



Universidad
Zaragoza



TRABAJO FIN DE MÁSTER

MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA Y TECNOLOGÍAS FÍSICAS

La transformada de Weyl-Wigner en Física Molecular

AUTOR:

LAURA GONZÁLEZ BRAVO

DIRECTOR:

DR. JESÚS CLEMENTE GALLARDO

Departamento de Física Teórica

Área de Física Matemática

Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza

Junio de 2021

Resumen

La transformada de Wigner-Weyl permite definir una relación entre las funciones definidas sobre un espacio de fases clásico y el conjunto de operadores diferenciales definidos sobre un espacio de Hilbert en la formulación de Schrödinger de la Mecánica Cuántica. Esta transformada tiene diversas aplicaciones en distintos campos de la física. En particular, en este trabajo, estamos interesados en sus aplicaciones a sistemas moleculares. En estos modelos moleculares es frecuente emplear la aproximación semi-clásica para los estados correspondientes a las partículas más pesadas mientras que los estados correspondientes a las partículas más livianas se mantienen como estados cuánticos. De esta forma, el modelo resultante es un modelo híbrido clásico-cuántico. Si a los estados correspondientes a los elementos de este tipo de sistemas híbridos se les da un tratamiento en término de las funciones de Wigner se puede obtener una representación de estos sistemas en el espacio de fase. La representación de estos sistemas en términos del espacio de fase, esto es, la obtención de las funciones de Wigner híbridas, en conjunto con la caracterización semi-clásica de estas funciones para aquellos grados de libertad modelados como clásicos nos ha permitido obtener una caracterización analítica de las probabilidades asociadas a la medición híbrida. Además, mediante la representación gráfica de los dos primeros órdenes en la expansión asintótica de la función de Wigner semi-clásica hemos podido observar que ya a primer orden en la aproximación semi-clásica tenemos contribuciones cuánticas. Esta primera corrección está determinada analíticamente y su implementación al modelo propuesto por [1] podría proporcionar una descripción más aproximada del sistema estadístico híbrido. Cabe destacar que la obtención de términos adicionales en la expansión podrían permitir mejores correcciones al modelo y consecuentemente también podrían proporcionar correcciones cuánticas importantes a una ecuación generalizada de von Neumann.

Índice general

Resumen	I
1. Introducción	1
2. La Transformada de Wigner-Weyl	4
2.1. Fundamento Teórico	4
2.1.1. La transformada de Wigner y la función de Wigner	4
2.1.2. La transformada de Weyl y el producto estrella de Moyal	6
2.2. Aplicación del formalismo de Wigner-Weyl al oscilador armónico bidimensional .	8
2.3. Función de Wigner semi-clásica en sistemas unidimensionales integrables	10
2.3.1. Potencial de oscilador armónico	13
3. Sistemas híbridos clásico-cuánticos y la función de Wigner	15
3.1. Sobre la mecánica estadística de los sistemas híbridos	15
3.2. Aplicación al formalismo híbrido de las funciones de Wigner	19
4. Aplicación: funciones de Wigner de dos osciladores armónicos unidimensionales	21
4.1. Construcción de las funciones de Wigner semi-clásicas para un estado separable.	21
4.2. Construcción de las funciones de Wigner semi-clásicas para un estado entrelazado	24
5. Conclusiones	29
Bibliografía	30
A. Aplicación del formalismo de Wigner-Weyl al oscilador armónico unidimensional.	31
B. Código implementado	34

Capítulo 1

Introducción

La transformada de Wigner-Weyl es una transformación invertible que relaciona las funciones definidas sobre un espacio de fase clásico con el conjunto de operadores de un espacio de Hilbert en la formulación de Schrödinger de la mecánica cuántica. A la transformación que mapea operadores del espacio de Hilbert, en una cierta representación, en funciones del espacio de fase se le conoce como transformada de Wigner [13]. La transformación inversa, conocida como transformación de Weyl fue encontrada cinco años antes por Hermann Weyl, quien intentaba encontrar un esquema de cuantización apropiado [12].

La transformada de Wigner-Weyl permitió definir una representación de la mecánica cuántica sobre el espacio de fase completamente equivalente a la representación de la mecánica cuántica en término de operadores. Esta representación se conoce con el nombre de mecánica cuántica en el espacio de fases. Para que ambas representaciones sean equivalentes no solamente basta con definir una relación entre los operadores definidos sobre el espacio de Hilbert y las funciones definidas sobre el espacio de fase sino que además dicha relación debe preservar la estructuras algebraicas definidas en estos dos espacios. Es por este motivo que una representación de la mecánica cuántica en términos del espacio de fase requiere de una estructura adicional definida sobre el espacio de funciones de \mathbb{R}^{2n} . Esta estructura se denomina producto estrella de Groenewold o Moyal. Con el producto estrella de Groenewold la transformada de Wigner-Weyl permite una representación de la mecánica cuántica en términos del espacio de fase. Este producto permite además definir la representación de la ecuación de von Neumann en el espacio de fase, la cual recibe el nombre de ecuación de Moyal.

En particular, la representación en términos del espacio de fase del operador densidad se conoce como la función de Wigner. La función de Wigner juega un rol análogo a una función de distribución de probabilidad clásica puesto que nos permite definir valores medios de observables definidos en el espacio de fase a través de la transformación de Wigner. Sin embargo, dicha función no constituye una distribución de probabilidad puesto que puede, en general, tomar valores negativos. El hecho de que la función de Wigner pueda tomar valores negativos no es sorprendente y se debe a que a pesar de estar representada en el espacio de fase la función de Wigner es en esencia un objeto cuántico puesto que es otra forma de representar el operador densidad.

La transformada de Wigner-Weyl tiene diversas aplicaciones dentro de la física [11], en

particular ha sido empleada en física molecular [9] para calcular las propiedades estáticas y dinámicas de sistemas cuánticos de muchos cuerpos donde algunos de los grados de libertad pueden considerarse como clásicos. Estos sistemas conocidos como sistemas híbridos clásico-cuánticos son una aproximación natural a aquellos sistemas cuánticos en donde debido a la existencia de dos escalas de masa o energía algunos de los grados de libertad del sistema pueden aproximarse como variables clásicas. Esto pasa por ejemplo, en el caso de los sistemas moleculares donde los núcleos son pesados y lentos y los electrones más externos son rápidos y ligeros.

La formulación de una teoría para estos sistemas mecánico estadísticos clásico-cuánticos no es obvia, puesto que los grados de libertad clásicos evolucionarán acoplados a los grados de libertad cuánticos. Dos enfoques diferentes pueden emplearse para la caracterización de estos sistemas, uno práctico en donde se establece que la teoría debe aproximarse, tanto como se pueda, a la caracterización completamente cuántica del sistema y uno fundamental, en donde la teoría es construida desde primeros principios de acuerdo a diferentes demandas de consistencia físicas y matemáticas. En cualquiera de los dos enfoques la dinámica que sigue un determinado estado de este tipo de sistemas es un tema abierto. El tratamiento de estos sistemas clásico-cuánticos en términos de funciones de Wigner híbridas podría proporcionar un modelo dinámico eficiente para describirlos. Para la construcción de estas funciones de Wigner híbridas se puede emplear el límite clásico de la transformada de Wigner semi-clásica [3] asociada a los grados de libertad clásicos del sistema.

En este trabajo queremos estudiar el tratamiento de los sistemas híbridos clásico-cuánticos a partir de las funciones de Wigner semi-clásicas. Por simplicidad, y por su utilidad en la modelización de modos vibracionales moleculares, hemos escogido emplear el oscilador armónico bidimensional como modelo de referencia, aunque en principio las técnicas aquí descritas podrían usarse para otros modelos.

A partir de aquí se pretende continuar este análisis y, empleando la información y las herramientas presentadas en esta memoria, estudiar la dinámica de las funciones de Wigner obtenidas. El objetivo último es emplear esta información para determinar una ecuación maestra para sistemas híbridos clásico-cuánticos escrita en términos de las matrices densidad híbridas, que veremos en el capítulo 3; y para las que, hasta el momento, no se dispone de una ecuación dinámica sencilla.

La estructura de este trabajo es la siguiente. En el capítulo 2 se estudiará la transformada de Wigner-Weyl y algunas propiedades de la función de Wigner serán discutidas y derivadas. También se introducirá la definición del producto estrella de Moyal o Groenewold y a partir de este la evolución de la función de Wigner en el espacio de fase, dada por la ecuación de Moyal. Posteriormente se aplicará el formalismo de Wigner-Weyl al sistema de oscilador armónico cuántico dos dimensional. En la última sección de este capítulo exploraremos la estructura semi-clásica de las funciones de Wigner que representan autoestados de energía para el sistema Hamiltoniano sencillo de una partícula en una dimensión sometida a un potencial dependiente de la posición. Este estudio se aplicará posteriormente al caso de un potencial de oscilador armónico.

En el capítulo 3 se introduce el formalismo de los sistemas híbridos empleando [1]. A partir de

la descripción del espacio de fase híbrido y de la definición de estados mutuamente excluyentes definidos sobre éste se construye, empleando el teorema de Gleason, la matriz densidad híbrida como una distribución bivariada dependiente de las variables aleatorias clásicas y cuánticas. Se deduce entonces, a partir de esta matriz densidad híbrida la correspondiente entropía del sistema híbrido. Y empleando el principio de máxima entropía se construye también el ensamblaje canónico híbrido. Finalmente, se describe la utilidad de las funciones de Wigner para caracterizar las probabilidades asociadas a la medición híbrida.

En el capítulo 4 se expone para el caso de un sistema híbrido compuesto por dos partículas sometidas a un potencial de oscilador armónico el cálculo exacto y la representación gráfica de la función de Wigner semi-clásica asociada a un estado separable y a un estado entrelazado de dicho sistema. Se realiza también el cálculo analítico y la representación gráfica del límite clásico para ambos casos y por último, se obtiene una expresión analítica y una representación gráfica para la corrección de primer orden al límite clásico.

Finalmente en el capítulo 5 se hacen algunas conclusiones.

Capítulo 2

La Transformada de Wigner-Weyl

La transformada de Wigner-Weyl permite una representación de la mecánica cuántica en el espacio de fase la cual es completamente equivalente a la mecánica cuántica estándar basada en el formalismo de operadores sobre un espacio de Hilbert. A partir de esta formulación, denominada mecánica cuántica en el espacio de fase, todo operador definido sobre un espacio de Hilbert vendrá representado por una función definida sobre el espacio de fase, sin embargo, la forma en la que se componen estas funciones no es la usual puesto que se necesita de una estructura algebraica adicional definida sobre este conjunto de funciones que codifique las propiedades cuánticas del álgebra de operadores. Esta nueva ley de composición de las funciones del espacio de fase que representan operadores se denomina producto estrella de Moyal o Groenewold. A partir de esta estructura se puede definir una representación de la ecuación de von Neumann sobre el espacio de fase, conocida como la ecuación de Moyal.

2.1. Fundamento Teórico

2.1.1. La transformada de Wigner y la función de Wigner

Sea \hat{A} un operador definido en un espacio de Hilbert complejo \mathcal{H} . Definimos la *transformada de Wigner* del operador \hat{A} como la función $A(q, p)$, definida sobre un espacio $2n$ -dimensional, mediante

$$A(q, p) = \int_{-\infty}^{\infty} d^n y e^{\frac{-ip \cdot y}{\hbar}} \langle q - \frac{y}{2} | \hat{A}(\hat{q}, \hat{p}) | q + \frac{y}{2} \rangle, \quad (2.1)$$

donde, los operadores \hat{q} y \hat{p} son operadores vectoriales. Los límites de integración para las demás integrales definidas a lo largo de este capítulo serán, a menos que otros límites se indiquen, los mismos que los expresados en (2.1).

La transformada de Wigner permite definir una relación entre las funciones sobre un espacio de fases clásico y el conjunto de operadores diferenciales sobre un espacio de Hilbert en la formulación de Schrödinger en Mecánica Cuántica. Es importante destacar que $A(q, p)$ depende de \hbar y en general difiere de la función clásica correspondiente a $\hat{A}(\hat{q}, \hat{p})$, excepto cuando $\hbar = 0$.

En el caso en el que $\hat{A}(\hat{q}, \hat{p})$ es un observable, esto es, $\hat{A}^\dagger(\hat{q}, \hat{p}) = \hat{A}(\hat{q}, \hat{p})$, puede verse fácilmente de (2.1) que la transformada de Wigner es una función a valor real. Además de esto la transformada de Wigner satisface una propiedad fundamental dada por

$$\text{Tr}[\hat{A}\hat{B}] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n q d^n p A(q, p) B(q, p). \quad (2.2)$$

Consideraremos por simplicidad demostrar

$$\text{Tr}[\hat{A}\hat{B}] = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int dq dp A(q, p) B(q, p), \quad (2.3)$$

donde las funciones $A(q, p)$ y $B(q, p)$ son funciones definidas sobre un espacio de fase 2-dimensional. Si expresaremos las funciones $A(q, p)$ y $B(q, p)$ como su correspondiente transformada de Wigner y sustituimos dichas expresiones en (2.2) tendremos

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{A}\hat{B}] &= \\ &\frac{1}{2\pi\hbar} \int \int \int \int dq dp dy dy' e^{\frac{-ip(y+y')}{\hbar}} \langle q - \frac{y}{2} | \hat{A}(\hat{q}, \hat{p}) | q + \frac{y}{2} \rangle \langle q - \frac{y'}{2} | \hat{B}(\hat{q}, \hat{p}) | q + \frac{y'}{2} \rangle, \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\Rightarrow \text{Tr}[\hat{A}\hat{B}] = \int \int dq dy \langle q - \frac{y}{2} | \hat{A}(\hat{q}, \hat{p}) | q + \frac{y}{2} \rangle \langle q + \frac{y}{2} | \hat{B}(\hat{q}, \hat{p}) | q - \frac{y}{2} \rangle, \quad (2.5)$$

donde se ha utilizado la siguiente propiedad para realizar la integración sobre p

$$\int dp e^{\frac{ip(y-y')}{\hbar}} = 2\pi\hbar \delta(y - y'). \quad (2.6)$$

Empleando el siguiente cambio de variables $u = q - y/2$ y $v = q + y/2$ se obtiene $du dv = dq dy$, con lo que (2.5) puede escribirse como

$$\int \int du dv \langle u | \hat{A}(\hat{q}, \hat{p}) | v \rangle \langle v | \hat{B}(\hat{q}, \hat{p}) | u \rangle = \int dv \langle v | \hat{A}\hat{B} | v \rangle = \text{Tr}[\hat{A}\hat{B}]. \quad (2.7)$$

En particular, si empleamos la propiedad con $\hat{B} = \hat{\rho}$, donde $\hat{\rho}$ el operador densidad, tendremos

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n q d^n p A(q, p) \rho, \quad (2.8)$$

y, empleando los postulados de la mecánica cuántica se obtiene

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n q d^n p A(q, p) \rho. \quad (2.9)$$

Teniendo en cuenta esta propiedad definiremos la *función de Wigner* como

$$W(q, p) \equiv \frac{\rho(q, p)}{(2\pi\hbar)^n} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n y e^{\frac{-ip \cdot y}{\hbar}} \langle q - \frac{y}{2} | \hat{\rho} | q + \frac{y}{2} \rangle. \quad (2.10)$$

Ya que el operador densidad posee traza unidad, empleándose las ecuaciones (2.2) y (2.10) se puede escribir

$$\text{Tr}(\rho \mathbb{1}) = 1 = \int \int W(q, p) d^n q d^n p. \quad (2.11)$$

Esto se sigue del hecho que la función de Wigner del operador identidad es la función constantemente igual a uno (ver [4]). Entonces, de acuerdo (2.11) la función de Wigner está normalizada sobre todo el espacio de fase. Luego, empleando (2.9) y (2.10) se tiene que

$$\langle A \rangle = \int \int d^n q d^n p A(q, p) W(q, p), \quad (2.12)$$

luego, la función de Wigner define una medida de integración, análogo a una densidad de probabilidad clásica definida sobre el espacio de fases.

En el caso de un estado puro normalizado, esto es, $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, la función de Wigner (2.10) puede ser escrita como

$$W(q, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n y e^{\frac{-ip\cdot y}{\hbar}} \langle q - \frac{y}{2} | \psi \rangle \langle \psi | q + \frac{y}{2} \rangle \quad (2.13)$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n y e^{\frac{-ip\cdot y}{\hbar}} \psi(q + y/2) \psi^*(q - y/2) \quad (2.14)$$

Es sencillo demostrar a partir de la ecuación (2.14) que la función de Wigner es una función real, esto no aplica únicamente para estados puros, puesto que por definición $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$.

La característica más importante de la función de Wigner es que no constituye una función de distribución, puesto que esta función no es siempre definida positiva. Para demostrar esto consideremos, por cuestiones de simplicidad, dos estados puros ψ_a y ψ_b y escribamos la probabilidad de transición entre estos

$$||\langle \psi_a | \psi_b \rangle||^2 = \text{Tr}(\hat{\rho}_a \hat{\rho}_b) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n q d^n p \rho_a \rho_b, \quad (2.15)$$

$$= (2\pi\hbar)^n \int d^n q d^n p W_a(q, p) W_b(q, p) \quad (2.16)$$

Si los estados son ortogonales entonces la probabilidad de transición es nula con lo cual

$$\int d^n q d^n p W_a(q, p) W_b(q, p) = 0. \quad (2.17)$$

La ecuación (2.17) indica entonces que la función de Wigner puede tomar valores negativos, violando así el primer axioma de Kolmogorov. El hecho de que la función de Wigner pueda tomar valores negativos no es sorprendente puesto que dicha función es simplemente otra forma de representar un cierto estado cuántico con lo cual, no puede ser simplemente una distribución de probabilidad. Podemos ver este efecto de la negatividad, propio de la función de Wigner, como el precio que pagamos por tener una formulación de la mecánica cuántica en términos del espacio de fase, es decir, una representación en términos de posición y momento simultáneamente.

2.1.2. La transformada de Weyl y el producto estrella de Moyal

En 1928 H. Weyl se había planteado cómo identificar una cierta función clásica definida sobre el espacio de fase con un operador definido sobre un espacio de Hilbert. Para solucionarlo introdujo una definición de cuantización [12], que es, en realidad, una de las infinitas cuantizaciones equivalentes que se pueden definir sobre \mathbb{R}^{2n} . Algunos años más tarde, cuando la transformada de Wigner había sido definida [13], se encontró que estas aplicaciones eran inversas. Sin embargo, la invertibilidad, en este caso, requiere que en lugar de considerar las funciones del espacio de fase, se considere el espacio de series formales en \hbar .

La transformada de Weyl de la función $f(q, p)$ definida sobre el espacio de fases 2-dimesional está dada por el siguiente operador en el correspondiente espacio de Hilbert \mathcal{H}

$$\vartheta[f(q, p)] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \int \int \int d\tau d\sigma dq dp f(q, p) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\sigma(\hat{Q} - q) + \tau(\hat{P} - p)) \right] \quad (2.18)$$

A la aplicación $\vartheta[f]$ se le conoce también como *cuantización de Weyl*.

La transformada de Weyl no constituye un homomorfismo entre el espacio de las funciones del espacio de fase con el producto punto a punto y el espacio de operadores lineales, esto puede verse fácilmente, por ejemplo, para el caso de las funciones $f_1(q, p) = q$ y $f_2(q, p) = p$, puesto que, $\vartheta(qp) = \frac{1}{2}(\hat{Q}\hat{P} + \hat{P}\hat{Q})$ y $\vartheta[q]\vartheta[p] = \hat{Q}\hat{P}$; luego, en general, para cualquiera dos funciones $\vartheta(f_1(q, p)f_2(q, p)) \neq \vartheta[f_1(q, p)]\vartheta[f_2(q, p)]$. El origen de esta desigualdad viene del hecho de que a diferencia del producto de operadores en el espacio de Hilbert el producto de funciones en el espacio de fase es conmutativo. Para obtener la igualdad, se necesita definir un producto sobre el espacio de funciones $C^\infty(\mathbb{R}^2)$. Este producto es el *producto estrella de Moyal o Groenewold* especificado mediante la siguiente relación

$$\vartheta(f_1 \star f_2) = \vartheta[f_1]\vartheta[f_2]. \quad (2.19)$$

Este producto es un operador binario, asociativo y no conmutativo. Con este producto sobre el espacio de funciones de $C^\infty(\mathbb{R}^2)$, la transformación de Weyl define un isomorfismo respecto al producto de operadores sobre el espacio de Hilbert. Para la representación de Wigner-Weyl el producto estrella de Moyal puede definirse de la siguiente manera

$$f \star g = f \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q \right) \right] g, \quad (2.20)$$

donde, el argumento de la exponencial puede ser interpretado como una serie de potencias. De esta forma la expresión (2.20) puede escribirse como

$$f \star g = f \left[1 + \frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q \right) - \frac{\hbar}{8} \left(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q \right)^2 + \dots \right] g \quad (2.21)$$

$$= fg + \frac{i\hbar}{2} \{f, g\} + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (2.22)$$

De la expresión anterior vemos que en el límite $\hbar \rightarrow 0$ el producto estrella va al producto punto a punto de funciones de $C^\infty(\mathbb{R}^2)$ y constituye lo que se denomina una *deformación* del mismo [6]

La antisimetrización del producto estrella, se conoce como corchete de Moyal, esto es,

$$f \star g - g \star f = i\hbar \{f, g\} + \mathcal{O}(\hbar^3) \equiv i\hbar \{f, g\}_M, \quad (2.23)$$

donde, $\{ , \}$ es el corchete de Poisson y hemos denotado por $\{ , \}_M$ al corchete de Moyal.

Con las propiedades dadas por (2.22) y (2.23) el producto estrella de Moyal define una deformación del álgebra conmutativa de $C^\infty(\mathbb{R}^2)$ con parámetro de deformación \hbar , es decir, define una deformación del producto punto a punto de funciones en \mathbb{R}^2 . Es en esta deformación

dónde se codifican las propiedades cuánticas del sistema. Con estas herramientas, podemos ahora considerar escribir la dinámica del sistema cuántico, escrita como la ecuación de von Neumann,

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [H, \hat{\rho}], \quad (2.24)$$

como una ecuación sobre el espacio de fase. Tomamos entonces la función de Wigner para representar la matriz densidad $\hat{\rho}$, la transformada de Wigner del operador Hamiltoniano, y empleamos el corchete de Moyal. Así, el corchete de Moyal nos permite conocer la evolución de la función de Wigner en el espacio de fases, la cual está dada por la siguiente expresión

$$\frac{\partial W(q, p, t)}{\partial t} = -\{W(q, p, t), H(q, p)\}_M, \quad (2.25)$$

que, de acuerdo con (2.23), puede escribirse como

$$\frac{\partial W(q, p, t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} [W(q, p, t) \star H(q, p) - H(q, p) \star W(q, p, t)] \quad (2.26)$$

$$= -\{W(q, p), H(q, p)\} - \frac{1}{i\hbar} \mathcal{O}(\hbar^3) \quad (2.27)$$

donde, \star , es el operador producto estrella definido en (2.20), $\{W(q, p, t), H(q, p)\}$ es el corchete de Poisson de la correspondiente función de Wigner, $W(q, p, t)$, que se quiere hacer evolucionar y $H(q, p)$ el operador Hamiltoniano en la representación de Wigner-Weyl.

2.2. Aplicación del formalismo de Wigner-Weyl al oscilador armónico bidimensional

Consideremos dos partículas de masas m y M , no relativistas, que pueden moverse en una dimensión bajo la acción de un potencial de oscilador armónico (el análisis en términos de las funciones de Wigner para el oscilador unidimensional puede verse en el apéndice (A)). El espacio de Hilbert de este sistema, \mathcal{H} , vendrá dado por el producto tensorial de los respectivos espacios de Hilbert de cada una de las partículas sometidas al potencial de oscilador armónico, esto es,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_M \otimes \mathcal{H}_m. \quad (2.28)$$

El Hamiltoniano de cada una de estas partículas vendrá dado por

$$\hat{H}_M = \frac{1}{2M} \hat{p}_M^2 + \frac{1}{2} M \omega_M^2 \hat{q}_M^2, \quad (2.29)$$

$$\hat{H}_m = \frac{1}{2m} \hat{p}_m^2 + \frac{1}{2} m \omega_m^2 \hat{q}_m^2. \quad (2.30)$$

Los autoestados $|\psi_M\rangle$ de \hat{H}_M en \mathcal{H}_M y también los autoestados de $|\psi_m\rangle$ de \hat{H}_m en \mathcal{H}_m son conocidos. En general, los autoestados del Hamiltoniano del sistema total \hat{H} pueden ser elegidos de la forma

$$|\psi_{Mm}\rangle = |\psi_M^{E_M}\rangle \otimes |\psi_m^{E_m}\rangle. \quad (2.31)$$

Como los Hamiltonianos de los dos osciladores armónicos unidimensionales comutan el

producto tensorial de los autoestados de cada oscilador es un autoestado del Hamiltoniano total. Por lo tanto, estos estados construidos como el producto tensorial son una base del espacio de Hilbert total y sus correspondientes energías.

La función de Wigner, de acuerdo con (2.14), para un estado separable de este tipo puede escribirse como

$$W_S(q_M, p_M, q_m, p_m) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \left[\int dq_M e^{\frac{-ip_M y_M}{\hbar}} \psi_{E_M}(q_M + y_M/2) \psi_{E_M}^*(q_M - y_M/2) \right] \\ \times \left[\int dq_m e^{\frac{-ip_m y_m}{\hbar}} \psi_{E_m}(q_m + y_m/2) \psi_{E_m}^*(q_m - y_m/2) \right] \quad (2.32)$$

Si consideramos, en cambio, un estado combinación lineal dado por $|\psi_{Mm}^{EE'}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_M^{E_M}\rangle \otimes |\psi_m^{E_m}\rangle + |\psi_M^{E'_M}\rangle \otimes |\psi_m^{E'_m}\rangle)$ donde, $E_m \neq E'_m$ y $E_M \neq E'_M$, tendremos que la función de Wigner resultante será

$$W_{\text{ent}}(q_M, p_M, q_m, p_m) = \frac{1}{8(\pi\hbar)^2} \left\{ \left[\left(\int dq_M e^{\frac{-ip_M y_M}{\hbar}} \psi_{E_M}(q_M + y_M/2) \psi_{E_M}^*(q_M - y_M/2) \right) \right. \right. \\ \times \left(\int dq_m e^{\frac{-ip_m y_m}{\hbar}} \psi_{E_m}(q_m + y_m/2) \psi_{E_m}^*(q_m - y_m/2) \right) \left. \right] \\ + \left[\left(\int dq_M e^{\frac{-ip_M y_M}{\hbar}} \psi_{E_M}(q_M + y_M/2) \psi_{E'_M}^*(q_M - y_M/2) \right) \right. \\ \times \left(\int dq_m e^{\frac{-ip_m y_m}{\hbar}} \psi_{E_m}(q_m + y_m/2) \psi_{E'_m}^*(q_m - y_m/2) \right) \left. \right] \\ + \left[\left(\int dq_M e^{\frac{-ip_M y_M}{\hbar}} \psi_{E'_M}(q_M + y_M/2) \psi_{E_M}^*(q_M - y_M/2) \right) \right. \\ \times \left(\int dq_m e^{\frac{-ip_m y_m}{\hbar}} \psi_{E'_m}(q_m + y_m/2) \psi_{E_m}^*(q_m - y_m/2) \right) \left. \right] \\ + \left[\left(\int dq_M e^{\frac{-ip_M y_M}{\hbar}} \psi_{E'_M}(q_M + y_M/2) \psi_{E'_M}^*(q_M - y_M/2) \right) \right. \\ \times \left(\int dq_m e^{\frac{-ip_m y_m}{\hbar}} \psi_{E'_m}(q_m + y_m/2) \psi_{E'_m}^*(q_m - y_m/2) \right) \left. \right] \left\} \quad (2.33) \right.$$

Este sistema de dos partículas sometidas a un potencial de oscilador armónico y las correspondientes expresiones de la función de Wigner que para él se derivan serán de utilidad en los capítulos posteriores.

2.3. Función de Wigner semi-clásica en sistemas unidimensionales integrables

Un sistema Hamiltoniano con n grados de libertad (con un espacio de fase $2n$ -dimensional) que posee $f_{i=1,2,\dots,m}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ constantes de movimiento en involución esto es, el corchete de Poisson es nulo para cualquier par de ellas, de manera que, $m = n$ se denomina un *sistema integrable*. La integrabilidad del sistema implica que las trayectorias en el espacio de fase estarán confinadas a una variedad n -dimensional; se puede demostrar (ver [2]) que estas variedades especificadas por f_1, f_2, \dots, f_n , en el caso de que las trayectorias del sistema sean cerradas, son topológicamente equivalentes a un toroide n -dimensional. Estos toroides se denominan *toroides invariantes* puesto que cualquier trayectoria que se origine en uno de ellos permanecerá en él indefinidamente.

El sistema Hamiltoniano más sencillo en una dimensión es el de una partícula de masa m , no relativista, que se mueve bajo la acción de un potencial $V(q)$; para este sistema la única constante de movimiento es la energía por lo que la trayectoria solución de las ecuaciones de Hamilton estará confinada a una elipse en el espacio de fase 2-dimensional. Para una dada elipse de energía, E , la función momento es una función bi-evaluada $p(q, E)$ dada por

$$p(q, E) = \pm \sqrt{2m(E - V(q))}. \quad (2.34)$$

El Hamiltoniano de este sistema viene dado por

$$H(p, q) = \frac{1}{2m}p^2 + V(q). \quad (2.35)$$

Consideremos buscar una transformación canónica, esto es, una transformación que preserve las ecuaciones de movimiento, tal que en las nuevas coordenadas canónicas, (Q, P) , Q sea cíclica. Luego,

$$\dot{P} = 0 \Rightarrow P = \text{cte}, \quad (2.36)$$

e impongamos que $P = \text{cte} = E$. Consideremos para ello emplear la siguiente función generadora $S = S(q, P)$. En general para esta función sus derivadas parciales están dadas por

$$p = \frac{\partial S}{\partial q}, \quad Q = \frac{\partial S}{\partial P}, \quad (2.37)$$

(ver p.e. [8]), y el Hamiltoniano en las nuevas coordenadas será

$$K = H\left(q, \frac{\partial S}{\partial p}\right) = E, \quad (2.38)$$

que es la ecuación de Hamilton Jacobi independiente del tiempo. Para el sistema Hamiltoniano dado por (2.35) tendremos que esta ecuación se escribe como

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V(q) = E, \quad (2.39)$$

cuya solución viene dada por

$$S(q, E) = \pm \int_{q_0}^q \sqrt{2m(E - V(q))} dq, \quad (2.40)$$

donde q_0 es un origen arbitrario de la elipse accesible.

En el caso de movimientos periódicos es útil reemplazar $P = E$ por una constante diferente llamada *variable de acción*

$$I(q, p) = \oint p dq, \quad (2.41)$$

donde \oint se refiere, en este caso unidimensional, a la integral sobre la elipse de energía E en el espacio de fase. Luego, en nuestro caso

$$I = \oint \sqrt{2m(E - V(q))} dq, \quad (2.42)$$

Siguiendo el mismo procedimiento anterior tendremos

$$S(q, I) = \int_{q_0}^q p(q, I) dq \quad (2.43)$$

donde la coordenada conjugada a I es la *variable de ángulo* dada, de acuerdo con (2.37), por

$$\theta = \frac{\partial S}{\partial I}. \quad (2.44)$$

Luego, cada elipse de energía clásica E vendrá etiquetada por su respectiva variable de acción $I_E(q, p)$ y los puntos de dicha elipse estarán etiquetados por la variable de ángulo $\theta(q, p)$. Las variables (I, θ) son también variables canónicas para el sistema integrable, y son las que permiten escribir la dinámica del sistema en la forma más simple [8].

Supongamos ahora que para un valor de la energía E , esto es, para una determinada elipse I , construimos vía cuantización canónica el operador Hamiltoniano correspondiente a la función Hamiltoniana clásica dada por (2.35) y proponemos que los autoestados de dicho Hamiltoniano vienen dados por

$$\psi(q)^{\text{s.c.}} = C \left| \frac{\partial^2 S(q, I)}{\partial q \partial I} \right|^{\frac{1}{2}} \exp \frac{i}{\hbar} S(q, I), \quad (2.45)$$

donde, C es una constante de normalización y $S(q, I)$ viene dado por (2.43).

Se puede demostrar (ver [10]) que el autoestado definido por (2.45) es solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, con autovalor de energía E . Por lo tanto, estas soluciones serán autoestados semi-clásicos del operador Hamiltoniano definido de acuerdo a la cuantización canónica de (2.35). Luego autoestados semi-clásicos del operador Hamiltoniano cuántico con diferentes energías E_m se corresponderán con diferentes elipses del espacio de fase q, p , dadas por $H(q, p) = E_m$ y escribiremos

$$\psi(q)_m^{\text{s.c.}} = C \left| \frac{\partial^2 S(q, I_m)}{\partial q \partial I_k} \right|^{\frac{1}{2}} \exp \frac{i}{\hbar} S(q, I_m), \quad (2.46)$$

donde, el subíndice m etiqueta la elipse de energía E_m .

En [3], M. Berry empleó estas soluciones semiclásicas de la cuantización del sistema integrable para caracterizar las funciones de Wigner semiclásicas correspondientes. Estas soluciones son las más adecuadas para nuestro estudio pues van a permitir identificar las propiedades del modelo clásico que queremos que, en última instancia, pase a representar a nuestros grados de libertad “pesados”. Así, podemos escribir la *función de Wigner semiclásica* en la forma:

$$\begin{aligned} W_m^{\text{s.c.}}(q, p) &= \frac{C^2}{2\pi\hbar} \int dy \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(q + y/2, I_m) - S(q - y/2, I_m) - py] \right\} \\ &\quad \times \left| \frac{\partial^2 S(q + y/2, I_m)}{\partial q \partial I_k} \frac{\partial^2 S(q - y/2, I_m)}{\partial q \partial I_k} \right|^{1/2}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{C^2}{2\pi\hbar} \int dy \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(q + y/2, I_m) - S(q - y/2, I_m) - py] \right\} \\ &\quad \times \left| \frac{\partial p(q + y/2, I_m)}{\partial I_k} \frac{\partial p(q - y/2, I_m)}{\partial I_k} \right|^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Considerando $y = 0$ y expandiendo hasta primer orden la acción, podemos escribir el siguiente lema:

Lema 1. *Para un sistema semiclásico podemos determinar el límite clásico de la función de Wigner de la forma*

$$W_m^{\text{c}}(q, p) = \frac{1}{2\pi} \delta(I(q, p) - I_m). \quad (2.49)$$

Esta función de Wigner está correctamente normalizada sobre el espacio de fase definido por las nuevas variables canónicas I, θ . Este límite es una función delta sobre la elipse de energía E_m correspondiente al autoestado semi-clásico $\psi(q)_m^{\text{s.c.}}$. Más aún, esta función es uniforme sobre la elipse, puesto que no existe dependencia con la variable de ángulo θ .

Para evaluar el límite semi-clásico consideremos el estado $\psi(q)^{\text{s.c.}}$ con energía E , de forma tal que su correspondiente elipse, en el espacio de fase q, p , viene dada por $H(q, p) = E$. Para este estado semi-clásico la ecuación (2.48) puede escribirse como

$$W^{\text{s.c.}}(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\int_{q-y}^{q+y} d\xi p(\xi) - 2py \right] \right\}}{\left| \frac{\partial I}{\partial p}(q + y/2, p(q + y/2, E)) \frac{\partial I}{\partial p}(q - y/2, p(q - y/2, E)) \right|}. \quad (2.50)$$

El integrando de la fase en (2.50) puede tener la siguiente interpretación geométrica (ver [3])

$$\int_{q \mp y_0}^{q \pm y_0} d\xi p(\xi) \mp 2py_0 = \begin{cases} A(q, p) \text{ en el punto 1} \\ A(q, p) \text{ en el punto 2} \end{cases} \quad (2.51)$$

donde, los diferentes elementos presentes en la expresión anterior pueden interpretarse a partir de la Fig. (2.1)

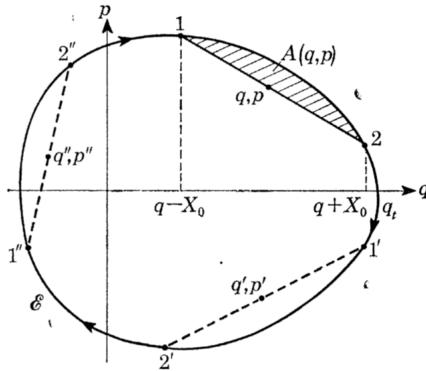


Figura 2.1: Puntos 1 y 2 sobre la elipse de energía E que contribuyen a la función de Wigner $W^{\text{s.c.}}(q, p)$; en nuestra notación $X_0 \equiv y_0$. (M.V. BERRY [3])

Empleando el método de aproximación uniforme (ver [3], [5]) podemos obtener la siguiente expresión para la función de Wigner semi-clásica (2.50)

$$W^{\text{s.c.}}(q, p) = \frac{\sqrt{2} \left[\frac{3}{2} A(q, p) \right]^{\frac{1}{6}} \text{Ai} \left(\left[\frac{3A(q, p)}{2\hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right)}{\pi \hbar^{\frac{2}{3}} [I_q(2)I_p(1) - I_p(2)I_q(1)]^{\frac{1}{2}}}, \quad (2.52)$$

donde, Ai denota la función de Airy y los subíndices q, p denotan derivadas con respecto a estas variables. Esta función está correctamente normalizada y puede demostrarse que en el límite clásico va a la expresión (2.49). La expansión de esta función a primer orden ([3]) viene dada por

$$W^1(q, p)_{\text{s.c.}} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{\hbar^2 B(q, p)} \right)^{\frac{1}{3}} \text{Ai} \left[2\{I(q, p) - I(E)\} \left(\frac{1}{\hbar^2 B(q, p)} \right)^{\frac{1}{3}} \right], \quad (2.53)$$

$$B(q, p) = I_q^2 I_{pp} + I_p^2 I_{qq} - 2I_{qp} I_p I_q, \quad (2.54)$$

donde $I(q, p)$ vendrá dada por (2.41) y los subíndices q, p denotan derivadas.

En los capítulos siguientes consideraremos estudiar sistemas cuánticos caracterizados por el hecho de que algunos de sus grados de libertad pueden ser modelados como objetos clásicos. De esta forma, en una primera aproximación, los estados correspondientes a estos grados de libertad pueden escribirse como estados semi-clásicos escogiendo el ansatz (2.46) que propone van Vleck. Si queremos representar este sistema cuántico-clásico sobre el espacio de fase podemos asociar estos estados semi-clásicos con la correspondiente función de Wigner semi-clásica, dada por (2.52) y a los estados cuánticos con su correspondiente función de Wigner cuántica.

2.3.1. Potencial de oscilador armónico

En el caso de un potencial armónico, tendremos que las trayectorias estarán nuevamente confinadas a elipses en el espacio de fase 2-dimensional donde para una determinada elipse, de

energía E , tendremos que la función momento vendrá dada por

$$p(q, E) = \pm \sqrt{m(2E - m\omega^2 q^2)}, \quad (2.55)$$

y el correspondiente Hamiltoniano del sistema clásico es

$$H(q, p) = \frac{1}{2m} (p^2 + m^2\omega^2 q^2). \quad (2.56)$$

La acción dependiente de la posición se escribe en este caso como

$$S(q, I) = I \left[\arctan \left(\frac{q}{\sqrt{\frac{2I}{m\omega} - q^2}} \right) + \frac{q}{\sqrt{\frac{2I}{m\omega}}} \sqrt{\frac{2I}{m\omega} - q^2} \right], \quad (2.57)$$

donde, la variable de acción I viene dada por

$$I(q, p) = \frac{E}{\omega}. \quad (2.58)$$

A partir de estos resultados y empleando (2.45) tendremos que la expresión para un determinado autoestado semi-clásico de energía E del operador Hamiltoniano de una partícula sometida a un potencial de oscilador armónico viene dado por

$$\psi_m(q)^{\text{s.c.}} = \frac{\left[\frac{p(q, I)}{(m^2\omega^2)} \right]^{-\frac{1}{4}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S(q, I) \right)}{\sqrt{\int (m\omega) [p(q, I_m)]^{-1/2} dq}}, \quad (2.59)$$

donde, la integral del factor de normalización está restringida a los valores que puede tomar q dentro de la elipse y $S(q, I)$ viene dado por (2.57).

Empleando (2.51), (2.58) y (2.55) se obtiene la siguiente expresión para la función de Wigner semi-clásica para el caso de un potencial armónico

$$W(q, p) = \frac{\sqrt{2} \left[\frac{3}{2} A(q, p) \right]^{\frac{1}{6}} \text{Ai} \left(\left[\frac{3A(q, p)}{2\hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right)}{\pi \hbar^{\frac{2}{3}} [(q + y_0)p(q - y_0) - p(q + y_0)(q - y_0)]^{1/2}} \quad (2.60)$$

donde,

$$\begin{aligned} A(q, p) &= \frac{E}{2\pi\omega} \left\{ \left[\arctan \left(\frac{q \pm y_0}{\sqrt{\frac{2I}{m\omega} - (q \pm y_0)^2}} \right) + \frac{q \pm y_0}{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} \sqrt{\frac{2I}{m\omega} - (q \pm y_0)^2} \right] \right. \\ &\quad \left. - \left[\arctan \left(\frac{q \mp y_0}{\sqrt{\frac{2I}{m\omega} - (q \mp y_0)^2}} \right) + \frac{q \mp y_0}{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} \sqrt{\frac{2I}{m\omega} - (q \mp y_0)^2} \right] \right\} \mp 2py_0 \end{aligned} \quad (2.61)$$

A partir de esta función de Wigner podremos representar en el espacio de fase los autoestados semi-clásicos correspondientes a una partícula sometida a un potencial de oscilador armónico cuántico dados según (2.59).

Capítulo 3

Sistemas híbridos clásico-cuánticos y la función de Wigner

Existen diversas situaciones físicas en donde estamos interesados en conocer la dinámica de un sistema cuántico cuyas partículas integrantes pueden agruparse en partículas o grados de libertad ligeros y partículas o grados de libertad más pesados. Este es el caso, por ejemplo, de los sistemas moleculares en donde los núcleos son pesados y lentos y los electrones son ligeros y rápidos. Para estos sistemas, con miles de grados de libertad, no es factible intentar encontrar una solución cuantitativa de la ecuación de Schrodinger. Una aproximación natural a estos sistemas son los sistemas híbridos clásico-cuántico en donde los grados de libertad o partículas más masivas se modelizan como objetos clásicos mientras que los grados de libertad ligeros se modelizan como objetos cuánticos. No obstante, estos grados de libertad modelados como clásicos evolucionan acoplados a aquellos grados de libertad cuánticos. De esta forma en este tipo de sistemas los estados correspondientes a las partículas mas ligeras se mantienen como estados cuánticos y los correspondientes a la partículas más pesadas se aproximan como estados semi-clásicos.

El formalismo matemático que nos permita explicar la dinámica de los sistemas híbridos no es claro debido al acoplamiento entre los grados de libertad clásicos y cuánticos presentes en el sistema. Podríamos pensar en construir una teoría para la dinámica de estos sistemas de forma tal que esta se aproxime tanto como sea posible a la dinámica completamente cuántica del sistema, sin embargo, si esta dinámica no es conocida, como sucede en la mayoría de los casos de interés, este enfoque no es útil y debemos entonces recurrir a la construcción de una teoría, desde un enfoque más fundamental, basándonos en demandas de consistencia tanto físicas como matemáticas establecidas por la naturaleza del sistema.

3.1. Sobre la mecánica estadística de los sistemas híbridos

En el marco de este enfoque fundamental estudiaremos entonces la mecánica estadística de estos sistemas híbridos siguiendo las líneas indicadas en la referencia [1]. Una correcta descripción mecánico estadística de un sistema físico empieza por definir su espacio muestral: aquel conjunto de estados mutuamente excluyentes (EME) que pueden ser caracterizados únicamente por medio de los resultados de un experimento. Recordemos la noción de espacio muestral aplicada

al caso de sistemas puramente clásicos y puramente cuánticos.

En el caso de los sistemas clásicos, el espacio de fase, esto es, el espacio de todos los posibles estados del sistema clásico, viene dado por el conjunto de todas las posibles posiciones y momentos de las n partículas del sistema: $\mathcal{M}_C = \{(Q, P) | Q \in \mathbb{R}^n, P \in \mathbb{R}^n\}$. Es claro que cada punto de este espacio de fase define un evento exclusivo y por lo tanto, el espacio de fase es conveniente para la descripción estadística de sistemas clásicos. Es decir, el espacio de fase constituye su propio espacio muestral. Luego, la mecánica estadística de sistemas clásicos puede describirse usando ensembles, esto es, empleando funciones de distribución de probabilidad (FDP) definidas sobre este espacio de estados, $F_C = F_C(q, p)$.

En el caso de los sistemas cuánticos, los posibles estados del sistema vienen dados por rayos unitarios definidos sobre un espacio de Hilbert complejo \mathcal{H} . El espacio de todos los rayos unitarios es un espacio de Hilbert proyectivo luego, $\mathcal{M}_Q = \mathcal{P}\mathcal{H}$. Representaremos los puntos de este espacio, esto es los rayos, como proyectores sobre subespacios unidimensionales, $\hat{\rho}_\psi = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}$ con $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$. A pesar de que todos los estados de este espacio son físicamente legítimos, éstos no son mutuamente exclusivos. Por ejemplo, un sistema puede tener probabilidad uno de encontrarse en el estado $\hat{\rho}_{\psi_1}$ y aún así la probabilidad de medirlo en un estado $\hat{\rho}_{\psi_2}$ no es necesariamente igual a cero, a menos que, los estados sean ortogonales. Sin embargo, si sobre este espacio de estados consideramos definir un conjunto maximal de vectores ortogonales y definimos sobre este una función de distribución de probabilidad podremos describir la mecánica estadística de sistemas cuánticos. Esta es precisamente la idea que subyace a la matriz densidad propuesta por von Neumann.

Alternativamente dada una distribución de probabilidad F_Q definida sobre el espacio de estados, uno puede llegar a definir ensembles mediante la siguiente expresión

$$\hat{\rho}[F_Q] = \int d\mu_Q(\hat{\rho}_\psi) F_Q(\hat{\rho}_\psi) \hat{\rho}_\psi, \quad (3.1)$$

donde, $d\mu_Q$ es el elemento de volumen de la variedad descrita por \mathcal{M}_Q .

Sin embargo, definir funciones de distribución de probabilidad, F_Q , sobre el espacio de estados, siguiendo la analogía clásica, trae como resultado sobrecontar configuraciones no mutuamente excluyentes. Una manera clara de ver esto es el hecho de que distribuciones diferentes definidas sobre el espacio de estados pueden corresponder al mismo ensemble y por lo tanto ser físicamente indistinguibles. Este hecho de sobrecontar configuraciones puede afectar al cálculo de la entropía la cual está intimamente ligada al número de configuraciones del sistema.

Descritos los correspondientes espacios de fase y espacios muestrales de los sistemas puramente clásicos y cuánticos consideremos ahora describir el espacio de fase de los sistemas híbridos. Estos sistemas tendrán una parte clásica descrita por las variables canónicas posición $Q \in \mathbb{R}^n$ y momento $P \in \mathbb{R}^n$ que agruparemos, por simplicidad, en la variable clásica $\xi = (Q, P)$ y una parte cuántica descrita por un espacio de Hilbert complejo \mathcal{H} , tal que, el espacio de fase combinado híbrido será $\mathcal{M}_H = \mathcal{M}_C \times \mathcal{M}_Q$, donde \times es el producto cartesiano de las correspondientes variedades. Los observables del sistema híbrido son operadores hermíticos definidos sobre \mathcal{H} y pueden ser de tres tipos: observables híbridos que dependen paramétricamente de las variables

clásicas ξ , $\hat{A}(\xi)$, observables definidos sobre el subsistema clásico $\hat{A}(\xi) = A(\xi)\hat{I}$ y observables cuánticos que carecen de dependencia sobre las variables clásicas ξ . Para este trabajo estas serán todas las posibilidades consideradas, aunque, *a priori* se podrían considerar observables híbridos con dependencias más complicadas.

Con la finalidad de realizar la mecánica estadística de sistemas híbridos de forma consistente debemos considerar las nociones clásica y cuántica de eventos mutuamente excluyentes. De acuerdo a estas consideraciones tendremos que dos estados híbridos $(\xi_1, \hat{\rho}_{\psi_1}), (\xi_2, \hat{\rho}_{\psi_2}) \in \mathcal{M}_H$ son mutuamente excluyentes si y solo si $\xi_1 \neq \xi_2$ ó $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$. Siguiendo la idea de Von Neumann y de acuerdo al teorema de Gleason [7] tendremos entonces que si definimos una función de distribución de probabilidad, F_{QC} , sobre este conjunto podremos construir una matriz densidad para el sistema híbrido de forma consistente. Debido a que las propiedades físicas del sistema, en general, combinan a los estados de \mathcal{M}_H y \mathcal{M}_C no podemos pensar en estos conjuntos como conjuntos estadísticamente independientes. Sin embargo, si asumimos que podemos medir cualquier observable clásico y cualquier observable híbrido, $\hat{A}(\xi)$, simultáneamente entonces, podemos definir la probabilidad condicional, $p(a|\xi)$, asociada a la medición de un autovalor del operador $\hat{A}(\xi)$ cuando el subsistema clásico se encuentra en un estado arbitrario $\xi \in \mathcal{M}_C$. Podemos entonces descomponer las probabilidades asociadas a una medición híbrida en una probabilidad marginal definida sobre el conjunto de variables aleatorias ξ , esto es, sobre el espacio de fase clásico y una probabilidad condicional asociada a la medición del observable $\hat{A}(\xi)$ dado ξ :

$$p(a, \xi) = F_C(\xi) p(a|\xi). \quad (3.2)$$

El teorema de Gleason [7] afirma que cualquier sistema cuántico de dimensión estrictamente mayor que 2 puede caracterizarse únicamente mediante una matriz densidad, esto permite definir en cada punto ξ una matriz densidad $\hat{\rho}^\xi$ la cual proporciona las probabilidades de medir un autovalor a del observable $\hat{A}(\xi)$ dado ξ a través de la regla de Born $p(a|\xi) = \text{Tr}[\hat{\rho}^\xi \hat{\pi}_a(\xi)]$, siendo $\hat{\pi}_a(\xi)$ el proyector sobre el subespacio asociado al autovalor a . A partir de esto, podemos definir también la matriz densidad híbrida como la matriz ξ -dependiente

$$\hat{\rho}(\xi) = F_C(\xi) \hat{\rho}^\xi, \quad (3.3)$$

tal que la distribución bivariada $p(a, \xi)$ se obtiene a partir de $\text{Tr}[\hat{\rho}(\xi) \hat{\pi}(a)]$. Es importante señalar que la construcción de la matriz $\hat{\rho}^\xi$ a partir una distribución de probabilidad, F_{QC} , no es unívoca, lo que hace que la obtención de esta matriz densidad condicional, a través de esta vía, sea complicada.

Para cada ξ , $\hat{\rho}(\xi)$ es un operador autoadjunto, no negativo y se encuentra normalizado sobre el espacio de fase híbrido

$$\int_{\mathcal{M}_C} d\mu_C(\xi) \text{Tr}[\hat{\rho}(\xi)] = 1, \quad (3.4)$$

lo cual, es una consecuencia inmediata de la normalización de $F_C(\xi)$ y $\hat{\rho}^\xi$. Por lo tanto, dado un estado híbrido determinado por el punto clásico ξ , cuya probabilidad viene dada por $\text{Tr}\hat{\rho}(\xi)$, y

el estado cuántico representado por el proyector $\hat{\pi}$, la probabilidad de medir al sistema híbrido en este estado viene dada por $\text{Tr}[\hat{\rho}(\xi)\hat{\pi}]$.

Habiendo caracterizado así los estados, podemos ahora pasar a considerar la función entropía correspondiente. Empleando la definición general de entropía para una distribución bivariada $p(x, y)$ tendremos que la entropía de un sistema híbrido puede descomponerse en una entropía (clásica) asociada a la distribución marginal clásica y una entropía cuántica (entropía de von Neumann) asociada a la probabilidad condicional $\hat{\rho}^\xi$, la cual estará pesada por la distribución clásica, esto es,

$$S[\hat{\rho}(\xi)] = \overbrace{-k_B \int_{\mathcal{M}_C} d\mu_C(\xi) F_C(\xi) \log(F_C(\xi))}^{S_C(F_C)} + \int_{\mathcal{M}_C} d\mu_C(\xi) F_C(\xi) \overbrace{[-k_B \text{Tr}(\hat{\rho}^\xi \log \hat{\rho}^\xi)]}^{S_{vN}(\hat{\rho}^\xi)} \quad (3.5)$$

Esta entropía propuesta en [1] combina la información cuántica y clásica del sistema híbrido de forma consistente puesto que pesa correctamente a ambos subsistemas, en particular al subsistema cuántico, a partir de la noción de eventos mutuamente excluyentes definida sobre el espacio de fase híbrido. Además si consideramos que el sistema clásico es puro, esto es, $F_C(\xi) = \delta(\xi - \xi_0)$ tendremos que la entropía del sistema será únicamente la entropía de von Neumann; en cambio, si consideramos que el sistema cuántico es puro, esto es, la entropía de von Neumann es nula, recuperamos la entropía clásica. Por lo tanto, la entropía definida por (3.5) tiene correctamente definidos los límites clásicos y cuánticos.

A partir de esta función de entropía y considerando que el sistema híbrido se encuentra en equilibrio podemos hallar el ensemble de equilibrio imponiendo el principio de máxima entropía. Se puede demostrar (ver [1]) que el ensemble que maximiza la entropía, entre aquellos con un valor fijo de la energía promedio $E = \langle \hat{H}(\xi) \rangle$, viene dado por

$$\hat{\rho}_{HCE}(\xi) = \frac{e^{-\beta \hat{H}(\xi)}}{Z_{HCE}(\beta)}, \quad (3.6)$$

$$Z_{HCE}(\beta) = \int_{\mathcal{M}_C} d\mu_C(\xi) \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}(\xi)}), \quad (3.7)$$

donde $\hat{H}(\xi) = f_H^c(\xi)\hat{I} + \hat{H}_Q(\xi)$, Z_{HCE} es la función de partición del ensemble de equilibrio y β es una constante determinada por el valor de la energía.

Se puede checar que el ensemble definido por (3.6) satisface una serie de requerimientos propios de un ensemble canónico de equilibrio:

1. Factorización de la función de partición y por ende aditividad de las variables termodinámicas extensivas.
2. Los ensembles clásicos y cuánticos que maximizan la entropía de Gibbs y la entropía de von Neumann se recuperan cuando solo puntos clásicos son permitidos y cuando solo existen estados de energía cuánticos respectivamente.

3. Si el acople entre los dos subsistemas que conforman el sistema híbrido tiende a cero, entonces el ensemble canónico híbrido es el producto de los ensembles clásico y cuántico lo cual maximiza la suma de sus respectivas entropías.

Otro de los requerimientos que un ensemble de equilibrio debe verificar es la estacionaridad del ensemble bajo la dinámica de los microestados. Sin embargo, la ecuación de la dinámica híbrida, esto es, la ecuación maestra que nos permita conocer la evolución para todo tiempo de la matriz densidad híbrida, y por ende, la dinámica de los microestados híbridos, es un tema abierto. Como la ecuación de von Neumann hace estacionario el ensemble canónico cuántico, es claro que, una ecuación generalizada de von Neumann haría estacionario al ensemble canónico híbrido, ya que este ensemble es un aproximación semi-clásica del ensemble canónico cuántico. Sin embargo, otras dinámicas también son posibles. La finalidad de nuestro estudio, a medio plazo, es conseguir, precisamente, una caracterización de la dinámica de $\hat{\rho}(\xi)$. En este sentido, queremos estudiar que información nos puede proveer el formalismo de Wigner-Weyl acerca de la caracterización del sistema mecánico estadístico híbrido y por ende de la dinámica de estos.

3.2. Aplicación al formalismo híbrido de las funciones de Wigner

El formalismo de las funciones de Wigner y en particular, la caracterización semi-clásica de estas funciones [3] nos podría permitir de una manera sencilla caracterizar la distribución de probabilidad marginal clásica y la probabilidad condicional para un sistema híbrido clásico-cuántico. Para este trabajo en particular consideraremos hacer esta caracterización en el caso de un sistema de dos partículas de masas m y M como aquel descrito en la sección (2.2). Si asumimos que $M \gg m$ podemos considerar este sistema como un sistema híbrido donde la partícula más pesada puede modelizarse como un objeto semi-clásico tal que sus estados pueden approximarse por los estados semi-clásicos dados según (2.59). Luego, por ejemplo, en el caso de que el sistema se encuentre en un estado separable tendremos, de acuerdo con (2.32), que la función de Wigner correspondiente a dicho estado puede escribirse como

$$\begin{aligned} W_s(q_M, p_M, q_m, p_m) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \left[\int dq_M e^{\frac{-ip_M y_M}{\hbar}} \psi_{E_M}^{S.C.}(q_M + y_M/2) \psi_{E_M}^{*, S.C.}(q_M - y_M/2) \right] \\ &\times \left[\int dq_m e^{\frac{-ip_m y_m}{\hbar}} \psi_{E_m}(q_m + y_m/2) \psi_{E_m}^*(q_m - y_m/2) \right] \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\equiv W(q_M, p_M)^{S.C.} W(q_m, p_m), \quad (3.9)$$

donde, $W(q_M, p_M)^{S.C.}$ vendrá dada por (2.60)

En general, considerando la expansión asintótica de la función de Wigner semi-clásica tendremos que ésta es una serie que incorpora progresivamente los efectos cuánticos. Empleando (2.49) y (2.53) tendremos los dos primeros efectos que vendrán dados por,

$$W^0(q_M, p_M)^{\text{s.c.}} = W_m^c(q_M, p_M) = \frac{1}{2\pi} \delta(I(q_M, p_M) - I_m), \quad (3.10)$$

$$W^1(q_M, p_M)^{\text{s.c.}} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{\hbar^2 B(q_M, p_M)} \right)^{\frac{1}{3}} \text{Ai} \left[2 \left\{ I(q_M, p_M) - I(E) \right\} \left(\frac{1}{\hbar^2 B(q_M, p_M)} \right)^{\frac{1}{3}} \right]. \quad (3.11)$$

Si suponemos que a orden n esta función de Wigner semi-clásica constituye una “buena” distribución de probabilidad, en el sentido de que es siempre positiva para todo punto del espacio del fase en el que está definida, esto es, satisface el primer axioma de Kolmogorov entonces, el orden enésimo de la función de Wigner semi-clásica, $W^n(q_M, p_M)^{\text{s.c.}}$, podrá ser considerada como la función de distribución marginal clásica y $W^n(q_M, p_M, q_m, p_m)$ será equivalente a $\hat{\rho}(\xi)$ dada por (3.3). A partir de las expresiones (3.10), (3.11) podremos verificar si hasta orden uno en la expansión asintótica de la función de Wigner semi-clásica ésta constituye una buena distribución de probabilidad.

A partir de la caracterización de la distribución marginal clásica, una caracterización de la probabilidad condicional, $\hat{\rho}^\xi$, también es posible, puesto que si consideramos hacer el cociente de la función de Wigner, $W(q_M, p_M, q_m, p_m)$, con la función de distribución de probabilidad marginal clásica, dada por $W^n(q_M, p_M)^{\text{s.c.}}$, obtendremos $W(x_m, p_m)$ que es una representación, en términos del espacio de fase, de la matriz densidad asociada a los grados de libertad cuánticos.

Luego, nuestro objetivo será aprender a construir estos órdenes de la función de Wigner semi-clásica tanto para el caso en el cual el sistema de dos partículas se encuentra en un estado separable como para el caso más general en el cual el sistema se encuentra en un estado entrelazado. A partir de esta construcción podremos tener una caracterización de las distintas probabilidades asociadas a la medición híbrida de nuestro sistema.

La caracterización únicoca de $\hat{\rho}^\xi$ no es la única ventaja que ofrece la implementación de las funciones de Wigner dentro del formalismo de los sistemas híbridos sino que además la estructura iterativa de la función de Wigner semi-clásica permitiría tomar en cuenta posibles correcciones para la matriz densidad híbrida (3.3) a través de los $k - n$ órdenes restantes de la aproximación. Estas correcciones a la matriz densidad híbrida se traducen consecuentemente, en posibles correcciones para la dinámica de ésta. No obstante, el estudio dinámico se analizará en un trabajo futuro.

Capítulo 4

Aplicación: funciones de Wigner de dos osciladores armónicos unidimensionales

En este capítulo se mostrarán los resultados originales obtenidos de la construcción de la función de Wigner semi-clásica correspondiente tanto a un estado separado como a un estado entrelazado de nuestro sistema unidimensional de dos partículas sometidas a un potencial de oscilador armónico. Su interés es, primero, la caracterización simple de los candidatos a distribución marginal clásica para un sistema estadístico híbrido clásico-cuántico. Además, estos resultados nos proporcionan una fuente de información valiosa para la segunda parte de este proyecto en el que se pretende estudiar la forma en que la dinámica de un sistema completamente cuántico se reflejaría en una aproximación en la que parte de los grados de libertad se aproximan por variables clásicas. Estudiaremos específicamente autoestados semi-clásicos correspondientes a energías $E_0 \equiv \frac{1}{2}\hbar\omega$ y $E_1 \equiv \frac{3}{2}\hbar\omega$. A lo largo de este capítulo consideraremos $m = 1$, $M = 4$ y $\omega_m = \omega_M = 1$. Es importante destacar que a pesar de emplear esta notación para las energías, estas son energías clásicas. Las energías clásicas en el espacio de fases forman un continuo y en particular se puede elegir estos valores de la energía, esto es, elegir la elipse dada por $H(q, p) = E_0$ ó la elipse dada por $H(q, p) = E_1$.

Para realizar el cálculo de la función de Wigner semi-clásica se ha desarrollado un código en Python empleando las librerías NumPy, SymPy y SciPy. Este código se encuentra en el anexo (B) del presente trabajo.

4.1. Construcción de las funciones de Wigner semi-clásicas para un estado separable.

A lo largo de esta sección consideraremos estudiar el caso de un sistema de dos partículas, como aquel discutido en la sección (2.2), en un estado separable. Sabemos que para dicho sistema la función de Wigner viene dada por (3.9), más aún, dado que la función de Wigner asociada a los grados de libertad cuánticos está normalizada sobre el espacio de fase, si consideramos integrar sobre éstos, podremos estudiar la función de Wigner semi-clásica correspondiente a dicho estado, esto es,

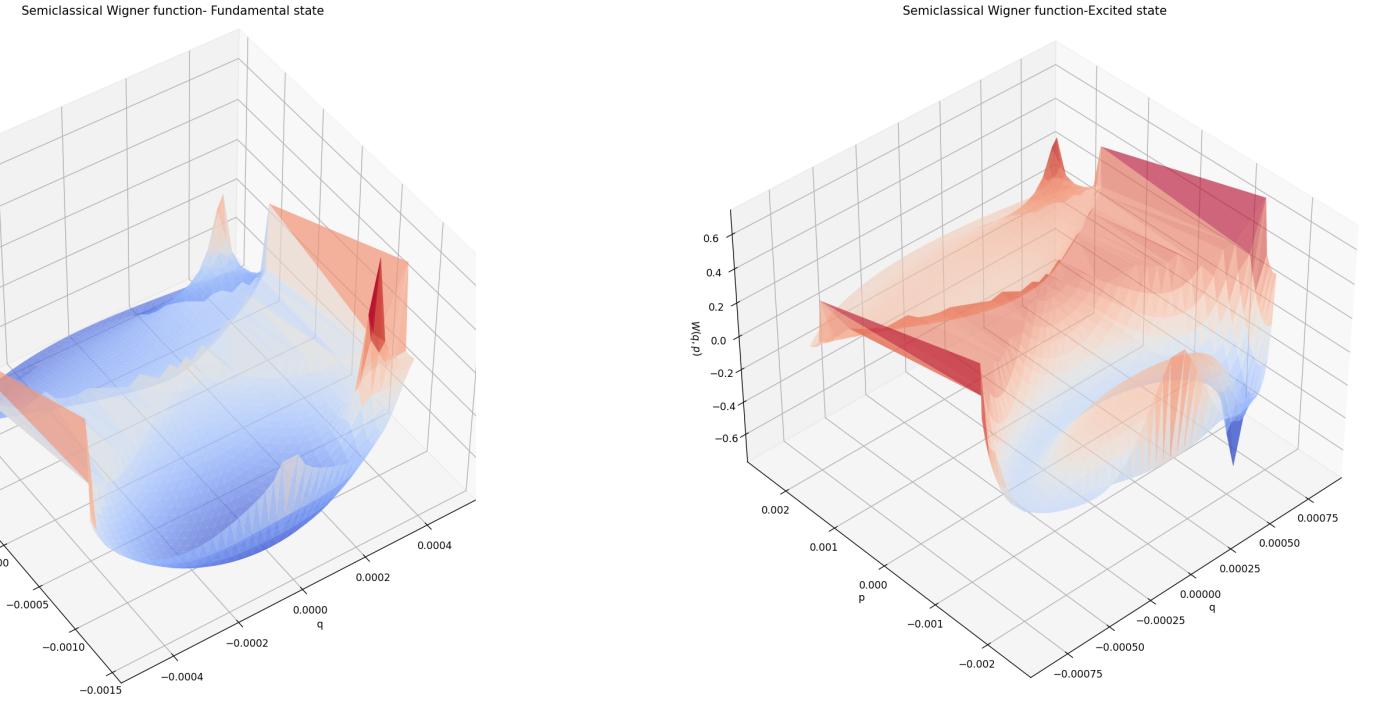


Figura 4.1: Izquierda: Función de Wigner semi-clásica para estado de energía E_0 . Derecha: Función de Wigner semi-clásica para estado de energía E_1 .

$$\begin{aligned}
 \int dq_m dp_m W_S(q_M, p_M, q_m, p_m) &= \overbrace{\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dq_M e^{\frac{-ip_M y_M}{\hbar}} \psi_{E_M}^{\text{s.c.}}(q_M + y_M/2) \psi_{E_M}^{*\text{s.c.}}(q_M - y_M/2) \right]}^{W(q_M, p_M)^{\text{s.c.}}} \\
 &\times \int dq_m dp_m \overbrace{\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dq_m e^{\frac{-ip_m y_m}{\hbar}} \psi_{E_m}(q_m + y_m/2) \psi_{E_m}^*(q_m - y_m/2) \right]}^{W(q_m, p_m)} \\
 &= W_{E_M E_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M), \tag{4.1}
 \end{aligned}$$

donde, $W_{E_M E_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M)$ viene dada por (2.60).

En la Fig. (4.1) se puede observar una representación gráfica de esta función de Wigner semi-clásica correspondiente a autoestados de la forma (2.59). La función de Wigner semi-clásica correspondiente al autoestado de energía E_0 (figura izquierda) es positiva en todos los puntos del espacio de fase donde se encuentra definida, esto es, en la elipse $H(q, p) = E_0$. Sin embargo, en el caso del autoestado de energía E_1 (figura derecha) la función de Wigner posee valores negativos para algunos puntos del espacio de fase restringidos a su respectiva elipse $H(q, p) = E_1$. Podemos

ver que para ambos casos las respectivas funciones de Wigner semi-clásicas presentan oscilaciones dentro de la elipse, dichas oscilaciones provienen de la suma de los efectos cuánticos que contiene la expansión asintótica de la función de Airy. Puede observarse también que ambas funciones de Wigner semi-clásicas parecen estar delimitadas a los extremos de la elipse, cayendo a cero para valores q, p fuera de esta. La delimitación sobre los extremos q es bastante notoria y, en principio, lo mismo debería ocurrir para los extremos p , sin embargo, puede que esto no se observe por falta de precisión numérica en el cálculo de estas funciones.

El orden cero de la expansión de la función de Wigner semi-clásica se encuentra representado, para el caso del estado de energía E_1 , en la Fig.(4.2) izquierda (el caso correspondiente a la energía E_0 sería análogo). Recordemos que habíamos probado analíticamente que este límite clásico corresponde a una función delta centrada en la elipse de energía E_1 . Más aún, $W^0(q, p)_{\text{S.C}}$ es uniforme y positiva sobre la elipse. Para este caso límite no se tienen las oscilaciones que estaban presentes dentro de la elipse en la función de Wigner semi-clásica correspondiente a las Figs. (4.1) por lo que, en este límite las correcciones cuánticas son nulas, correspondiéndose efectivamente con el límite clásico puro de la parte semi-clásica del estado separable.

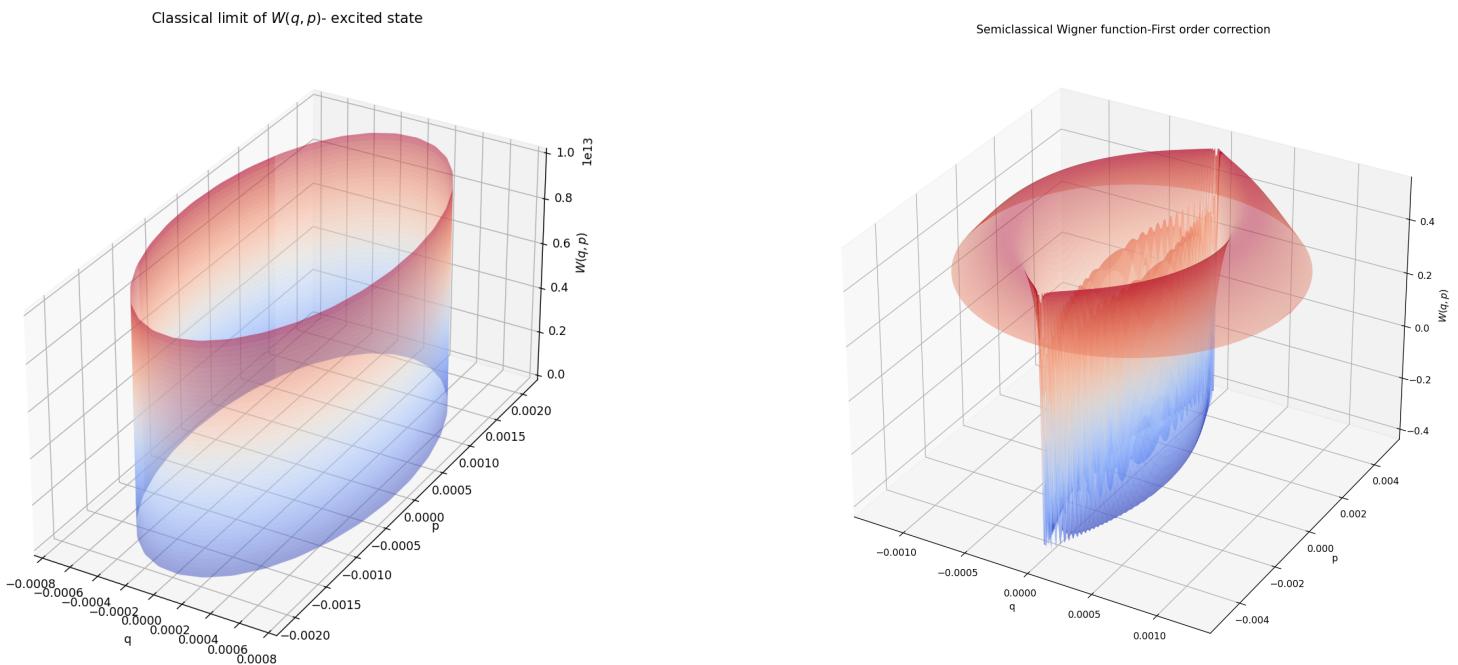


Figura 4.2: Izquierda: Orden cero de la función de Wigner semi-clásica correspondiente al estado de energía E_1 . Derecha: Orden uno de la función de Wigner semi-clásica correspondiente al estado de energía E_1 .

El orden uno de la expansión asintótica de la función de Wigner se representa en la Fig. (4.2) derecha. De esta representación se puede observar que este primer orden de la función de Wigner semi-clásica no es positivo ni tampoco uniforme sobre la elipse, ya que contiene oscilaciones dentro de esta que pueden tomar valores negativos. A partir de esto podemos ver

que ya a primer orden los efectos cuánticos se manifiestan.

Luego, estrictamente hablando, sólo a orden cero en la aproximación asintótica [Fig. izquierda (4.2)] la función de Wigner semi-clásica constituye una buena función de distribución marginal clásica para nuestro sistema clásico-cuántico puesto que es la única que carece de negatividad y de contribuciones cuánticas que se manifiestan dentro de la elipse como oscilaciones. De acuerdo con esto tendremos que $W_S^0(q_M, p_M, q_m, p_m) \equiv W^0(q_M, p_M)^{S.C.} W(q_m, p_m)$ será equivalente la matriz densidad dada por (3.3), de forma que las expresiones analíticas para la densidad de probabilidad marginal clásica y la probabilidad condicional cuántica, asociadas a este estado separable, vendrán dadas según

$$F_C(\xi) \equiv F_C(q_M, p_M) = \delta\left(I(q_M, p_M) - \frac{E_1}{w}\right), \quad (4.2)$$

$$\hat{\rho}^\xi = \vartheta\left[\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dq_m e^{\frac{-ip_m y_m}{\hbar}} \psi_{E_m}(q_m + y_m/2) \psi_{E_m}^*(q_m - y_m/2)\right)\right] = \vartheta[W(q_m, p_m)] \quad (4.3)$$

donde, $I(q, p)$ viene dada por (2.58) y ψ_{E_m} son los autoestados de energía correspondientes al oscilador armónico cuántico en la representación posición.

El hecho de que las correcciones cuánticas aparezcan ya a primer orden en la expansión asintótica nos dice que la función de Wigner semi-clásica ya a este orden dejará de ser una buena función de distribución marginal clásica para nuestro sistema híbrido. Si estos efectos cuánticos aparecieran mucho después y por consiguiente, fuesen muy pequeños (órdenes altos en \hbar), entonces, podríamos pensar que la matriz densidad híbrida propuesta en la ecuación (3.3) es un modelo bastante aproximado. Sin embargo, debido a la rápida aparición de estos efectos (órdenes bajos en \hbar) el modelo está incompleto puesto que se corresponde únicamente con el orden cero puro de la función de Wigner semi-clásica. Para obtener entonces un modelo más aproximado de nuestro sistema, la matriz densidad híbrida $\hat{\rho}(\xi)$ definida según (3.3) deberá tomar en cuenta, al menos, las primeras correcciones cuánticas dadas por los primeros órdenes en la expansión asintótica. A partir de la expresión (3.11) se puede obtener la primera corrección al modelo propuesto por [1].

4.2. Construcción de las funciones de Wigner semi-clásicas para un estado entrelazado

La caracterización anterior es válida para un caso separable, que resulta relativamente simple. No obstante, vamos a ver que con las mismas herramientas, pueden estudiarse los casos de algunos estados entrelazados, cuyo análisis directo en términos de las matrices densidad híbridas pueden resultar complicados. Consideremos entonces hacer el mismo análisis anterior pero, para el caso en el que el sistema se encuentra en un estado entrelazado del tipo $|\psi_{Mm}^{EE'}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_M^{E_M}\rangle \otimes |\psi_m^{E_m}\rangle + |\psi_M^{E'_M}\rangle \otimes |\psi_m^{E'_m}\rangle)$, donde, $E_M \neq E'_M$ y $E_m \neq E'_m$. Empleando la aproximación semi-clásica para los grados de libertad de masa M tendremos, a partir de (2.33) y (2.59), la siguiente expresión para la correspondiente función de Wigner del estado entrelazado

$$\begin{aligned}
 W_{\text{ent}}(q_M, p_M, q_m, p_m) = & \frac{1}{2} \left\{ W_{E_M E_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) W_{E_m E_m}(q_m, p_m) \right. \\
 & + W_{E_M E'_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) W_{E_m E'_m}(q_m, p_m) + W_{E'_M E_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) W_{E'_m E_m}(q_m, p_m) \\
 & \left. + W_{E'_M E'_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) W_{E'_m E'_m}(q_m, p_m) \right\}, \tag{4.4}
 \end{aligned}$$

donde, los subíndices EE' , EE y $E'E'$ se refieren a la energía de los autoestados involucrados en el cálculo de la función de Wigner y, $W_{E_M E_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M)$, $W_{E'_M E'_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M)$ se refieren a la función de Wigner semi-clásica dada por (2.60). Para este caso, consideraremos $E = E_0$ y $E' = E_1$.

Nuevamente, si consideramos integrar $W_{\text{ent}}(q_M, p_M, q_m, p_m)$ sobre las coordenadas q_m, p_m del espacio de fase podremos caracterizar la función de distribución marginal asociada al estado entrelazado. Sin embargo, en este caso, la integral sobre las variables q_m, p_m de las funciones de Wigner, de la forma $W_{E'E}$ ó $W_{EE'}$, correspondientes a los estados cuánticos son cero, luego,

$$\begin{aligned}
 \int dq_m dp_m W_{\text{ent}}(q_M, p_M, q_m, p_m) = & \frac{1}{2} \left[W_{E_M E_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) + W_{E'_M E'_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) \right] \\
 \equiv & \frac{1}{2} W_{\text{ent}}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M). \tag{4.5}
 \end{aligned}$$

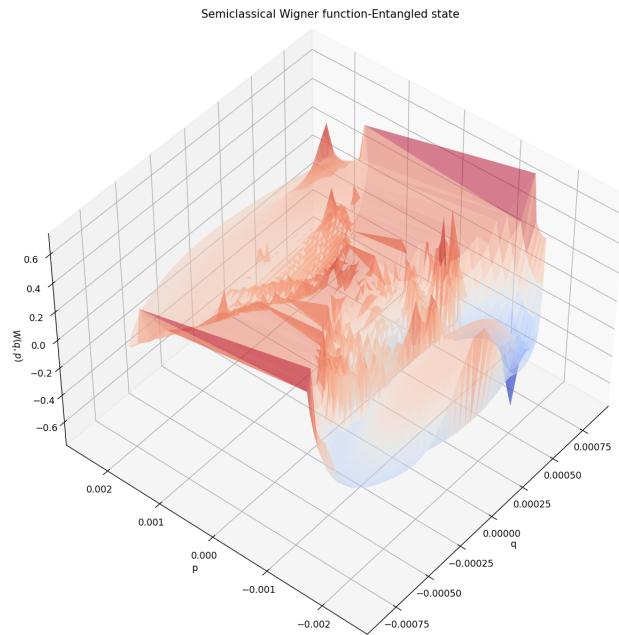


Figura 4.3: Función de Wigner semi-clásica para el estado entrelazado.

En la Fig. (4.3) se puede observar una representación de esta función de Wigner semi-clásica. Podemos ver que dicha función de Wigner posee valores negativos para algunos puntos del espacio de fase restringidos a la elipse $H(q, p) = E_1$. En este caso, también se pueden observar oscilaciones dentro de la elipse, sin embargo, como se puede apreciar de las Figs. (4.1) y (4.3) hay una mayor cantidad de estas oscilaciones para el caso entrelazado que para los casos de estados separables de energías E_0 y E_1 . Esto se debe a que para el caso entrelazado hay una “suma” de las diferentes contribuciones cuánticas, correspondientes a los dos estados entrelazados de diferentes energías, a la función de Wigner semi-clásica. Nuevamente se observa que la función de Wigner semi-clásica se encuentra delimitada a los extremos de la elipse de mayor energía, cayendo su valor a cero para puntos del espacio de fase exteriores a esta elipse. Sin embargo, es importante mencionar que dos delimitaciones deberían verse de forma clara, pero, solo una aparece. La razón de esto es que la discretización empleada para representar la función de Wigner correspondiente al estado de energía E_1 en puntos (q, p) exteriores a la elipse de energía $H(q, p) = E_0$ no contiene el punto en el cual aparece la delimitación para la elipse de menor energía.

El orden cero de la expansión asintótica de la función de Wigner semi-clásica para el estado entrelazado puede verse representado en la Fig. izquierda (4.4). Este orden se caracteriza por dos funciones deltas centradas en las elipses de energías E_0 y E_1 . Ambas deltas son uniformes y positivas sobre las respectivas elipses de diferentes energías. Dentro de la elipse no tendremos ningún tipo de contribuciones cuánticas (oscilaciones), por lo que este límite se corresponde con el límite puramente clásico de la parte semi-clásica del estado entrelazado.

El orden uno de la expansión asintótica para la función de Wigner semi-clásica correspondiente al estado entrelazado puede verse en la Fig. derecha (4.4). Este primer orden se caracteriza por ser negativo para algunos puntos (q, p) dentro de la elipse determinada por E_1 y también por contener oscilaciones dentro de dicha elipse. Luego también para el caso entrelazado vemos que las contribuciones cuánticas se hacen presentes para el primer orden de la expansión asintótica en la aproximación semi-clásica.

Tendremos entonces que también para el caso de estados entrelazados, sólo a orden cero la función de Wigner semi-clásica, $W_{\text{ent}}^{\text{S.C.}}(q_M, p_M)$, constituye una buena distribución de probabilidad marginal clásica para nuestro sistema híbrido. A este orden, entonces, dicha función de Wigner semi-clásica se corresponde con $F_C(\xi)$ la cual vendrá dada de forma analítica por la siguiente expresión

$$F_C(\xi) \equiv F_C(q_M, p_M) = \frac{1}{2} \left[\delta \left(I(q_M, p_M) - \frac{E_0}{\omega_M} \right) + \delta \left(I(q_M, p_M) - \frac{E_1}{\omega_M} \right) \right], \quad (4.6)$$

con lo cual, la expresión analítica para $\hat{\rho}^\xi$ puede expresarse como

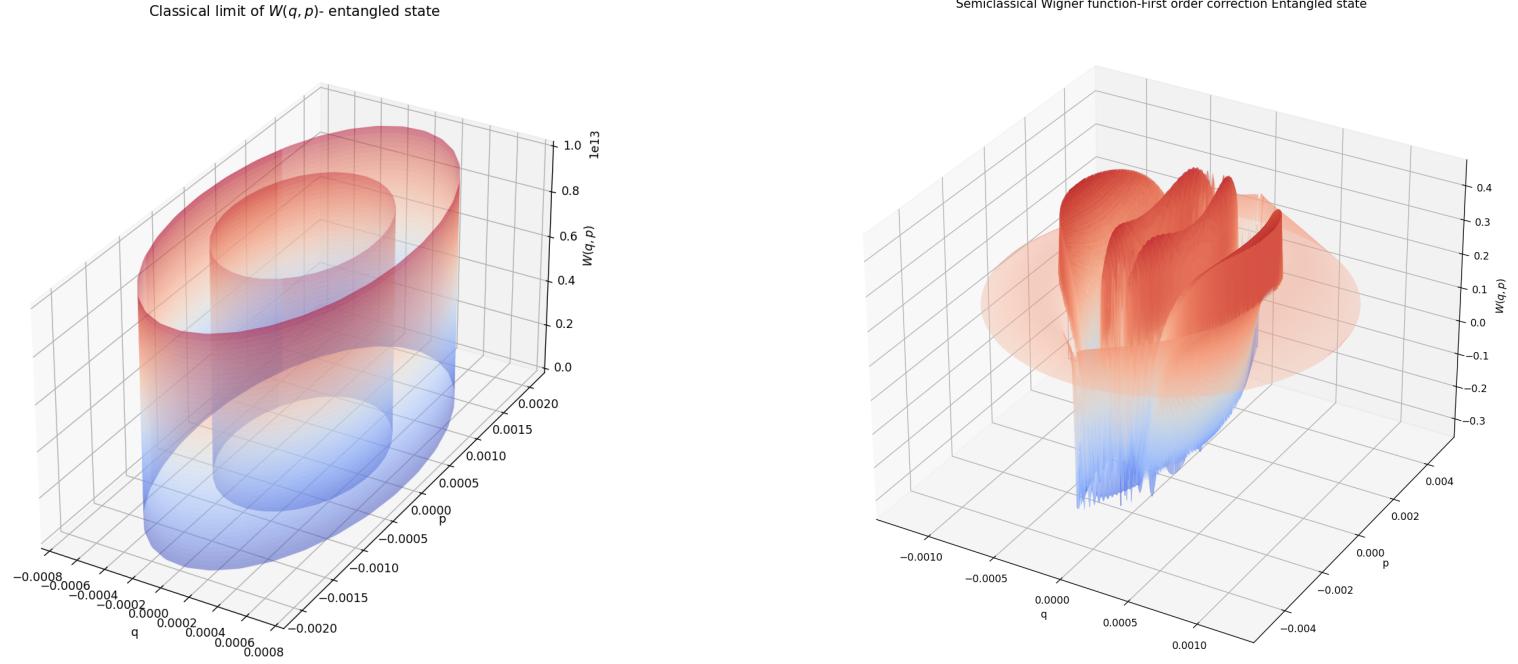


Figura 4.4: Izquierda: Función de Wigner semi-clásica de orden uno para el estado entrelazado
Derecha: Función de Wigner semi-clásica de orden dos para el estado entrelazado.

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho}^\xi &= \vartheta \left[\frac{1}{F_C(q_M, p_M)} \left(W_{E_M E_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) W_{E_m E_m}(q_m, p_m) \right. \right. \\
 &\quad + W_{E_M E'_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) W_{E_m E'_m}(q_m, p_m) + W_{E'_M E_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) W_{E'_m E_m}(q_m, p_m) \\
 &\quad \left. \left. + W_{E'_M E'_M}^{\text{s.c.}}(q_M, p_M) W_{E'_m E'_m}(q_m, p_m) \right) \right]. \tag{4.7}
 \end{aligned}$$

Nótese que, $\rho(\hat{\xi})$ vendrá dado por el producto de (4.6) y (4.7).

Al igual que en el caso anterior, vemos que la caracterización de la matriz densidad híbrida dada en general por (3.3), es una caracterización incompleta puesto que se corresponde con el orden más bajo en la expansión asintótica de la función de Wigner en la aproximación semi-clásica. Luego, para caracterizar correctamente el sistema estadístico clásico-cuántico no podemos emplear únicamente (3.3) sino que además debemos tomar en cuenta las diferentes correcciones cuánticas que aparecen rápidamente en los primeros órdenes de la aproximación semi-clásica. Una primera corrección para la matriz densidad viene dada, de acuerdo con (3.11), por la siguiente expresión analítica

$$\hat{\rho}(\xi) = \vartheta \left[W^1(q_M, p_M)^{\text{s.c.}} \right], \quad (4.8)$$

donde,

$$\begin{aligned} W^1(q_M, p_M)^{\text{s.c.}} &= \frac{1}{\pi} \left\{ \left(\frac{1}{\hbar^2 B_0(q_M, p_M)} \right)^{\frac{1}{3}} \text{Ai} \left[2 \left\{ I_0(q_M, p_M) - I(E_0) \right\} \left(\frac{1}{\hbar^2 B_0(q_M, p_M)} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \right. \\ &+ \left. \left(\frac{1}{\hbar^2 B_1(q_M, p_M)} \right)^{\frac{1}{3}} \text{Ai} \left[2 \left\{ I_1(q_M, p_M) - I(E_1) \right\} \left(\frac{1}{\hbar^2 B_1(q_M, p_M)} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

con los subíndices 0 y 1 de las funciones $I(q_M, p_M)$ y $B(q_M, p_M)$ refiriéndose a los dominios donde están definidas dichas funciones los cuales vienen caracterizados por las elipses $H(x_M, p_M)$.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se ha comenzado el estudio del tratamiento de las funciones de Wigner para la caracterización de sistemas híbridos clásico-cuánticos. Se ha considerado el caso simple de un par de osciladores armónicos en el cual uno de ellos se estudia desde una perspectiva semicásica (para representar a la partícula pesada) y el otro desde una perspectiva cuántica. Hemos probado que la implementación del formalismo de Wigner-Weyl dentro de la aproximación de autoestados semi-clásicos (2.45) nos ha permitido construir la función de Wigner semi-clásica tanto para un estado separable como para un estado entrelazado del sistema híbrido. A partir de esta construcción podemos concluir que sólo a orden cero la función de Wigner semi-clásica correspondiente constituye una buena distribución de probabilidad marginal clásica para nuestro sistema híbrido puesto que al considerar el siguiente orden en la expansión asintótica de dicha función de Wigner aparecen contribuciones cuánticas como oscilaciones dentro de la elipse clásica. Por lo tanto, sólo a este orden cero, la función de Wigner semi-clásica se corresponde con la distribución de probabilidad marginal clásica $F_C(\xi)$. Gracias a la implementación del formalismo de Wigner-Weyl dicha distribución marginal clásica y la distribución de probabilidad cuántica del sistema han sido obtenidas de manera analítica para cada uno de los estados estudiados.

El hecho de que ya a órdenes bajos en la aproximación semi-clásica aparezcan efectos cuánticos nos dice que la matriz densidad híbrida dada por (3.3) constituye un modelo incompleto para la descripción del estado del sistema híbrido puesto que esta se corresponde con el orden más bajo en la expansión asintótica de función de Wigner semi clásica. A partir del tratamiento de las funciones de Wigner hemos conseguido una expresión analítica para la corrección de primer orden de esta matriz densidad híbrida en los dos casos.

Vemos así, que la implementación del formalismo de Wigner-Weyl ofrece un enfoque en el cual se pueden caracterizar, de manera sencilla, las distintas probabilidades asociadas a la medición híbrida del sistema, esto es, la distribución de probabilidad marginal clásica y la probabilidad condicional cuántica. Además este formalismo nos puede proveer información sobre las distintas correcciones que debemos hacer a la matriz densidad híbrida (3.3) y también a una posible ecuación de von Neumann generalizada para de esta forma obtener una descripción más aproximada del sistema mecánico estadístico clásico-cuántico. Por lo tanto consideramos que mediante este enfoque podemos mejorar la descripción del sistema híbrido mecánico estadístico.

Bibliografía

- [1] J. L. Alonso **and others**. “Entropy and canonical ensemble of hybrid quantum classical systems”. **in:** Physical Review E 102.4 (2020), **page** 42118.
- [2] V.I. Arnol'd **and** A. Avez. Ergodic problems of classical mechanics. The Mathematical physics monograph series, 1968.
- [3] M. V. Berry. “Semi-Classical Mechanics in Phase Space: A Study of Wigner's Function”. **in:** Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A 287 (1977), **pages** 237–271.
- [4] W. Case. “Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians”. **in:** American J. Physics 76 (2008), **pages** 937–946.
- [5] C. Chester, B. Friedman **and** F. Ursell. “An extension of the method of steepest descents”. **in:** Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. 53.3 (1957), **pages** 599–611.
- [6] Jesús Clemente Gallardo. “Geometric Methods in Deformation Quantization”. phdthesis. Universidad de Zaragoza, 1999.
- [7] Andrew Gleason. “Measures on the Closed Subspaces of a Hilbert Space”. **in:** J. Math. Mech. 6 (4 1957), **pages** 885–893.
- [8] Herbert Goldstein. Classical Mechanics 3rd Edition. Addison-Wesley, 2001.
- [9] Raymond Kapral. “Mixed quantum-classical dynamics”. **in:** Journal of Chemical Physics 110.18 (1999), **pages** 8919–8929.
- [10] J. H. Van Vleck. “The Correspondence Principle in the Statistical Interpretation of Quantum Mechanics”. **in:** National Academy of Sciences 14.2 (1928), **pages** 177–188.
- [11] J. Weinbub **and** D. K. Ferry. “Recent advances in Wigner function approaches”. **in:** Applied Physics Reviews 5.4 (2018).
- [12] H. Weyl. “Quantenmechanik und Gruppentheorie”. **in:** Zeitschrift für Physik 46.1-2 (1927), **pages** 1–46.
- [13] E. Wigner. “On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium”. **in:** Phys. Rev. 40 (5 1932), **pages** 749–759.