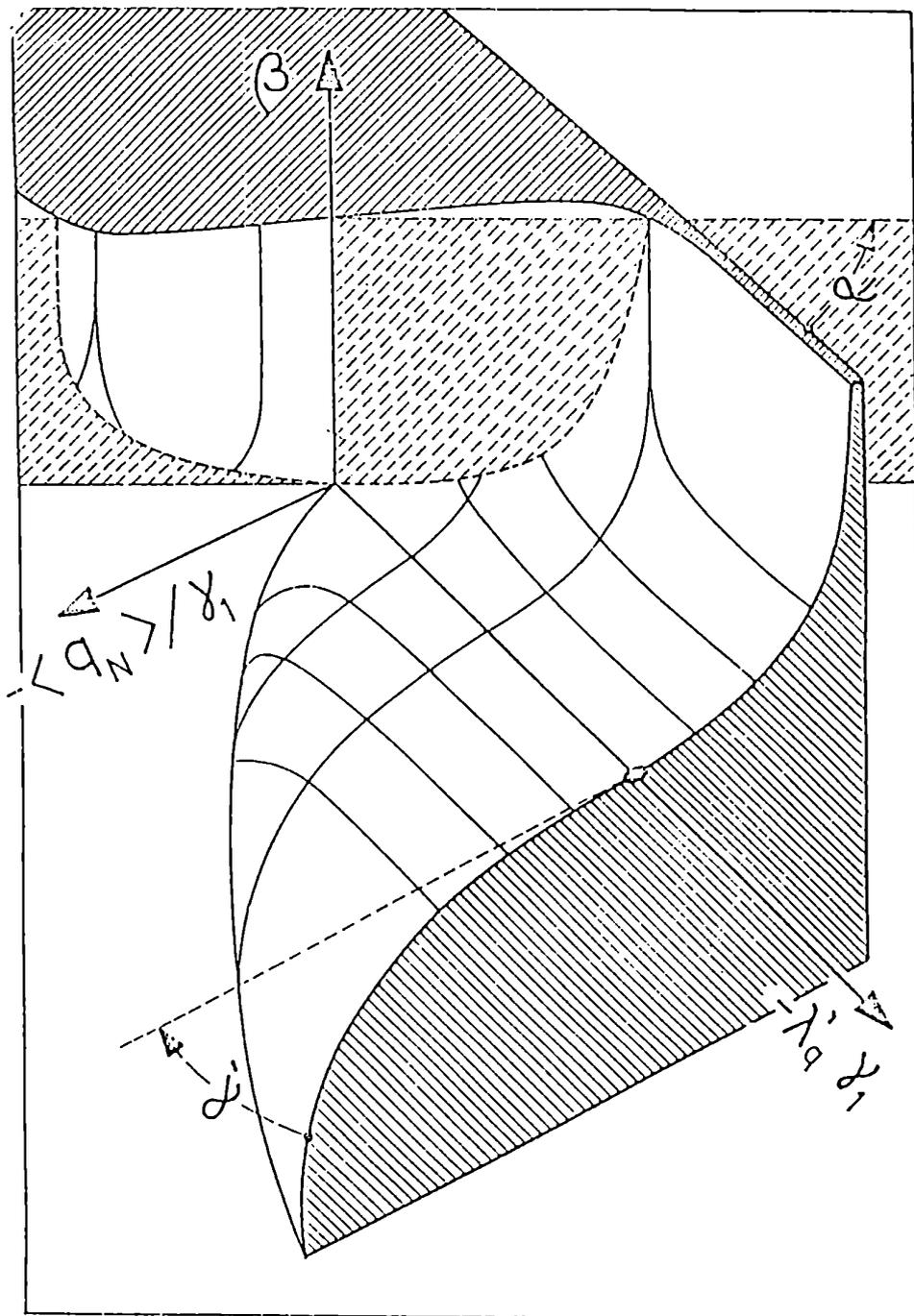


Figura 26: Oscilador armónico. Vista pictórica de la ecuación de estado (relación entre $\langle \hat{q}_N \rangle$, λ_q' y β para $\lambda_p' = 0$ y $\langle \hat{p}_N \rangle = 0$; $N = 5$). El plano con líneas rayadas corresponde a la solución exacta. Los ángulos α y α' muestran la diferencia entre la solución exacta y la aproximada para valores asintóticos de λ_q' ($0 < \hat{q}_N >$).

VI Evoluciones dinámicas disipativas y condiciones iniciales

VI.1 Sistemas dinámicos disipativos

En los tres capítulos anteriores se han desarrollado teorías que complementan y extienden los resultados preexistentes para la aplicación del principio de máxima entropía y la teoría de la información a sistemas dinámicos. En todos los casos se recalcó la importancia de la Ec. (II.3.3) de cierre de álgebra a los efectos de obtener tanto las evoluciones dinámicas como las variables relevantes del problema en cuestión. Los casos considerados se han caracterizado por tener evoluciones dinámicas conservativas. El objetivo de este capítulo será estudiar la posibilidad de describir evoluciones dinámicas disipativas para el caso de Hamiltonianos microscópicos que son independientes del tiempo y con ecuaciones de evolución lineales. Los resultados obtenidos se relacionarán con los valores iniciales de los operadores relevantes, remarcando de esta forma la importancia de las condiciones iniciales en el problema dinámico²⁴.

El comportamiento disipativo de muchos fenómenos físicos se contrapone con la naturaleza intrínsecamente reversible de los modelos físicos microscópicos^{25,26,27,28}. La disipación es, en general, el resultado de las interacciones entre el sistema observado y algún otro (observado o tácito, como un baño térmico) en el que la energía puede fluir en forma indeterminada, incontrolada y por lo tanto irreversible. Es generalmente aceptado que no ocurre disipación en el nivel microscópico, siendo el fenómeno observado el resultado de un efecto colectivo de muchos cuerpos en el que una dada partícula interactúa con un campo que proviene de la presencia de otras partículas. Es la energía disipada, que es cedida al campo, la que origina la disipación que se observa. Clásicamente, el correspondiente problema de muchos cuerpos puede ser reducido a un problema de un cuerpo, y uno se encuentra con la situación familiar de partículas sujetas a la acción de fuerzas disipativas.

En el caso cuántico sin embargo aparecen serias dificultades si se desea trabajar de manera similar, e históricamente se han seguido dos procedimientos de cuantificación:

i) se introduce un Hamiltoniano explícitamente dependiente del tiempo, con un momento canónico que no es el usual²⁷; o ii) se introduce un Hamiltoniano no-lineal²⁸ que incluye un potencial de fricción que depende de los valores medios de variables canónicas conjugadas. El tratamiento de Kanai a recibido gran atención²⁹, pero produce resultados que son considerados no-físicos²⁶. Una de estas dificultades es que esta teoría parece violar el principio de incerteza. El procedimiento de segunda cuantificación mencionado anteriormente como la teoría no lineal presenta grandes problemas de interpretación^{30,31}. Por ejemplo no se pueden superponer las soluciones, y métodos como el de teoría de perturbaciones no pueden aplicarse con confianza.

Estas dificultades han despertado el interés en estudiar la posibilidad de describir evoluciones disipativas a partir del formalismo de teoría de la información descrito en el capítulo II. Para esta formulación serán fundamentales tanto la Ec. (II.3.3) que determina los operadores relevantes del problema y sus ecuaciones de evolución, como la Ec. (II.2.9) que relaciona los valores medios o condiciones iniciales impidiendo que estas puedan tomar valores arbitrarios.

VI.2 Influencia de las condiciones iniciales y la matriz \mathbf{Q} en las evoluciones disipativas

Como se ha mencionado en la sección anterior, la disipación aparece como una consecuencia de las interacciones entre un dado subsistema y "el resto del universo", usualmente denominado fuente, ya sea esta térmica o no²⁵. Para restringir la atención al subsistema de interés, el procedimiento usual para trabajar con variables irrelevantes es eliminarlas por medio de operadores de proyección adecuados. En cambio, se propondrá redefinir³² lo que se entiende por "sistema" y "resto del universo", asumiendo que ambos forman parte de un "super sistema" descrito por un Hamiltoniano.

Como se ha mostrado en la referencia 6, dado un Hamiltoniano y un conjunto (inicial) (\hat{O}_j^m) de operadores, cuyos valores medios son accesibles a mediciones experimentales (el supraíndice m indica medibles), es posible dar un mecanismo para construir un subespacio adecuado (el "relevante") del espacio de Hilbert a través del

proceso de cierre definido por la Ec. (II.3.3). En otras palabras, el conjunto de operadores medibles da lugar a operadores adicionales que pueden aumentar el conjunto inicial, o por el contrario ser tratados como "no-medibles". Por ejemplo, en el caso del oscilador armónico, se puede comenzar con el conjunto $\{ \hat{x}, \hat{p}, \hat{x}^2, \hat{p}^2/2m \}$ como operadores medibles y la Ec. (II.3.3) introducirá a $\hat{L} = \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}$ como operador no-medible (el operador identidad se incluye siempre entre los \hat{O}_j^m para asegurar que la matriz densidad es normalizable).

Esta aproximación a las disipaciones temporales disipativas consiste en: 1) definir el supersistema como el descrito por todos los operadores, medibles o no, definidos por la Ec. (II.3.3), y 2) asumir que los últimos dan lugar al flujo de energía mientras que los primeros describen el sistema. La relación de cierre de álgebra desacopla al "supersistema" del universo real externo.

En la referencia 6 se encuentra la forma general de la solución de la Ec. (II.3.6), que determina el comportamiento temporal de los valores medios para un dado Hamiltoniano. La situación se torna particularmente sencilla cuando \hat{H} es independiente del tiempo, para la cual los coeficientes g_{ij} de la Ec. (II.3.6) son independientes del tiempo. Los $\langle \hat{O}_j \rangle_t$ son entonces soluciones de un sistema de ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes constantes. Por lo tanto,

$$\langle \hat{O}_j \rangle_t = \sum_{i=1}^k \exp^{R_i t} \sum_{m=0}^{\gamma} a_{im}^{(j)} t^m, \quad (\text{VI.2.1})$$

donde k es el número de raíces diferentes R_i de la correspondiente ecuación secular, los $a_{im}^{(j)}$ son constantes a ser determinadas por las condiciones iniciales y $\gamma+1$ es la multiplicidad de R_i . Luego, puede observarse que *los autovalores de la matriz \underline{G} determinan el tipo de evolución del sistema dinámico*, al menos en el caso de Hamiltonianos independientes del tiempo. Por lo tanto, una condición *necesaria* para obtener evoluciones temporales disipativas es la existencia de *autovalores reales* de la

matriz \underline{G} .

Ahora se hará incapié en la importancia de las condiciones iniciales en dar una descripción correcta del problema en cuestión. Como se ha mencionado en la sección anterior, el álgebra construida bajo conmutación con el Hamiltoniano determina no solo los aspectos dinámicos del problema, sino también los posibles valores medios de los operadores relevantes. Esta restricción aparece porque todos los operadores relevantes, medibles o no, deben satisfacer la Ec. (II.2.4) y la condición de normalización (II.2.6). Un ejemplo trivial de esta limitación es el hecho que la dispersión cuadrática media es definida positiva. Esta condición es necesaria para obtener una distribución de probabilidad bien definida ($\rho_{ii} = \langle \psi_i | \psi_i \rangle > 0$) pero esto determina que $\langle \hat{O}_i \rangle^2 \leq \langle \hat{O}_i^2 \rangle$. Luego, no es posible seleccionar $\langle \hat{O}_i \rangle^2$ y $\langle \hat{O}_i^2 \rangle$ en forma completamente independiente sin violar la condición de normalización o el carácter probabilístico de la matriz densidad.

Por lo tanto, hay dos aspectos especiales de esta formulación: a) asumir la existencia de un conjunto de operadores $\{ \hat{O}_i, i=1, \dots, q \}$, relevante al problema físico en cuestión, que cierra un álgebra parcial de Lie bajo conmutación con el Hamiltoniano \hat{H} . Los elementos g_{ij} de la matriz \underline{G} determinan el comportamiento disipativo o conservativo de la evolución temporal de los valores medios de los operadores (Ec. (II.3.6)); y b) la existencia de un conjunto coherente de condiciones iniciales para *todos* los operadores relevantes. A los efectos de resaltar la importancia de ambas condiciones, en la siguiente sección se discutirá un ejemplo en el cual los autovalores de la matriz \underline{G} son reales, satisfaciendo la condición a) para evoluciones temporales disipativas, pero no la condición b) sobre los valores medios iniciales.

VI.3 Evoluciones temporales disipativas para el modelo de dos osciladores acoplados

En esta sección se recurrirá a un modelo de dos sistemas interactuantes a los efectos de aplicar el mecanismo descrito en la sección anterior. Se lo aplicará a una generalización del Hamiltoniano cuántico de un oscilador amortiguado generado a partir del Hamiltoniano dual de Bateman^{25,33}. Sean \hat{a} , \hat{a}^+ los operadores bosónicos de segunda

cuantificación para uno de los osciladores y \hat{b} , \hat{b}^+ los asociados al otro, de forma tal que

$$\hat{H}_a = \epsilon_a (\hat{a}^+ \hat{a} + 1/2) = \epsilon_a \hat{T}_a \quad (\text{VI.3.1})$$

$$\hat{H}_b = \epsilon_b (\hat{b}^+ \hat{b} + 1/2) = \epsilon_b \hat{T}_b \quad (\text{VI.3.2})$$

son los Hamiltonianos de cada uno de los osciladores si estos no interactúan. A los efectos de introducir la interacción se definirán los siguientes operadores de cuasi-spin

$$\hat{S}_- = \hat{b} \hat{a}^+ , \quad (\text{VI.3.3})$$

$$\hat{S}_+ = \hat{a}^+ \hat{b}^+ , \quad (\text{VI.3.4})$$

$$\hat{T}_{ab} = \hat{S}_+ + \hat{S}_- , \quad (\text{VI.3.5})$$

$$\hat{S}_{ab} = i (\hat{S}_+ - \hat{S}_-) , \quad (\text{VI.3.6})$$

que permiten expresar al Hamiltoniano como

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_b + v_1 \hat{T}_{ab} + v_2 \hat{S}_{ab} \quad (\text{VI.3.7})$$

de forma tal que se cierra el siguiente álgebra parcial de Lie

$$[\hat{H} , \hat{T}_a] = [\hat{H} , \hat{T}_b] = i (v_1 \hat{S}_{ab} - v_2 \hat{T}_{ab}) , \quad (\text{VI.3.8})$$

$$[\hat{H} , \hat{T}_{ab}] = -i [(\epsilon_a + \epsilon_b) \hat{S}_{ab} + 2 v_2 (\hat{T}_a + \hat{T}_b)] , \quad (\text{VI.3.9})$$

$$[\hat{H} , \hat{S}_{ab}] = i [(\epsilon_a + \epsilon_b) \hat{T}_{ab} + 2 v_1 (\hat{T}_a + \hat{T}_b)] . \quad (\text{VI.3.10})$$

Por la condición de clausura (Ec. (II.3.3)), se obtiene la matriz \underline{G} ($\hat{O}_0 = 1$, $\hat{O}_1 = \hat{T}_a$, $\hat{O}_2 = \hat{T}_b$, $\hat{O}_3 = \hat{T}_{ab}$, $\hat{O}_4 = \hat{S}_{ab}$)

$$g_{04} = g_{40} = 0 \quad g_{34} = -g_{43} = (\epsilon_a + \epsilon_b) / \hbar \quad (\text{VI.3.11})$$

$$g_{14} = g_{24} = 2 v_1 / \hbar \quad g_{41} = g_{42} = 2 v_1 / \hbar \quad (\text{VI.3.12})$$

$$g_{13} = g_{23} = -2 v_2 / \hbar \quad g_{31} = g_{32} = -2 v_2 / \hbar \quad (\text{VI.3.13})$$

y los restantes elementos son nulos. Como se ha demostrado en el capítulo II, la matriz \underline{G} definida por la ecuación (II.3.3) contiene toda la dinámica del sistema y, en particular, las distintas raíces de la ecuación secular de la matriz \underline{G} son los coeficientes de las funciones exponenciales que caracterizan a la solución del problema (se asume que \hat{H} es independiente del tiempo). *Cuando estas raíces son reales, puede tener lugar un comportamiento disipativo si son seleccionadas algunas condiciones iniciales muy especiales.* Las ecuaciones de movimiento para los operadores relevantes toman la forma

$$\frac{d \langle \hat{T}_a \rangle_t}{d t} = (v_2 / \hbar) \langle \hat{T}_{ab} \rangle_t - (v_1 / \hbar) \langle \hat{S}_{ab} \rangle_t \quad (\text{VI.3.14})$$

$$\frac{d \langle \hat{T}_b \rangle_t}{d t} = (v_2 / \hbar) \langle \hat{T}_{ab} \rangle_t - (v_1 / \hbar) \langle \hat{S}_{ab} \rangle_t \quad (\text{VI.3.15})$$

$$\frac{d \langle \hat{T}_{ab} \rangle_t}{d t} = (2 v_2 / \hbar) (\langle \hat{T}_a \rangle_t + \langle \hat{T}_b \rangle_t) + [(\epsilon_a + \epsilon_b) / \hbar] \langle \hat{S}_{ab} \rangle_t \quad (\text{VI.3.16})$$

$$\frac{d \langle \hat{S}_{ab} \rangle_t}{d t} = - [(2 v_1 / \hbar) (\langle \hat{T}_a \rangle_t + \langle \hat{T}_b \rangle_t) + [(\epsilon_a + \epsilon_b) / \hbar] \langle \hat{T}_{ab} \rangle_t] . \quad (\text{VI.3.17})$$

Estas ecuaciones pueden ser integradas fácilmente si se resuelve

$$\det (\underline{G} - \lambda \underline{I}) = 0 \quad (\text{VI.3.18})$$

Se obtiene que los autovalores se la matriz \underline{G} son

$$\lambda^2 = [4 (v_1^2 + v_2^2) - \epsilon^2] / \hbar^2 \quad (\text{VI.3.19})$$

donde

$$\epsilon = \epsilon_a + \epsilon_b . \quad (\text{VI.3.20})$$

Por lo tanto, las soluciones de las Ecs.(VI.3.14-17) son

$$\begin{aligned} \langle \hat{T}_a \rangle_t = & \langle \hat{T}_a \rangle_0 - \frac{1}{\lambda^2 \hbar^2} \{ 2 (v_1^2 + v_2^2) (\langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0) + \epsilon (v_1 \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 + v_2 \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0) - \\ & - [\exp(\lambda t) f(\lambda) + \exp(-\lambda t) g(\lambda)] / 2 \} , \end{aligned} \quad (\text{VI.3.21})$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{T}_b \rangle_t = & \langle \hat{T}_b \rangle_0 - \frac{1}{\lambda^2 \hbar^2} \{ 2 (v_1^2 + v_2^2) (\langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0) + \epsilon (v_1 \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 + v_2 \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0) - \\ & - [\exp(\lambda t) f(\lambda) + \exp(-\lambda t) g(\lambda)] / 2 \} , \end{aligned} \quad (\text{VI.3.22})$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{T}_{ab} \rangle_t = & \frac{1}{\lambda^2 \hbar^2} \{ 2 v_1 \epsilon (\langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0) + 4 v_1 (v_1 \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 + v_2 \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0) + \\ & + \frac{[\exp(\lambda t) (v_2 \lambda \hbar - \epsilon v_1) f(\lambda) - \exp(-\lambda t) [(v_2 \lambda \hbar + \epsilon v_1) g(\lambda)]]}{2 (v_1^2 + v_2^2)} \} , \end{aligned} \quad (\text{VI.3.23})$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_{ab} \rangle_t = & \frac{1}{\lambda^2 \hbar^2} \{ 2 v_2 \epsilon (\langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0) + 4 v_2 (v_1 \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 + v_2 \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0) - \\ & - \frac{[\exp(\lambda t) (v_2 \lambda \hbar - \epsilon v_1) f(\lambda) - \exp(-\lambda t) [(v_2 \lambda \hbar + \epsilon v_1) g(\lambda)]]}{2 (v_1^2 + v_2^2)} \} , \end{aligned} \quad (\text{VI.3.24})$$

con

$$f(\lambda) = 2 (v_1^2 + v_2^2) (\langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0) + \quad (VI.3.25)$$

$$+ (v_2 \lambda \hbar + \varepsilon v_1) \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 - (v_1 \lambda \hbar - \varepsilon v_2) \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0 ,$$

$$g(\lambda) = 2 (v_1^2 + v_2^2) (\langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0) - \quad (VI.3.26)$$

$$- (v_2 \lambda \hbar - \varepsilon v_1) \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 + (v_1 \lambda \hbar + \varepsilon v_2) \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0 .$$

Dos regímenes distintos tienen lugar de acuerdo con el valor de la constante de acoplamiento. Para

$$(v_1^2 + v_2^2) < (\varepsilon / 2)^2 \quad (VI.3.27)$$

las evoluciones temporales de $\langle \hat{T}_a \rangle_t$, $\langle \hat{T}_b \rangle_t$, $\langle \hat{T}_{ab} \rangle_t$, $\langle \hat{S}_{ab} \rangle_t$ adoptan un carácter estacionario (funciones oscilantes). De mayor interés se el caso opuesto, es decir,

$$(v_1^2 + v_2^2) > (\varepsilon / 2)^2 \quad (VI.3.28)$$

para el cual λ es real (ver Ec. (VI.3.19) y se obtienen funciones exponenciales reales para la evolución de los valores medios (ver Ecs. (VI.3.21-24)). Con el objeto de evitar divergencias cuando $t \rightarrow \infty$ es necesario imponer la condición

$$f(\lambda) = 0 \quad (VI.3.29)$$

o

$$2 (v_1^2 + v_2^2) (\langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0) = - (v_2 \lambda \hbar + \varepsilon v_1) \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 +$$

$$+ (v_1 \lambda \hbar - \epsilon v_2) \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0. \quad (\text{VI.3.30})$$

Para obtener en forma explícita la Ec. (VI.3.30) es necesario evaluar los valores medios y estudiar las implicancias de esta condición. Esto será hecho en la próxima sección. Con esta condición, las Ecs. (VI.3.21-24) pueden ser interpretadas como la descripción de un proceso amortiguado. Los valores medios de \hat{T}_a y \hat{T}_b decrecen a medida que t aumenta. Por lo tanto, para un observador confinado a uno de los subsistemas la energía parecerá disiparse. Este comportamiento disipativo aparece como una consecuencia de haber elegido correctamente ϵ_a , ϵ_b , v_1 y v_2 , por un lado, y las condiciones iniciales $\langle \hat{T}_a \rangle_0$, $\langle \hat{T}_b \rangle_0$, $\langle \hat{T}_{ab} \rangle_0$ y $\langle \hat{S}_{ab} \rangle_0$ por el otro. No es necesario efectuar ninguna aproximación siendo todo el resultado de un cálculo cuántico. Las condiciones necesarias para obtener estos resultados son las impuestas por las Ecs. (VI.3.8-10), es decir, el cierre de un álgebra parcial de Lie con el Hamiltoniano total y la Ec. (VI.3.30).

Las ecuaciones (II.2.5) y (II.2.6) indican que para el cálculo de los valores medios se utiliza una matriz densidad normalizada, correspondiendo entonces con estados posibles del sistema. El álgebra parcial de Lie subyacente relaciona los distintos valores medios, como lo indica la Ec. (II.2.9). El hecho que estos valores medios no son cantidades mutuamente independientes es crucial, como se verá luego. Es importante para el presente propósito verificar en que caso las Ecs. (II.2.9), (VI.3.30), (VI.3.8-10) y (VI.3.28) forman un conjunto compatible. A partir de la Ec. (VI.3.28) se define

$$\cos(\theta) \equiv \epsilon / (2 \sqrt{v_1^2 + v_2^2}). \quad (\text{VI.3.31})$$

De esta forma, la Ec. (VI.3.30) resulta

$$\begin{aligned} \langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0 &= \frac{-(v_2 \sin(\theta) - v_1 \cos(\theta)) \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 + (v_1 \sin(\theta) + v_2 \cos(\theta)) \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0}{\sqrt{v_1^2 + v_2^2}} \quad (\text{VI.3.32}) \\ &= (-\alpha \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 + \beta \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0), \end{aligned}$$

con

$$\alpha = \frac{(v_2 \operatorname{sen}(\theta) - v_1 \operatorname{cos}(\theta))}{\sqrt{v_1^2 + v_2^2}} \equiv \operatorname{cos}(\theta') \leq 1 \quad (\text{VI.3.33})$$

$$\beta = \frac{(v_1 \operatorname{sen}(\theta) + v_2 \operatorname{cos}(\theta))}{\sqrt{v_1^2 + v_2^2}} \equiv \operatorname{sen}(\theta') \leq 1, \quad (\text{VI.3.34})$$

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1. \quad (\text{VI.3.35})$$

Luego, un vínculo adicional afecta el problema dinámico que no puede ser ignorado.

El resultado exacto del Hamiltoniano de Bateman se obtiene cuando

$$\varepsilon_a = -\varepsilon_b \quad (\varepsilon = 0), \quad v_1 = 0 \quad (\text{VI.3.36})$$

y el Hamiltoniano se escribe como

$$\hat{H} = \varepsilon_a (\hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{b}^\dagger \hat{b}) + i v (\hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger - \hat{b} \hat{a}). \quad (\text{VI.3.37})$$

La condición inicial necesaria en este caso para evitar divergencias es

$$\langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 = -(\langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0). \quad (\text{VI.3.38})$$

Esta condición inicial es una restricción adicional no contemplada en la solución dinámica del problema.

VI.4 Determinación de un conjunto coherente de condiciones iniciales.

En los párrafos siguientes se demostrará, partiendo de propiedades muy generales, que las Ecs. (VI.3.30) o (VI.3.32) no pueden cumplirse. Por lo tanto este álgebra no cumplirá con el requisito b) de la sección III necesario para obtener evoluciones disipativas. El cálculo particular de los valores medios se efectuará en la base producto

$$|a_l, b_m\rangle = |a_l\rangle \otimes |b_m\rangle, \quad (\text{VI.4.1})$$

y los elementos de la matriz densidad se denominarán

$$p_{ij}^{lm} = \langle a_i, b_j | \hat{\rho} | a_l, b_m \rangle. \quad (\text{VI.4.2})$$

Los valores medios serán

$$\langle \hat{T}_a \rangle = 1/2 + \sum_{l,j=0}^{\infty} l p_{lj}^{lj} \quad (\text{VI.4.3})$$

$$\langle \hat{T}_b \rangle = 1/2 + \sum_{l,j=0}^{\infty} j p_{lj}^{lj} \quad (\text{VI.4.4})$$

$$\langle \hat{T}_{ab} \rangle = \sum_{l,j=1}^{\infty} 2 (l j)^{1/2} \text{Re} [p_{l-1}^{l j} p_{j-1}^{l j}] \quad (\text{VI.4.5})$$

$$\langle \hat{S}_{ab} \rangle = - \sum_{l,j=1}^{\infty} 2 (l j)^{1/2} \text{Im} [p_{l-1}^{l j} p_{j-1}^{l j}]. \quad (\text{VI.4.6})$$

Si se define

$$\text{Re} [p_{l-1}^{l j} p_{j-1}^{l j}] \equiv |p_{l-1}^{l j} p_{j-1}^{l j}| \cos (\theta_{l-1}^{l j} p_{j-1}^{l j}), \quad (\text{VI.4.7})$$

$$\text{Im} [p_{l-1}^{1j} p_{j-1}^{1j}] \equiv |p_{l-1}^{1j} p_{j-1}^{1j}| \text{sen} (\theta_{l-1}^{1j} p_{j-1}^{1j}), \quad (\text{VI.4.8})$$

las Ecs. (VI.3.30) o (VI.3.32) se expresan como:

$$\begin{aligned} \langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0 &= 1 + \sum_{l;j=0}^{\infty} (1+j) p_{lj}^{lj} = \\ &= -\cos(\theta') \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 + \sin(\theta') \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0 = \\ &= -2 \sum_{l;j=1}^{\infty} (lj)^{1/2} |p_{l-1}^{1j} p_{j-1}^{1j}| \cos(\theta' - \theta_{l-1}^{1j} p_{j-1}^{1j}). \end{aligned} \quad (\text{VI.4.9})$$

Para trabajar con un espacio de probabilidad bien definido, los coeficientes p_{ij}^{lm} deben cumplir

$$p_{ij}^{lj} \geq 0, \quad \forall i, j \quad (\text{VI.4.10})$$

$$|p_{ij}^{lm}|^2 \leq p_{ij}^{ij} p_{lm}^{lm}, \quad (\text{VI.4.11})$$

y considerando que se trabaja con un espacio de Hilbert infinito, la temperatura debe ser una magnitud positiva (ver capítulo anterior) ($p_{i-1}^{i-1j} \geq p_{ij}^{ij}$). Si se considera el caso más favorable: $\cos(\theta' - \theta_{l-1}^{1j} p_{j-1}^{1j}) = -1$, resulta que

$$\begin{aligned} \langle \hat{T}_a \rangle_0 + \langle \hat{T}_b \rangle_0 &= 1 + \sum_{l;j=0}^{\infty} (1+j) p_{lj}^{lj} > \\ &> 2 \sum_{l;j=0}^{\infty} \sqrt{(l+1)(j+1)} p_{lj}^{lj} > \\ &> -\cos(\theta') \langle \hat{T}_{ab} \rangle_0 + \sin(\theta') \langle \hat{S}_{ab} \rangle_0. \end{aligned} \quad (\text{VI.4.12})$$

Esto significa que, para el caso particular del Hamiltoniano de Batemann generalizado, a pesar de que la dinámica Hamiltoniana permite obtener un comportamiento disipativo, este no puede alcanzarse porque la relación que es necesario imponer sobre las condiciones iniciales necesarias para cancelar la componente divergente de la evolución no pueden encontrarse. Este resultado permite concluir que las condiciones iniciales tienen un rol destacado dentro del problema dinámico.

Se observa así que la teoría de la información resalta claramente la importancia de las condiciones iniciales, y asegura la utilización de estados físicos reales del sistema; es decir estados normalizados compatibles con los operadores relevantes.

VII Modelo para la corriente superconductor en una juntura Josephson

VII.1 Introducción al efecto Josephson

Este capítulo se dedicará a la formulación de un modelo Hamiltoniano que explica la aparición de una corriente superconductor continua (dc) y alterna (ac) en una juntura Josephson. De esta forma, se utilizará la teoría desarrollada en los capítulos anteriores para resolver un problema no académico de interés en el campo de la física del estado sólido³⁴.

El fenómeno de superconductividad fue observado en primer lugar por Kamerlingh Onnes³⁵ en 1911 mientras medía la resistividad como función de la temperatura. Encontró que a 4^o K la resistividad del mercurio caía abruptamente a cero. Este fenómeno fue denominado superconductividad, y la temperatura a la que se produce temperatura crítica T_c . En principio, los físicos teóricos supusieron incorrectamente que el hecho de encontrar una resistencia eléctrica nula a frecuencia cero implicaba que no podía existir campo eléctrico de ninguna frecuencia dentro del superconductor. En ese caso, la ecuación de Maxwell

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{VII.1.1})$$

determina que cualquier campo magnético presente en el metal normal será "congelado" cuando se transforme en superconductor. De esta forma, el estado superconductor dependerá críticamente de la historia pasada de la muestra. De esta forma, el problema no puede ser tratado mediante técnicas de equilibrio térmico y no se puede avanzar demasiado en un modelo teórico.

En 1933 Meissner y Oschenfeld³⁶ descubrieron que un superconductor es un material diamagnético perfecto. Se encontró que un campo penetra solo a una profundidad aproximada de 500 Å, independientemente de la historia de la muestra. Así, el campo es expelido cuando la muestra se torna superconductor y la situación es de equilibrio

termodinámico. A partir de este descubrimiento se lograron algunos avances en el campo teórico. Cabe mencionar el modelo fenomenológico de propiedades electrodinámicas de superconductores hecho en 1935 por F. y H. London³⁷. En los años 50 se determinó que la temperatura crítica T_c dependía de la masa isotópica M de los núcleos de la red en la forma^{38,39} $T_c \sim M^{-\alpha}$, $\alpha \cong 0.5$, y eso sugirió que la interacción electrón-fonón era importante para la superconductividad.

En orden lógico (pero no histórico), la siguiente evidencia experimental con que se contó ocurrió en 1961. Deaver y Fairbank⁴⁰ y Doll y Näbauer⁴¹ mostraron que, para una muestra superconductora múltiplemente conectada, el flujo atrapado a través de cualquier agujero de la misma está cuantificado en múltiplos de $hc/2e$. Esto demostró que la carga efectiva de los entes que componen el superfluido es $2e$.

El siguiente avance teórico ocurrió en 1956 cuando L. Cooper⁴² mostró que una interacción atractiva suave, inducida por fonones, origina una inestabilidad en el mar de electrones libres de Fermi. Los principales puntos del razonamiento de Cooper fueron:

- 1) La interacción Coulombiana entre electrones está perturbada por la presencia de los otros electrones y por los iones positivos de la red. La interacción positiva ocurre como el resultado de la interacción atractiva entre electrones y fonones que supera la interacción repulsiva Coulombiana apantallada. Luego, los electrones que tienen energías entre

$$E_F \leq \epsilon \leq E_F + \hbar \omega_D \quad (\text{VII.1.2})$$

se dispersan mutuamente mediante el intercambio de un fonón virtual. En la Ec (VII.1.2) E_F es la energía de Fermi y ω_D es la frecuencia de Debye. Esta surge porque es la frecuencia aproximada de un fonón promedio, y a esas energías el denominador de la energía de interacción efectiva electrón-electrón es pequeña, y entonces el acoplamiento es resonante. Físicamente esto describe a un electrón moviéndose a lo largo de la red y empujando los iones de carga positiva hacia si mismo, y por lo tanto creando una región de carga positiva a su paso. Si se

consideran los electrones, esto aparecerá como una atracción efectiva entre ellos.

- 2) Los electrones tienden a aparearse en estados con el momento apropiado \mathbf{p} y $-\mathbf{p}$. Esto es físicamente razonable si se piensa que la interacción atractiva electrónica liga pares de electrones en un estado S similar al del positronium.
- 3) Uno puede estar razonablemente sorprendido de que la fuerza atractiva débil origine una ligadura dado que los electrones se están moviendo casi a la velocidad de la luz. La razón subyacente es el principio de Pauli que bloquea todos aquellos estados de menor energía. Entonces, el par existe en un "pozo de potencial".
- 4) Sobre la base de estos argumentos Cooper mostró que una interacción atráctiva muy débil produce un par de electrones con energía $2E_F$ que cae por debajo de la energía de Fermi. Esto implica que el mar de Fermi usual no es una descripción apropiada de los electrones en un superconductor.

Inspirados en estos resultados, Bardeen, Cooper y Schrieffer⁴³ formularon una teoría microscópica en 1957. La teoría se basa en la existencia de una interacción atractiva electrón-electrón resultante del intercambio de un fonón virtual. Un electrón con vector de onda \mathbf{k} emite un fonón virtual \mathbf{q} que es absorbido por un electrón con vector de onda \mathbf{k}' . Esto transforma las energías de \mathbf{k} a $\mathbf{k}-\mathbf{q}$ y \mathbf{k}' a $\mathbf{k}'+\mathbf{q}$. Dado que el proceso es virtual, la energía no necesita conservarse. La naturaleza de la interacción resultante entre los electrones depende de las magnitudes relativas del cambio de energía electrónica y de la energía del fonón $\hbar \omega_q$. Si el último excede al primero entonces la interacción es atractiva. El postulado fundamental de la teoría BCS es que habrá superconductividad cuando la interacción atractiva entre dos electrones producida por el intercambio de fonones sea mayor que la interacción repulsiva Coulombiana, apantallada por la red. Se escribe el Hamiltoniano completo de la energía de un electrón como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{C}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} V \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \hat{C}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{C}_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{C}_{\mathbf{k}} \quad (\text{VII.1.3})$$

donde se han suprimido los índices de spin. Aquí, $\hat{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ ($\hat{C}_{\mathbf{k}}$) es el operador de creación

(destrucción) de electrones en el estado de Bloch $|k\rangle$, ϵ es la energía de ese estado medida con relación a la energía de Fermi y V es la constante (positiva) de apareamiento que es característica del material. Los términos más importantes son aquellos que relacionan k y $-k$. Para obtener las propiedades del estado fundamental es suficiente trabajar en un subespacio de pares descrito por el Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon (\hat{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{C}_{\mathbf{k}} + \hat{C}_{-\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}}) - \frac{1}{2} V \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{C}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \hat{C}_{-\mathbf{k}'} \hat{C}_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}} . \quad (\text{VII.1.4})$$

La Ec. (VII.1.4) se conoce como Hamiltoniano BCS reducido y opera solo en el subespacio de pares de estado S. Cabe aclarar que $+k$ implica spin hacia arriba y $-k$ implica spin hacia abajo.

De lo expuesto se deduce que los pares de Cooper son centrales en el efecto de superconductividad. Se restringirá la atención al caso en que los electrones están presentes o ausentes de a pares $(k,-k)$. De esta forma, el estado superconductor está descrito por

$$|\Psi\rangle = \prod_{\mathbf{k}} |\Psi_{\text{par}}\rangle_{\mathbf{k}} \quad (\text{VII.1.5})$$

donde $|\Psi_{\text{par}}\rangle_{\mathbf{k}}$ es el estado del par $(k,-k)$. En esta notación de pares un mar de Fermi lleno (a temperatura cero) es

$$|\Psi_{\text{par}}\rangle_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \hat{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{C}_{-\mathbf{k}} |0\rangle \equiv |\text{lleno}\rangle_{\mathbf{k}} & \text{para } |\mathbf{k}| \leq k_F \\ |0\rangle \equiv |\text{vacío}\rangle_{\mathbf{k}} & \text{para } |\mathbf{k}| > k_F \end{cases} \quad (\text{VII.1.6})$$

Esta aproximación se conoce con el nombre de modelo de pseudospin de Anderson⁴⁴.

En 1962 Josephson predijo (solo sobre la base de consideraciones teóricas) que cuando dos superconductores se ponen en contacto aparece una corriente de pares de electrones entre ambos por efecto túnel. Los efectos predichos fueron:

1) Existirá una corriente superconductor continua (dc) en ausencia de una fuerza electromotriz externa. (Efecto Josephson dc),

2) Existirá una corriente superconductor alternada de frecuencia $2eV/\hbar$ si se aplica una diferencia de potencial constante V entre los superconductores (Efecto Josephson ac).

La utilización del modelo de pseudo-spin de Anderson^{44,45} para resolver el problema de superconductores débilmente interactuantes ha ocasionado un gran número de controversias^{46,47,48,49,50}. Se ha encontrado que el operador que representa el desbalance de carga es cero aún para junturas polarizadas con tensión^{47,48}. En este capítulo se utilizará un modelo simple de corriente de pares de partículas por efecto tunel que ha sido introducido originalmente por Eckmann y Guenin⁵¹ y que, a pesar de ser sencillo, conserva todos los detalles del problema original.

Se definirá un álgebra de operadores cerrada frente a conmutación con el Hamiltoniano y, mediante la teoría de la información desarrollada hasta aquí, se calcularán los valores medios de esos operadores con lo cual se podrán resolver las controversias existentes hasta el presente. Al encontrar los invariantes dinámicos del álgebra, se definirá un subespacio para el cual surgirá en forma natural la dependencia de la corriente de Josephson con la fase, así como una interpretación geométrica de la misma. Se mostrará como calcular el desbalance de carga, que no es uno de los operadores relevantes, y la razón que ocasionó las dificultades antes mencionadas. Finalmente, la teoría permitirá obtener la ecuación de Josephson para la evolución temporal de la fase.

VII.2 El modelo

Sean dos superconductores acoplados, descritos por el Hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_i^0 + \hat{H}_d^0 + \hat{H}_t, \quad (\text{VII.2.1})$$

donde \hat{H}_i^0 y \hat{H}_d^0 describen los superconductores de la izquierda y la derecha y tienen la forma:

$$\hat{H}^0 = \varepsilon \hat{N} + \theta \hat{S}^+ \hat{S}, \quad (\text{VII.2.2})$$

ϵ es la energía de una cuasipartícula medida a partir de la superficie de Fermi, θ es la constante de acoplamiento del modelo BCS,

$$\hat{N} = \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{\uparrow} + \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} \hat{a}_{\downarrow} \quad (\text{VII.2.3})$$

es el operador de densidad de partículas, y

$$\hat{S}^+ \hat{S} = \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} \hat{a}_{\downarrow} \hat{a}_{\uparrow} \quad (\text{VII.2.4})$$

es el operador de número de pares. $\hat{a}_{\sigma}^{\dagger}$ (\hat{a}_{σ}) es el operador de creación (aniquilación) de cuasipartículas de spin σ .

El último término de la Ec. (VII.2.1), \hat{H}_t ,

$$\hat{H}_t = \rho (\hat{S}_i^{\dagger} \hat{S}_d + \hat{S}_d^{\dagger} \hat{S}_i) \quad (\text{VII.2.5})$$

es el Hamiltoniano de transferencia de pares por efecto túnel, que representa la transferencia en dos pasos de electrones a través de la barrera, como fue introducida por Wallace y Stavn⁵². En el Hamiltoniano se ha tomado la aproximación de considerar un solo momento k , que a pesar de ser una simplificación drástica de un sistema tan complejo como este, mantiene todas las características del problema. Este Hamiltoniano describe tanto la corriente por efecto túnel dc como ac. Comparándolo con los trabajos de Ferrell⁴⁷ y de Di Rienzo y Young⁴⁸, se observa que considerar en forma explícita los Hamiltonianos de orden cero, $\hat{H}_i^0 + \hat{H}_d^0$, es equivalente a mantener una diferencia de tensión V constante entre los superconductores de la derecha y la izquierda, pues se puede definir

$$\epsilon_i = \epsilon_i^0 - e V / 2 \quad (\text{VII.2.6})$$

$$\varepsilon_d = \varepsilon_d^0 + e V / 2 .$$

Di Rienzo y Young⁴⁸ consideraron solo el caso $\varepsilon_i^0 = \varepsilon_d^0$, mientras que Ferrell⁴⁷, a pesar de considerar superconductores diferentes, no incluyó los Hamiltonianos de orden cero en la definición del álgebra de operadores. Se mostrará en la sección VII.4 que el Hamiltoniano (VII.2.1) reproduce el efecto Josephson dc y ac si se consideran los límites adecuados.

Se estudiará la dinámica de algunos observables cuyos valores medios se conoce. Esas variables serán el número de partículas a cada lado de la juntura, el número de pares y el operador de transferencia de pares. Los operadores son:

$$\hat{O}_1 = \hat{N}_i \quad (\text{VII.2.7})$$

$$\hat{O}_2 = \hat{N}_d \quad (\text{VII.2.8})$$

$$\hat{O}_3 = \hat{S}_i^+ \hat{S}_i \quad (\text{VII.2.9})$$

$$\hat{O}_4 = \hat{S}_d^+ \hat{S}_d \quad (\text{VII.2.10})$$

$$\hat{O}_5 = \hat{S}_i^+ \hat{S}_d + \hat{S}_d^+ \hat{S}_i \quad (\text{VII.2.11})$$

A partir del formalismo descrito en los capítulos anteriores, se define una semi-álgebra cerrada. Las ecuaciones de movimiento para el conjunto completo resulta:

$$[\hat{H}, \hat{O}_1] = 2 i \rho \hat{O}_6 \quad (\text{VII.2.12})$$

$$[\hat{H}, \hat{O}_2] = - 2 i \rho \hat{O}_6 \quad (\text{VII.2.13})$$

$$[\hat{H}, \hat{O}_3] = i \rho \hat{O}_6 \quad (\text{VII.2.14})$$

$$[\hat{H}, \hat{O}_4] = -i\rho \hat{O}_6 \quad (\text{VII.2.15})$$

$$[\hat{H}, \hat{O}_5] = i\alpha \hat{O}_6 \quad (\text{VII.2.16})$$

$$[\hat{H}, \hat{O}_6] = i\alpha \hat{O}_5 - 2i\rho \hat{O}_7 \quad (\text{VII.2.17})$$

$$[\hat{H}, \hat{O}_7] = -2i\rho \hat{O}_6 \quad (\text{VII.2.18})$$

donde

$$\hat{O}_6 = i(\hat{S}_i^+ \hat{S}_d - \hat{S}_d^+ \hat{S}_i), \quad (\text{VII.2.19})$$

$$\hat{O}_7 = \hat{S}_i^+ \hat{S}_i (\hat{1} - \hat{N}_d) - \hat{S}_d^+ \hat{S}_d (\hat{1} - \hat{N}_i) \quad (\text{VII.2.20})$$

y

$$\alpha = -[2(\epsilon_i - \epsilon_d) + \theta_i - \theta_d]. \quad (\text{VII.2.21})$$

Aquí se puede observar claramente que α juega el rol del voltage en la juntura cuando $V \neq 0$, aun si los superconductores son iguales. Los operadores \hat{O}_6 y \hat{O}_7 han sido generados al cerrar el álgebra necesaria para conocer la evolución temporal de los valores medios de los observables \hat{O}_1 a \hat{O}_5 . Luego, se define un conjunto de $M + 1$ operadores relevantes: $\{\hat{O}_0 = \hat{1}, \hat{O}_1, \hat{O}_2, \hat{O}_3, \hat{O}_4, \hat{O}_5, \hat{O}_6, \hat{O}_7\}$. La matriz \underline{G} (Ec. (II.3.3)) se define como:

$$g_{16} = g_{17} = -g_{26} = -g_{67} = 2i\rho$$

$$g_{36} = -g_{46} = i\rho \quad (\text{VII.2.22})$$

$$g_{56} = -g_{65} = i \alpha ,$$

y los demás elementos nulos. Usando las Ecs (II.3.3) y (VII.2.22) resulta:

$$\langle \hat{O}_1 \rangle = \langle \hat{O}_1 \rangle_0 - f(\alpha, \rho) - w(\alpha, \rho, t) \quad (\text{VII.2.23})$$

$$\langle \hat{O}_2 \rangle = \langle \hat{O}_2 \rangle_0 + f(\alpha, \rho) + w(\alpha, \rho, t) \quad (\text{VII.2.24})$$

$$\langle \hat{O}_3 \rangle = \langle \hat{O}_3 \rangle_0 - \frac{1}{2} f(\alpha, \rho) - \frac{1}{2} w(\alpha, \rho, t) \quad (\text{VII.2.25})$$

$$\langle \hat{O}_4 \rangle = \langle \hat{O}_4 \rangle_0 + \frac{1}{2} f(\alpha, \rho) + \frac{1}{2} w(\alpha, \rho, t) \quad (\text{VII.2.26})$$

$$\langle \hat{O}_5 \rangle = \langle \hat{O}_5 \rangle_0 - \frac{\alpha}{2\rho} f(\alpha, \rho) - \frac{\alpha}{2\rho} w(\alpha, \rho, t) \quad (\text{VII.2.27})$$

$$\langle \hat{O}_6 \rangle = \langle \hat{O}_6 \rangle_0 \cos(\omega t) + \frac{\hbar \omega}{2\rho} f(\alpha, \rho) \sin(\omega t) \quad (\text{VII.2.28})$$

$$\langle \hat{O}_7 \rangle = \langle \hat{O}_7 \rangle_0 - f(\alpha, \rho) - w(\alpha, \rho, t) \quad (\text{VII.2.29})$$

con

$$f(\alpha, \rho) = \frac{2\rho}{(\hbar \omega)^2} (\alpha \langle \hat{O}_5 \rangle_0 + 2\rho \langle \hat{O}_7 \rangle_0) \quad (\text{VII.2.30})$$

$$w(\alpha, \rho, t) = \frac{2\rho}{\hbar \omega} \langle \hat{O}_6 \rangle_0 \sin(\omega t) - f(\alpha, \rho) \cos(\omega t) \quad (\text{VII.2.31})$$

y

$$\hbar^2 \omega^2 = \alpha^2 + 4\rho^2 . \quad (\text{VII.2.32})$$

En la próxima sección se calculará la función de partición (e^{λ_0}) para obtener los valores medios de los operadores.

VII.3 La función de partición.

Para expandir el espacio de Hilbert se utilizará la base formada por los dieciseis autovectores

$$|i_{\uparrow}, i_{\downarrow}, d_{\uparrow}, d_{\downarrow}\rangle = |i_{\uparrow}\rangle \otimes |i_{\downarrow}\rangle \otimes |d_{\uparrow}\rangle \otimes |d_{\downarrow}\rangle \quad (\text{VII.3.1})$$

donde i y d toman los valores 0 o 1. En esa base todos los operadores son diagonales, excepto \hat{O}_5 y \hat{O}_6 . La base está definida por $|m\rangle$, donde m toma los valores 1 a 16 siendo $|1\rangle \equiv |1,1,1,1\rangle$, $|2\rangle \equiv |1,1,1,0\rangle$, $|3\rangle \equiv |1,1,0,1\rangle$, ..., $|16\rangle \equiv |0,0,0,0\rangle$. Los elementos de matriz de los operadores relevantes

$$\langle i | \hat{O}^n | j \rangle = O_{ij}^n \quad (\text{VII.3.2})$$

resultan

$$O_{ii}^1 = \begin{cases} 2 & i=1;2;3;4 \\ 1 & i=5;6;7;8;9;10;11;12 \end{cases} \quad (\text{VII.3.3})$$

$$(\text{VII.3.4})$$

$$O_{ii}^2 = \begin{cases} 2 & i=1;5;9;13 \\ 1 & i=2;3;6;7;10;11;14;15 \end{cases} \quad (\text{VII.3.5})$$

$$(\text{VII.3.6})$$

$$O_{ii}^3 = 1 \quad i=1;2;3;4 \quad (\text{VII.3.7})$$

$$O_{ii}^4 = 1 \quad i=1;5;9;13 \quad (\text{VII.3.8})$$

$$O_{4;4}^7 = -O_{13;13}^7 = 1 \quad (\text{VII.3.9})$$

$$O_{4;13}^5 = O_{13;4}^5 = 1 \quad (\text{VII.3.10})$$

$$O_{4;13}^6 = -O_{13;4}^6 = i, \quad (\text{VII.3.11})$$

y los demás elementos nulos. Para la matriz densidad se obtiene

$$\langle 1 | \ln \hat{\rho} | 1 \rangle = -\lambda_0 - 2(\lambda_1 + \lambda_2) - (\lambda_3 + \lambda_4) \quad (\text{VII.3.12})$$

$$\langle 2 | \ln \hat{\rho} | 2 \rangle = \langle 3 | \ln \hat{\rho} | 3 \rangle = -\lambda_0 - 2\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 \quad (\text{VII.3.13})$$

$$\langle 4 | \ln \hat{\rho} | 4 \rangle = -\lambda_0 - 2\lambda_1 - \lambda_3 - \lambda_7 \quad (\text{VII.3.14})$$

$$\langle 5 | \ln \hat{\rho} | 5 \rangle = \langle 9 | \ln \hat{\rho} | 9 \rangle = -\lambda_0 - \lambda_1 - 2\lambda_2 - \lambda_4 \quad (\text{VII.3.15})$$

$$\langle 6 | \ln \hat{\rho} | 6 \rangle = \langle 7 | \ln \hat{\rho} | 7 \rangle = \quad (\text{VII.3.16})$$

$$= \langle 10 | \ln \hat{\rho} | 10 \rangle = \langle 11 | \ln \hat{\rho} | 11 \rangle = -\lambda_0 - \lambda_1 - \lambda_2$$

$$\langle 8 | \ln \hat{\rho} | 8 \rangle = \langle 12 | \ln \hat{\rho} | 12 \rangle = -\lambda_0 - \lambda_1 \quad (\text{VII.3.17})$$

$$\langle 13 | \ln \hat{\rho} | 13 \rangle = -\lambda_0 - 2\lambda_2 - \lambda_4 + \lambda_7 \quad (\text{VII.3.18})$$

$$\langle 14 | \ln \hat{\rho} | 14 \rangle = \langle 15 | \ln \hat{\rho} | 15 \rangle = -\lambda_0 - \lambda_2 \quad (\text{VII.3.19})$$

$$\langle 16 | \ln \hat{\rho} | 16 \rangle = -\lambda_0 \quad (\text{VII.3.20})$$

Diagonalizando In $\hat{\rho}$, se calcula e^{λ_0} , que resulta

$$e^{\lambda_0} = 1 + e^{-2(\lambda_1+\lambda_2) - (\lambda_3+\lambda_4)} + 2 e^{-\lambda_1-2\lambda_2-\lambda_4} + 2 e^{-2\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3} +$$

$$+ 4 e^{-\lambda_1-\lambda_2} + 2 e^{-\lambda_2} + 2 e^{-\lambda_1} + 2 e^{-\lambda_1-\lambda_2-\frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2}} \cosh a, \quad (\text{VII.3.21})$$

donde

$$a = \sqrt{(\lambda_1 - \lambda_2 + \frac{\lambda_3 - \lambda_4}{2} + \lambda_7)^2 + \lambda_5^2 + \lambda_6^2} \quad (\text{VII.3.22})$$

y λ_i son los multiplicadores de Lagrange. A partir de la Ec. (VII.3.21) y (II.2.9) se calculan los valores medios de los operadores

$$\langle \hat{O}_1 \rangle = \langle \hat{N}_i \rangle = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_1} =$$

$$= 2 e^{-\lambda_0} \{ e^{-2(\lambda_1+\lambda_2) - (\lambda_3+\lambda_4)} + e^{-\lambda_1-2\lambda_2-\lambda_4} + 2 e^{-2\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3} +$$

$$+ 2 e^{-\lambda_1-\lambda_2} + e^{-\lambda_1} + e^{-\lambda_1-\lambda_2-\frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2}} \cosh(a) - e^{-\lambda_1-\lambda_2-\frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2}} \sinh(a) \cos(\theta) \}, \quad (\text{VII.3.23})$$

$$\langle \hat{O}_2 \rangle = \langle \hat{N}_d \rangle = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_2} =$$

$$= 2 e^{-\lambda_0} \{ e^{-2(\lambda_1+\lambda_2) - (\lambda_3+\lambda_4)} + 2 e^{-\lambda_1-2\lambda_2-\lambda_4} + e^{-2\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3} +$$

$$+ 2 e^{-\lambda_1-\lambda_2} + e^{-\lambda_2} + e^{-\lambda_1-\lambda_2-\frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2}} \cosh(a) - e^{-\lambda_1-\lambda_2-\frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2}} \sinh(a) \cos(\theta) \} \quad (\text{VII.3.24})$$

$$\langle \hat{O}_3 \rangle = \langle \hat{S}_i^+ \hat{S}_{ii} \rangle = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_3} =$$

$$= e^{-\lambda_0} \{ e^{-2(\lambda_1+\lambda_2) - (\lambda_3+\lambda_4)} + 2 e^{-2\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3} +$$

$$+ e^{-\lambda_1-\lambda_2-\frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2}} \cosh(a) - e^{-\lambda_1-\lambda_2-\frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2}} \sinh(a) \cos(\theta) \}, \quad (\text{VII.3.25})$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O}_4 \rangle &= \langle \hat{S}_d^+ \hat{S}_d \rangle = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_4} = \\
&= e^{-\lambda_0} \{ e^{-2(\lambda_1+\lambda_2)-(\lambda_3+\lambda_4)} + 2 e^{-\lambda_1-2\lambda_2-\lambda_4} + \\
&\quad + e^{-\lambda_1-\lambda_2} \cdot \frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2} \cosh(a) - e^{-\lambda_1-\lambda_2} \cdot \frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2} \sinh(a) \cos(\theta) \}, \tag{VII.3.26}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O}_5 \rangle &= \langle \hat{S}_i^+ \hat{S}_d + \hat{S}_d^+ \hat{S}_i \rangle = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_5} = \\
&= -2 e^{-\lambda_0} e^{-\lambda_1-\lambda_2} \cdot \frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2} \sinh(a) \sin(\theta) \cos(\phi), \tag{VII.3.27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O}_6 \rangle &= \langle i (\hat{S}_i^+ \hat{S}_d - \hat{S}_d^+ \hat{S}_i) \rangle = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_6} = \\
&= -2 e^{-\lambda_0} e^{-\lambda_1-\lambda_2} \cdot \frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2} \sinh(a) \sin(\theta) \sin(\phi), \tag{VII.3.28}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O}_7 \rangle &= \langle \hat{S}_i^+ \hat{S}_i (1 - \hat{N}_d) - \hat{S}_d^+ \hat{S}_d (1 - \hat{N}_i) \rangle = -\frac{\partial \lambda_0}{\partial \lambda_6} = \\
&= -2 e^{-\lambda_0} e^{-\lambda_1-\lambda_2} \cdot \frac{(\lambda_3+\lambda_4)}{2} \sinh(a) \cos(\theta) \tag{VII.3.29}
\end{aligned}$$

donde

$$\cos \theta = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2 + \frac{\lambda_3 - \lambda_4}{2} + \lambda_7)}{a} \tag{VII.3.30}$$

y

$$\tang \phi = \frac{\lambda_6(t)}{\lambda_5(t)}. \tag{VII.3.31}$$

La evolución temporal de los multiplicadores de Lagrange se obtiene a partir de la Ec. (II.3.4), resultando

$$\frac{d\lambda_0}{dt} = \frac{d\lambda_1}{dt} = \frac{d\lambda_2}{dt} = \frac{d\lambda_3}{dt} = \frac{d\lambda_4}{dt} = 0 \quad (\text{VII.3.32})$$

$$\frac{d\lambda_5}{dt} = -\frac{\alpha}{\hbar} \lambda_6 \quad (\text{VII.3.33})$$

$$\frac{d\lambda_6}{dt} = \frac{2\rho}{\hbar} (\lambda_1 - \lambda_2) + \frac{\rho}{\hbar} (\lambda_3 - \lambda_4) + \frac{\alpha}{\hbar} \lambda_5 + \frac{2\rho}{\hbar} \lambda_7 \quad (\text{VII.3.34})$$

$$\frac{d\lambda_7}{dt} = -\frac{2\rho}{\hbar} \lambda_6 \quad (\text{VII.3.35})$$

La solución de estas ecuaciones es

$$\lambda_i(t) = \lambda_i^0, \quad i=1,2,3,4 \quad (\text{VII.3.36})$$

$$\lambda_5(t) = \lambda_5^0 - \frac{\alpha}{\hbar \omega} [d(\lambda) (1 - \cos(\omega t)) + \lambda_6^0 \text{sen}(\omega t)] \quad (\text{VII.3.37})$$

$$\lambda_6(t) = \lambda_6^0 \cos(\omega t) + d(\lambda) \text{sen}(\omega t) \quad (\text{VII.3.38})$$

$$\lambda_7(t) = \lambda_7^0 - \frac{2\rho}{\hbar \omega} [d(\lambda) (1 - \cos(\omega t)) + \lambda_6^0 \text{sen}(\omega t)] \quad (\text{VII.3.39})$$

donde

$$d(\lambda) = \frac{1}{\hbar \omega} \left[2\rho (\lambda_1^0 - \lambda_2^0 + \frac{\lambda_2^0 - \lambda_4^0}{2} + \lambda_7^0) + \alpha \lambda_5^0 \right] \quad (\text{VII.3.40})$$

$$\hbar^2 \omega^2 = \alpha^2 + 4 \rho^2 . \quad (\text{VII.3.41})$$

A partir de estos resultados se calcularán los invariantes de segundo orden del sistema. Esto permitirá dar una interpretación geométrica a la corriente Josephson.

VII.4 Invariantes dinámicos de una junta Josephson. Modelo de pseudo-momento angular.

Como se mostró en el capítulo II, para obtener los invariantes dinámicos de segundo orden es necesario conocer la métrica \underline{E} y \underline{E}' de los espacios duales de operadores y multiplicadores de Lagrange, definidas a partir de las Ecs. (II.4.10-11). Resolviendo las Ecs. (II.4.12-13), los invariantes resultan

$$\hat{O}_1 - \frac{2\rho}{\alpha} \hat{O}_5 , \quad (\text{VII.4.1})$$

$$\hat{O}_2 + \frac{2\rho}{\alpha} \hat{O}_5 , \quad (\text{VII.4.2})$$

$$\hat{O}_3 - \frac{\rho}{\alpha} \hat{O}_5 , \quad (\text{VII.4.3})$$

$$\hat{O}_4 + \frac{\rho}{\alpha} \hat{O}_5 , \quad (\text{VII.4.4})$$

$$\hat{O}_7 - \frac{2\rho}{\alpha} \hat{O}_5 , \quad (\text{VII.4.5})$$

$$\hat{O}_5^2 + \hat{O}_6^2 + \hat{O}_7^2 , \quad (\text{VII.4.6})$$

$$\lambda_7 - \frac{2\rho}{\alpha} \lambda_5 , \quad (\text{VII.4.7})$$

y

$$a^2 = (\lambda_1 - \lambda_2 + \frac{\lambda_3 - \lambda_4}{2} + \lambda_7)^2 + \lambda_5^2 + \lambda_6^2 . \quad (\text{VII.4.8})$$

Los primeros cinco invariantes (Ecs. (VII.4.1-5) están asociados a la conservación del número de electrones, de pares y de la energía. De los invariantes definidos por las Ecs. (VII.4.6) y (VII.4.8) y utilizando los valores medios de los observables (Ecs. (VII.3.23-29)) es posible definir dos espacios interrelacionados, uno de operadores y otro de multiplicadores de Lagrange. El espacio de operadores, compuesto por \hat{O}_5 , \hat{O}_6 y \hat{O}_7 , tiene las siguientes relaciones de conmutación:

$$[\hat{O}_5, \hat{O}_6] = -2i \hat{O}_7 , \quad (\text{VII.4.9})$$

$$[\hat{O}_6, \hat{O}_7] = -2i \hat{O}_5 , \quad (\text{VII.4.10})$$

$$[\hat{O}_7, \hat{O}_5] = -2i \hat{O}_6 , \quad (\text{VII.4.11})$$

$$[\hat{O}_5^2 + \hat{O}_6^2 + \hat{O}_7^2, O_i] = 0, \quad i=5, 6, 7. \quad (\text{VII.4.12})$$

Se identificará entonces al espacio de operadores con el de momento angular, donde el operador de Cassimir está dado por la Ec. (VII.4.6), como puede verse de la Ec. (VII.4.12). De esta forma, sin hacer suposiciones agregadas al modelo y sin forzar definiciones, se puede hacer la siguiente asociación entre la semi-álgebra de Lie, definida por las Ecs. (VII.4.9-11), con el grupo SO (3) (ver Ecs. (VII.3.27-29)):

$$\hat{O}_5 \leftrightarrow \hat{J}_x , \quad (\text{VII.4.13})$$

$$\hat{O}_6 \leftrightarrow \hat{J}_y , \quad (\text{VII.4.14})$$

$$\hat{O}_7 \leftrightarrow \hat{J}_z . \quad (\text{VII.4.15})$$

Así se muestra que la teoría permite definir cuales son los operadores relevantes del problema físico de forma tal que la aproximación de momento angular surge naturalmente a partir de los invariantes del espacio. El espacio dual de multiplicadores de Lagrange se define a partir de la invariancia de a , como:

$$\lambda_5 = x \lambda_5 \quad (\text{VII.4.16})$$

$$\lambda_6 = y \lambda_6 \quad (\text{VII.4.17})$$

$$\lambda_7 = z \left(\lambda_1 - \lambda_2 + \frac{\lambda_3 - \lambda_4}{2} + \lambda_7 \right) \quad (\text{VII.4.18})$$

donde (x, y, z) son los versores cartesianos. Como se demostró en los capítulos IV y V, es equivalente trabajar con cualquiera de los espacios. En ambos casos, *el módulo del vector radial es un invariante de movimiento*, como se demostró en las Ecs. (VII.4.6-8). A partir de las Ecs. (VII.4.13-15) y del cálculo de los valores medios (Ecs. (VII.3.27-29)), se definen los operadores $\hat{\theta}$ y $\hat{\phi}$ mediante las relaciones

$$\hat{O}_5 = R_0 \operatorname{sen} \hat{\theta} \cos \hat{\phi} \quad (\text{VII.4.19})$$

$$\hat{O}_6 = R_0 \operatorname{sen} \hat{\theta} \operatorname{sen} \hat{\phi} \quad (\text{VII.4.20})$$

$$\hat{O}_7 = R_0 \cos \hat{\theta} \quad (\text{VII.4.21})$$

donde

$$R_0 = -2 \exp \left[-\lambda_0 - (\lambda_1 + \lambda_2) - \frac{(\lambda_3 - \lambda_4)}{2} \right] \operatorname{senh} a . \quad (\text{VII.4.22})$$

Esta ecuación relaciona las magnitudes de los vectores radiales de los espacios duales (R_0 y a). Utilizando el hecho que $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, y λ_4 son constantes de movimiento (Ec. (VII.3.32)) y la Ec. (VII.4.7) se demuestra que R_0 también es un invariante, reforzando el resultado dado por la Ec. (VII.4.12). El valor medio del operador que representa la corriente de pares^{47,48,51} $I = \frac{d\langle \hat{S}_i^+ \hat{S}_i \rangle}{dt}$, puede obtenerse de la Ec. (VII.2.23-29)

$$I = \frac{d\langle \hat{O}_3 \rangle}{dt} = -\frac{\rho}{\hbar} \langle \hat{O}_6 \rangle \quad (\text{VII.4.23})$$

resultando

$$I = -\frac{\rho}{\hbar} R_0 \langle \sin \hat{\theta} \sin \hat{\phi} \rangle. \quad (\text{VII.4.24})$$

De esta forma se obtiene la relación de Josephson⁵³, donde $\hat{\phi}$ está asociado con la fase de Josephson entre los dos superconductores.

Resumiendo, a partir de la teoría de la información se ha calculado una base de operadores que forma un álgebra de Lie y cuyo grupo asociado tiene una simetría del tipo $SO(3)$. Una de las componentes, $\langle \hat{O}_6 \rangle$, está asociada a la corriente de pares a través de la juntura. La fase de Josephson aparece como una consecuencia de la relación invariante entre los multiplicadores de Lagrange, siendo este resultado una consecuencia de haber maximizado la entropía. Se encuentra de esta forma una definición dinámica de la corriente de Josephson que, no depende de aproximaciones particulares del problema y, es siempre proporcional a $\sin \phi$, independientemente del voltage de polarización.

VII.5 Corriente por efecto tunel de ac y dc.

VII.5.a Límite de juntura sin polarización: corriente por efecto tunel de dc.

Habiendo calculado la corriente como función de la fase, es necesario evaluar el

comportamiento de su derivada, ya que este es uno de los principales puntos que han sido discutidos en el trabajo de Ferrell⁴⁷. De las ecuaciones de evolución de los operadores se obtiene

$$\frac{d\langle \hat{O}_6 \rangle}{dt} = \frac{\alpha}{\hbar} \langle \hat{O}_5 \rangle + \frac{2\rho}{\hbar} \langle \hat{O}_7 \rangle \quad (\text{VII.5.1})$$

que puede escribirse como

$$\frac{d\langle \hat{O}_6 \rangle}{dt} = \langle R_0 \left[\frac{\alpha}{\hbar} \sin \theta \cos \phi + \frac{2\rho}{\hbar} \cos \theta \right] \rangle. \quad (\text{VII.5.2})$$

Los ángulos, ϕ , la fase de Josephson, y θ se definen como

$$\phi = \text{arctg} \frac{\langle \hat{O}_6 \rangle}{\langle \hat{O}_5 \rangle} \quad (\text{VII.5.3})$$

o

$$\phi = \text{arctg} \frac{\lambda_6(t)}{\lambda_5(t)} \quad (\text{VII.5.4})$$

y

$$\cos \theta = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2 + \frac{\lambda_3 - \lambda_4}{2} + \lambda_7)}{a}, \quad (\text{VII.5.5})$$

donde a fue definido en la Ec, (VII.3.22).

Se considerará el caso en que los superconductores de ambos lados de la juntura son iguales. Este es un caso importante ya que superconductores diferentes tendrán un potencial en la juntura ocasionado por los distintos potenciales químicos de cada uno. La

evolución temporal de los multiplicadores de Lagrange para este caso particular se obtiene con las siguientes condiciones iniciales

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_1^0 \quad (\text{VII.5.6})$$

$$\lambda_3 = \lambda_4 = \lambda_4^0 \quad (\text{VII.5.7})$$

y

$$a = \lambda_5^0, \quad (\text{VII.5.8})$$

donde se ha usado que $\lambda_6^0 = \lambda_7^0 = 0$. Es fácil de comprobar que

$$\cos \theta = \frac{2 \rho \alpha}{(\hbar \omega)^2} (\cos(\omega t) - 1), \quad (\text{VII.5.9})$$

donde ω ha sido definido en la Ec. (VII.2.32). Dado que el primer término de la Ec. (VII.5.2) es también proporcional a α , se tiene que

$$\frac{d\langle \hat{O}_6 \rangle}{dt} \rightarrow 0 \quad (\text{VII.5.10})$$

para una juntura no-polarizada ($\alpha=0$), asegurando que la corriente Josephson dc es realmente una corriente superconductor. La constante α representa la tensión de polarización aplicada a la juntura y por lo tanto, si los superconductores son diferentes se obtendrá una corriente de ac.

VII.5.b Límite de juntura con polarización: corriente por efecto tunel de ac.

Para estudiar la dependencia temporal de la corriente Josephson, se observa que

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{1}{\langle \hat{O}_5 \rangle^2 + \langle \hat{O}_6 \rangle^2} \left\{ \langle \hat{O}_5 \rangle \frac{d\langle \hat{O}_6 \rangle}{dt} - \langle \hat{O}_6 \rangle \frac{d\langle \hat{O}_5 \rangle}{dt} \right\} \quad (\text{VII.5.11})$$

pudiéndose expresar como

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\alpha}{h} + \frac{2\rho}{h} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \phi. \quad (\text{VII.5.12})$$

Si se considera que los superconductores interactúan débilmente, es decir $\alpha \gg \rho$, se obtiene, luego de efectuar el promedio temporal

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\alpha}{h}, \quad (\text{VII.5.13})$$

que concuerda con la ecuación de Josephson.

VII.5.c Definición apropiada del desbalance de carga.

Como se mencionó anteriormente, el cálculo incorrecto del desbalance de carga ha dado lugar a controversias. Esta magnitud está dada por el valor medio del operador

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_i - \hat{S}_d^+ \hat{S}_d) = \frac{1}{2} (\hat{O}_3 - \hat{O}_4). \quad (\text{VII.5.14})$$

Para analizar el significado físico de los resultados obtenidos en las secciones previas es necesario enfatizar que el subconjunto de operadores relevantes asociado con SO(3) está compuesto por \hat{O}_5 , \hat{O}_6 y \hat{O}_7 . Está claro que este último operador *no* describe el desbalance de carga como fue asumido previamente por otros autores^{47,48}. Usando los resultados obtenidos para el cálculo de los valores medios se obtiene para $\langle \hat{S}_z \rangle$:

$$\langle \hat{S}_z \rangle = e^{-\lambda_0} (e^{-2\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3} - e^{-\lambda_1 - 2\lambda_2 - \lambda_4} - 2 e^{-\lambda_1 - \lambda_2} \frac{(\lambda_3 + \lambda_4)}{2} \sinh a \cos \theta) .$$

(VII.5.15)

Utilizando esos mismos resultados se observa que el valor medio de \hat{O}_7 es

$$\langle \hat{O}_7 \rangle = - 2 e^{-\lambda_0} e^{-\lambda_1 - \lambda_2} \frac{(\lambda_3 + \lambda_4)}{2} \sinh a \cos \theta . \quad (\text{VII.5.16})$$

Cuando ambos superconductores son iguales, los primeros dos términos de la ecuación (VII.5.15) se anulan y $\langle \hat{S}_z \rangle = \langle \hat{O}_7 \rangle$. Es fácil entonces comprender que esta igualdad, para un caso particular, ha ocasionado la confusión de considerar al desbalance de carga como el tercer operador del álgebra. Nótese también que

$$\hat{O}_7 = \hat{O}_3 - \hat{O}_4 - \hat{O}_3 \hat{O}_1 + \hat{O}_4 \hat{O}_2 = \hat{O}_3 - \hat{O}_4 - \frac{1}{2}[\hat{O}_3, \hat{O}_1]_+ + \frac{1}{2}[\hat{O}_4, \hat{O}_2]_+ , \quad (\text{VII.5.17})$$

donde los últimos dos términos representan las correlaciones estadísticas entre los operadores \hat{O}_3 y \hat{O}_1 , y \hat{O}_4 y \hat{O}_2 , respectivamente. Por esa razón no es posible factorizar esos productos cuando se toman los valores medios. De la Ec. (VII.5.15) se deduce que cuando los superconductores son iguales el desbalance de carga se anula con α , determinando que no haya exceso de carga en uno de los lados de la juntura a menos que el sistema tenga una polarización externa.

VIII Conclusiones

En este capítulo se presentarán las conclusiones obtenidas a partir de la resolución de los problemas presentados en los capítulos III a VII. Se dedicará una sección para cada uno de los temas tratados, dejando para el final las conclusiones generales y perspectivas futuras.

VIII.1 Constantes de movimiento y estados accesibles

El resultado más importante obtenido al utilizar la teoría desarrollada en el capítulo III se encuentra en la Ec. (III.2.7), en donde se presenta una expresión original de la entropía en términos del número de estados del sistema y de los invariantes dinámicos de movimiento. Las ecuaciones (III.2.19) y (III.2.7) muestran claramente el hecho que las correlaciones cuánticas (ver Ec. (III.1.6)) *destruyen* la equiprobabilidad de los estados accesibles⁵⁴, y por lo tanto la relación de Boltzmann ($S=\ln M$) deja de valer cuando éstas existen. La conexión de la entropía con los invariantes de movimiento resalta su carácter dinámico y justifica plenamente la utilidad del principio de máxima entropía para obtener las evoluciones temporales de los valores de expectación, a través de su conservación.

Es interesante destacar que desde otro punto de vista nuestros invariantes (por ej. Ec. (III.2.14)) hacen recordar a la fuente de producción de entropía⁵⁵, a pesar de que los primeros están escritos en términos de los multiplicadores de Lagrange λ_i y no de sus fluctuaciones. No obstante las magnitudes que componen $I^{(2)}$ tienen una dinámica claramente establecida por el álgebra asociada al problema, hecho que no ocurre con la producción de entropía.

La aplicación de esta teoría a la anomalía Shottky (Sec. III.3.a) permite obtener resultados interesantes como los de las ecuaciones (III.3.11) y (III.3.12) que se muestran gráficamente en la figura 2. Cabe destacar que la ecuación (III.3.11) vale para todo sistema con niveles equiespaciados y en particular para el efecto Zeeman descrito en la

sección III.3.b. Este formalismo cumple no solo los requerimientos de la mecánica cuántica, sino que trabaja con el operador estadístico $\hat{\rho}$ que describe, en general, una situación fuera del equilibrio con valores medios dependientes del tiempo ya que los observables pueden *no conmutar* con el Hamiltoniano. Por lo tanto los invariantes obtenidos se pueden generar tanto para situaciones de equilibrio como de no-equilibrio.

VIII.2 Definición de traza para operadores no-ligados

El principal objetivo ha sido encontrar un método que permita trabajar con una matriz densidad construída a partir de operadores no-ligados, y obtener las propiedades termodinámicas del sistema cuántico (relación entre valores medios y multiplicadores de Lagrange) utilizando el principio de máxima entropía.

Para hacerlo, fue necesario: (i) encontrar una definición de traza apropiada y convergente, que permitiese evaluar e^{λ_0} , la función de partición; y (ii) evaluar la modificación en el álgebra de operadores que aparecen al introducir un espacio de Hilbert finito G_N .

Luego de efectuar los cálculos correspondientes, se concluye que: (a) es posible extender el concepto de temperatura de spin a sistemas cuánticos, aun cuando están descritos por operadores que no conmutan (matriz densidad de no-equilibrio)(Sec. V); y (b) los efectos de borde ocasionados por la modificación del álgebra de operadores no es observable (al menos para el Hamiltoniano estudiado aquí) ya que por la autoconsistencia del método utilizado (Sec. VI) sólo se podrían observar violando el principio de incerteza. Como se ha mencionado anteriormente, para trabajar con un Hamiltoniano cualquiera solo es necesario evaluar la estructura particular de los operadores $\hat{A}_N^{(i)}$, por lo que los resultados serán válidos en general para sistemas finitos. Sin embargo, como las consideraciones hechas en la sección VI están íntimamente relacionadas con la estructura de los operadores $\hat{A}_N^{(i)}$, las conclusiones relacionadas con los efectos de borde deben tomarse con cuidado.

Para el caso particular del oscilador armónico, es también posible hallar una

definición de traza convergente si se considera al Hamiltoniano como uno de los operadores relevantes. La expresión de $\hat{\rho}$ resulta

$$\hat{\rho} = \frac{\exp(-\beta \hat{H} - \lambda_1 \hat{q} - \lambda_2 \hat{p})}{\text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H} - \lambda_1 \hat{q} - \lambda_2 \hat{p})]}.$$

Sin embargo, el problema tratado aquí no ha sido resuelto previamente, dado que la expresión obtenida para la matriz densidad antes mencionada²³ diverge cuando $\beta \rightarrow 0$. Como se discutió en el capítulo V, nuestra solución permite describir el caso de una señal electromagnética en ausencia de ruido gaussiano.

Resumiendo, el resultado más importante de este capítulo ha sido el encontrar, mediante un método de proyección, un camino para estudiar las propiedades termodinámicas de sistemas infinitos, cuando operadores no-ligados que no conmutan con el Hamiltoniano son incluidos en la matriz densidad.

VIII.3 Termodinámica cuántica y teoría de la información

El concepto usual acerca de la termodinámica clásica consiste en que esta solo describe procesos de equilibrio o cercanos a él. Es por ello que algunos autores prefieren llamarla termoestática. Sin embargo, y aún dentro de ese reducido contexto, puede ser aplicada a una gran variedad de sistemas físicos bajo una diversidad de condiciones. En este capítulo se han discutido aspectos de la termodinámica, tanto de procesos de no-equilibrio (dentro del contexto de la teoría de la información), como para dinámicas Hamiltonianas (cuánticas o clásicas). Este resultado no solo complementa las teorías desarrolladas en los capítulos anteriores sino que abre la posibilidad de construir un nexo entre la mecánica cuántica y la termodinámica.

Los logros más importantes de este capítulo han sido tres: a) discutir condiciones fuera del equilibrio, ya que la matriz densidad contiene operadores que pueden o no conmutar con el Hamiltoniano, b) reobtener algunas leyes termodinámicas, a partir de un

punto de vista microscópico, y c) definir el concepto de temperatura para sistemas cuánticos. En este primer intento de describir el comportamiento termodinámico de sistemas cuánticos solo se han tratado sistemas conservativos (no se han considerado Hamiltonianos no-lineales o potenciales dependientes de las velocidades), pero siguiendo las líneas aquí presentadas es posible considerar también este tipo de sistemas.

Un resultado importante obtenido es el siguiente: en todos los casos en que se cumpla la Ec. (II.3.3) de cierre del álgebra el sistema puede ser descrito como cuánticamente cerrado o aislado y por lo tanto la entropía se conservará. Sin embargo, como se ha recalado en este capítulo, si se consideran operadores que no conmutan con el Hamiltoniano el sistema no estará en equilibrio estático ya que varios de los operadores relevantes evolucionarán en el tiempo. En conjunto, el sistema evoluciona isoentrópicamente, pero si se consideran diferentes subsistemas el comportamiento observado deja de ser isoentrópico. De hecho, nuestra definición de un sistema cuántico aislado está dada en términos de los operadores relevantes cuyos espacios de Hilbert deben tenerse en cuenta para determinar el número de estados accesibles del sistema.

La temperatura queda definida como la variable intensiva asociada al Hamiltoniano. Una vez que este multiplicador de Lagrange ha sido introducido en la matriz densidad, todas las propiedades termodinámicas del sistema pueden ser evaluadas, siguiendo las ecuaciones termodinámicas usuales, siempre que los valores medios de los operadores relevantes sean considerados como variables extensivas.

VIII.4 Evoluciones dinámicas y condiciones iniciales

Siguiendo la teoría informacional propuesta en el capítulo II, se ha desarrollado una teoría cuántica que permite determinar en forma clara cuando un Hamiltoniano generará un comportamiento dinámico disipativo.

El único requisito es que los términos sin perturbar y de interacción tengan una forma tal que sea posible cerrar un álgebra parcial de Lie bajo conmutación con el Hamiltoniano total del sistema. El segundo punto consiste en evaluar los autovalores de la

matriz G . Si G tiene autovalores reales se puede obtener un comportamiento disipativo, siempre que la estructura del álgebra permita elegir un conjunto adecuado de condiciones iniciales para los operadores relevantes. La importancia de la restricción impuesta por el álgebra sobre los valores medios se observa claramente en la sección 3.

El formalismo presentado en la sección 2 no tiene ambigüedades ni sutilezas interpretativas que traigan aparejados violaciones de postulados básicos de la mecánica cuántica, como por ejemplo las relaciones de conmutación entre variables canónicas conjugadas. Para el caso particular que se trató en la sección 2 se puede concluir que la estructura particular del álgebra de Lie ocasiona una superposición no compatible de los dominios de los diferentes operadores involucrados en las condiciones iniciales y, por esa razón, es imposible cancelar las componentes divergentes de las Ecs. (VI.3.21-24). De esta forma queda claramente explicitada la importancia de las condiciones iniciales. Cabe aclarar que previamente⁵⁶ se han reportado dificultades en encontrar soluciones normalizadas para el Hamiltoniano dual de Batemann. A este respecto, se puede decir que el hecho que las autofunciones no sean normalizables es una manifestación de un problema más profundo, como es el carácter no-disipativo de ese Hamiltoniano, quedando esto perfectamente demostrado a partir de este formalismo general.

Uno puede entonces concluir que la dinámica cuántica por sí misma no permite determinar la posibilidad de describir un comportamiento disipativo. El álgebra asociada a un problema físico es crucial para determinar el carácter de la evolución dinámica del sistema (disipativo o conservativo), pero la inclusión de una métrica en esta álgebra (es decir una matriz densidad normalizada y con autovalores positivos) a los efectos de calcular valores medios normalizados implica la aparición de condiciones adicionales que determinan cuando esa evolución temporal puede tener sentido físico o no.

VIII.5 Modelo para la corriente superconductor en una juntura Josephson

La aplicación de un modelo de pseudo-momento angular al problema de corriente de pares entre superconductores ha dado lugar a inconsistencias en la definición del

exceso de carga. Ferrel⁴⁸ mostró que los operadores \hat{O}_5 , \hat{O}_6 y el desbalance de carga, $\hat{O}_3 - \hat{O}_4 \equiv \hat{S}_z$ (Eq. (VII.5.14-15)) juegan papeles importantes en la dinámica de una juntura Josephson, y que ellos deben ser tenidos en cuenta para evitar la aparición de efectos espureos como el corrimiento de frecuencias⁴⁸. Aquí se ha resuelto el problema de corriente por efecto túnel utilizando un modelo Hamiltoniano simplificado y la teoría de la información desarrollada en los capítulos II a VI. Como consecuencia de la relación de clausura, dada por la Ec. (II.3.3), se obtiene un álgebra cerrada compuesta por siete operadores que permiten definir, en forma natural a partir de los invariantes dinámicos del sistema, una sub-álgebra de momento angular. Se muestra también que los operadores importantes para la evolución temporal de los valores medios son \hat{O}_5 , \hat{O}_6 y \hat{O}_7 , y no \hat{O}_5 , \hat{O}_6 y el desbalance de carga, como se propuso previamente. Como se puede mostrar fácilmente, en el caso en que los superconductores son iguales y la tensión de polarización es cero ambos operadores tienen los mismos valores medios. Ferrel, a pesar de hacer notar la importancia de los tres operadores, no utiliza el Hamiltoniano completo, no pudiendo apreciar de esa forma la importancia de \hat{O}_7 . En este capítulo se obtiene una descripción tanto del efecto Josephson de dc como del de ac, resultando correcto el cálculo del desbalance de carga. La relación de la corriente con la fase, así como la interpretación geométrica de esta última, surge de hallar los invariantes dinámicos del sistema. Finalmente, la ecuación de Josephson aparece en el límite de interacción débil si se considera el valor medio temporal.

VIII.6 Conclusiones generales

En las secciones anteriores se han detallado las conclusiones más importantes extraídas de cada capítulo. En esta sección se resumirán los aportes novedosos realizados.

En primer lugar, cabe mencionar que por primera vez se efectuó el cálculo explícito de los valores medios de observables como función de los multiplicadores de Lagrange para el caso de un conjunto de observables no-conmutantes. Esta evaluación requiere gran cuidado ya que la matriz densidad tiene involucrada en su definición una

función exponencial de operadores que no conmutan entre si,

$$\hat{\rho} = \exp \left(- \sum_{i=0}^n \lambda_i \hat{O}_i \right) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(- \sum_{i=0}^n \lambda_i \hat{O}_i \right)^j}{j!} \quad (\text{VIII.6.1})$$

introduciendo por lo tanto términos del tipo

$$\left(- \sum_{i=0}^n \lambda_i \hat{O}_i \right)^j = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_j} \lambda_{i_1}(t) \dots \lambda_{i_j}(t) \Xi (\hat{O}_{i_1} \dots \hat{O}_{i_j}), \quad (\text{VIII.6.2})$$

donde Ξ representa una suma sobre términos que contempla todas las posibles permutaciones de los operadores \hat{O}_i , es decir las correlaciones de orden superior entre los operadores. Para realizar un cálculo exacto, teniendo en cuenta dichas correlaciones, es preciso operar sobre

$$\ln \hat{\rho} = - \sum_{i=0}^n \lambda_i \hat{O}_i, \quad (\text{VIII.6.3})$$

diagonalizar la matriz que representa a ese operador y luego tomar exponencial en la base que esta es diagonal.

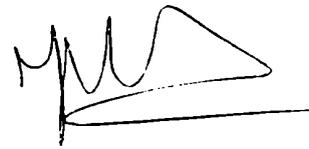
En este punto es necesario destacar la importancia de trabajar con una teoría que provea un mecanismo para evaluar los valores medios de los operadores correctamente. El operador densidad utilizado por la teoría de la información cumple no solo con las propiedades de la teoría de probabilidades, sino que satisface la ecuación de Liouville y respecta las correlaciones que introducen los operadores cuánticos. Manifestaciones de este hecho son el desarrollo de la entropía en función del número de estados del espacio de Hilbert, del calor específico y de las correlaciones de orden superior (capítulo III) y la

importancia manifiesta de las condiciones iniciales en la dinámica de los sistemas (capítulo VI). De hecho, el sistema considerado en el capítulo VI ha sido tratado en la literatura como disipativo, y solo mediante teorías de gran desarrollo matemático se ha mostrado recientemente (Ref. 56) que presenta dificultades cuando se trata de definir estados normalizados del sistema. En dicho capítulo se ha mostrado que el sistema no es disipativo haciendo uso de los postulados básicos de la teoría sin ningún tipo de consideración especial. Las condiciones iniciales están restringidas por el operador densidad, que respeta las limitaciones impuestas por el álgebra de operadores relevantes del sistema. Otro caso que destaca las bondades del método es el ejemplo mostrado en el capítulo VII. Allí se obtuvo un modelo para el efecto Josephson que explica tanto la corriente superconductor de dc como de ac. Esta evaluación había ocasionado problemas anteriormente (Ref. 49-50) por calcular en forma incorrecta los valores medios de los operadores.

Un ejemplo claro de las dificultades que puede ocasionar la evaluación incorrecta de valores medios se observa en el capítulo IV. Allí se calculó la relación de incerteza para autoestados del Hamiltoniano, como es usual en la literatura. La ecuación IV.6.4 muestra que si los valores medios se calculan en esa base no se viola incerteza. Sin embargo el caso general (Ec. IV.6.11) muestra que existen casos en los que no se cumple dicho principio. Esto surge claramente porque está especificado en la teoría la forma de evaluar las dispersiones de los operadores, dado un conjunto de operadores relevantes.

Otra innovación presentada en este trabajo es la consideración de condiciones iniciales mixtas, formadas por valores medios y multiplicadores de Lagrange. Esto se utilizó en los capítulos IV y V. Así fue posible considerar sistemas en los que solo se conocen ciertos valores medios y abrir la posibilidad de formular una teoría termodinámica en términos de variables extensivas e intensivas. Este ha sido otro aporte novedoso efectuado, principalmente en el caso del cálculo de derivadas parciales con vínculos. Esto se aplicó al cálculo de calores específicos a variables extensivas e intensivas constantes para sistemas cuánticos con operadores que no conmutan entre si, generalizando en forma natural la teoría termodinámica.

Finalmente, como perspectivas futuras cabe mencionar que se presentan diversos sistemas de interés actual en los que se pueden aplicar los resultados obtenidos, como se mostró en el capítulo VII. Además, el caso de álgebras con un número infinito de operadores relevantes abre un nuevo campo de estudio, ya que resulta un método alternativo a otros formalismos que también proveen soluciones aproximadas.



Dra. ARACELI N. PROTO
PROFESOR TITULAR

Referencias

- 1 C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Quantum Mechanics, John Wiley & Sons, Paris, 1977
- 2 C.E. Shannon, Bell. Sys. Tech. J. **27** (1948) 379,623
- 3 J. von Neumann, Gött. Nachr. (1927) 273
- 4 E.T. Jaynes, Phys. Rev. **106** (1957) 620; **108** (1957) 171
- 5 Y. Alhassid and R.D. Levine, Phys. Rev. A **18** (1978) 89;
Y. Alhassid and R.D. Levine, J. Chem. Phys. **67** (1977) 4321
- 6 D. Otero, A. Plastino, A.N. Proto, and G. Zannoli, Phys. Rev. A **26** (1982) 1209
- 7 L. A. Santalo, Vectores y Tensores con sus aplicaciones, EUDEBA, Buenos Aires, 1961
- 8 E. Duering, D. Otero, A. Plastino and A.N. Proto, Phys. Rev. A **32** (1985) 2455.
- 9 R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) 570
- 10 J. Aliaga, D. Otero, A. Plastino and A.N. Proto, Phys. Rev. A **35** (1987) 2304.
- 11 C. Kittel, Thermal Physics, Wiley, New York, 1969
- 12 J.P.Killingbeck, Techniques of Applied Quantum Mechanics (Butterworth, Washinton, D.C., 1975).
- 13 E.B. Davies, Quantum Theory of Open Systems (Academic, New York, 1976).
- 14 A. Messiah, Quantum Mechanics (North-Holland, New York, 1966).
- 15 J. Aliaga, M. Negri, D. Otero, A. Plastino and A.N. Proto, Phys. Rev. A **36**, 3427 (1987).
- 16 G.F.D. Duff and D. Naylor, Differential Equations of Applied Mathematics (Wiley, New York, 1966)
- 17 J. Aliaga, D. Otero, A. Plastino, and A.N. Proto, Phys. Rev. A **38** (1988) xxxxx
- 18 H.D. Zeh, in Foundations of Quantum Mechanics, Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Corso IL, Varenna, 1971, editado por B.

- d'Espagnat (Academic, New York, 1971)
- 19 A. Katz, Principles of Statistical Mechanics (Freeman, New York, 1967)
 - 20 J.F. Cyranski, Found. Phys. **15**, 833 (1985); **8**, 493 (1978)
 - 21 H. Callen, Thermodynamics (Wiley, New York, 1976)
 - 22 A. Hobson, Concepts in Statistical Mechanics (Gordon and Breach, New York, 1971)
 - 23 W.H. Louisell, Radiation and Noise in Quantum Electronics (Krieger, New York, 1977).
 - 24 A.N. Proto, J. Aliaga, D. Napoli, D. Otero and A. Plastino, enviado para la consideración del Phys. Rev. A.
 - 25 H. Dekker, Phys. Rep. **80** N° 1 (1981)
 - 26 R.W. Hasse, J. Math. Phys., **16** 2005 (1975); J. Phys. **11A**, 1245 (1978)
 - 27 E. Kanai, Prog. Theor. Phys. **3**, 440 (1948)
 - 28 M.D. Kostin, J. Chem. Phys. **57**, 3589 (1972); J. Stat. Phys. **12**, 195 (1975)
 - 29 Existe una extensa lista de referencias en la referencia 25.
 - 30 D.M Greenberger, J. Math. Phys. **20**, 762 (1979)
 - 31 J. Immele, K. Kan and J. J. Griffin, Nucl. Phys. A **241**, 97 (1975)
 - 32 D.Otero, A. Plastino, A.N. Proto and S. Mizrahi, Phys. Rev. A **33**, 3446 (1986)
 - 33 H. Feshbach and Y. Tikochinsky, Trans. N.Y. Acad. Sci. **38**, 44 (1977)
 - 34 J. Aliaga, H. Cerdeira, A.N. Proto and D. Otero, enviado para la consideración del Phys. Rev. A
 - 35 H. Kammerlingh Onnes, Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden, N° 119, 120, 122 (1911).
 - 36 W. Meissner y Ochsenfeld, R., Naturwiss **21**, 782 (1933)
 - 37 London F. and London H., Proc. Royal Soc. (London), **A149**, 71 (1935); Physica **2**, 341 (1935).

- 38 C.A. Reynolds, B. Serin, W.H. Wright and L.B. Nesbitt, *Phys. Rev.* **78**, 487 (1950)
- 39 E. Maxwell, *Phys. Rev.* **78**, 477 (1950).
- 40 D.B. Deaver Jr. and W.M. Fairbank, *Phys. Rev. Letters*, **7**, 43 (1961).
- 41 R. Doll y M. Nābauer, *Phys. Rev. Letters*, **7**, 51 (1961)
- 42 L. Cooper, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
- 43 J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957)
- 44 P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **110**, 827 (1958); **112**, 1900 (1958)
- 45 P.W. Anderson, in "Lectures on the Many-body Problem", Ravello School, 1963, edited by E.R. Caranello (Academic, New York, 1964) Vol. III.
- 46 D. Rogovin, M. Scully and A. Di Rienzo, *Phys. Rev. B* **18**, 3231 (1978)
- 47 R.A. Ferrel, *Phys. Rev. B* **25**, 496 (1982)
- 48 A.L. Di Rienzo and R.A. Young, *Phys. Rev. B* **25**, 6684 (1982)
- 49 M.O. Scully and P.A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 23 (1969)
- 50 P.A. Lee and M.O. Scully, *Phys. Rev. B* **3**, 769 (1971)
- 51 J.P. Eckmann and M. Guenin, *Il Nuovo Cimento* **16 B**, 93 (1973).
- 52 P.R. Wallace and M.J. Stavn, *Can. J. Phys.* **43**, 411 (1965).
- 53 B.D. Josephson, *Adv. Phys.* **14**, 419 (1965)
- 54 F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill, Kogakusha, Tokio, 1965.
- 55 G. Nicolis, *Rep. Prog. Phys.* **42**, 225 (1979)
- 56 G. Ghosh and R. Hasse, *Phys. Rev. A* **24**, 1621 (1981)