



TRABAJO DE FIN DE GRADO – GRADO EN FÍSICA

DINÁMICAS NO LINEALES EN SISTEMAS HÍBRIDOS CLÁSICO-CUÁNTICOS

Directores:

Jesús Clemente Gallardo

Autor:

Acher Alías Saura

Curso 2023–2024

Abstract

La implementación de una entropía que sea consistente con la dinámica de Ehrenfest de los sistemas híbridos ha sido un gran problema al adoptar un acercamiento estadístico de los mismos. En este trabajo de fin de grado se propone una alternativa a lo visto hasta ahora que parece solucionar estos obstáculos, y se elaboran simulaciones computacionales para defender dicha hipótesis en un ejemplo particular.

Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría agradecer al director de mi Trabajo de Fin de Grado, Jesús Clemente Gallardo, tanto por generarme una creciente curiosidad por la física cuántica en los primeros años del grado como por su pasión y dedicación en la tutorización de este proyecto. Mencionar también a Carlos Bouthelier, cuya ayuda y trabajos anteriores en la materia me han servido de excelente guía para la construcción del código. Además, veo imposible no nombrar a aquellos amigos y compañeros de la universidad que me han dado su apoyo a lo largo de esta odisea. A Adrián, Silvia y Rocío, por aguantar los dilemas que me surgieron durante la realización de este trabajo y darme su inestimable consejo. A Iñigo, Lucas, Mario, Casinos, Mayayo e Irene por los días de biblioteca y café. Y a todo mi grupo de Villanueva por esas partidas nocturnas que me ayudaban a desconectar. Por último, agradecer a mi familia por interesarse por mi trabajo y prestarme su apoyo durante este año tan movido.

Muchas gracias.

Índice general

1. Introducción	1
2. Dinámica de Ehrenfest	3
2.1. Sistemas Híbridos	4
2.2. Observables híbridos	5
2.3. Corchete de Poisson Híbrido	6
2.4. Acercamiento estadístico a un sistema de Ehrenfest	6
3. Liouville y la dinámica estadística	9
3.1. La necesidad de momentos de mayor orden	11
3.2. Dinámica de los momentos	13
4. Ejemplo particular y aplicación	17
5. Conclusiones	24
A. Dinámica de Hamilton	1
A.1. Espacio de fases clásico	1
A.2. Variedades simplécticas y mecánica geométrica	2
A.3. Sistemas cuánticos	4
A.4. Formulación estadística en dinámica Hamiltoniana	6
B. Notas adicionales sobre la dinámica de Ehrenfest	8
B.1. Demostración de ortogonalidad	8
B.2. Expansión en serie WKB	9
C. Datos adicionales del ejemplo particular	10
C.1. Espacio de fases clásico computacional	10
C.2. Caso 1	11
C.2.1. Entropía de Rényi con parámetro $\alpha = 2$	11
C.2.2. Entropía de Rényi con parámetro $\alpha = \frac{7}{4}$	13
C.2.3. Entropía de Rényi con parámetro $\alpha = \frac{3}{2}$	15

C.2.4. Entropía de Rényi con parámetro $\alpha = \frac{5}{4}$	18
C.2.5. Aproximación lineal de la entropía de Von Neumann	20
C.3. Caso 2	23
C.4. Caso 3	26
D. Código de la simulación computacional	30

Capítulo 1

Introducción

Cuando se plantea el estudio de sistemas compuestos por elementos microscópicos, la mecánica cuántica ha proporcionado la solución a múltiples cuestiones fruto del comportamiento de las partículas a estas escalas. La cuestión reside en que considerar un modelo puramente cuántico aumenta la complejidad del problema hasta límites inabarcables, y es esta la motivación de encontrar modelos que sean más eficientes. Cuando se imponen ciertas condiciones sobre el sistema tales como grandes diferencias de masas, velocidades o escalas de tiempo, se abre la puerta a un nuevo paradigma más manejable.

De todas formas, la evolución de estos sistemas se ve reflejada tanto en el ámbito macroscópico como en el microscópico, por lo que la importancia de encontrar un formalismo que permita combinar ambos planos del sistema resulta crucial. Así se introduce el concepto de los sistemas híbridos clásico-cuánticos (*Sistemas Híbridos, SH*), los cuales contemplan un espacio de fases híbrido donde los grados de libertad clásicos y cuánticos evolucionan de manera acoplada.

Al encarar problemas prácticos que requieren la utilización de dichos *SH*, como en el campo de la simulación de sistemas moleculares, resulta clave el enfoque estadístico y su implementación en los *SH* [1] [2]. Se contempla una densidad de probabilidad híbrida que definirá la dinámica de los *SH*, la cual funciona perfectamente con la dinámica de Ehrenfest pero es incompatible con la formulación de una entropía termodinámica [3]. La solución propuesta en [4] para lidiar con este gran inconveniente sería la de extraer los momentos estadísticos cuánticos de la distribución híbrida, los cuales vienen descritos por operadores del tipo matrices densidad [4] [5].

$$F \iff \{\hat{\rho}_0, \hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2, \dots\}$$

De esta forma, se mantiene la idea de dominar la mecánica con una ecuación maestra, salvo que en este caso se traduce en una familia de ecuaciones, una para cada momento. El problema a superar es que dichos momentos dependen de los momentos de órdenes superiores, así que se presenta el dilema sobre como afrontar esta familia de infinitos elementos. La solución elegida consistirá en truncar la familia de momentos y aplicar el formalismo de máxima entropía para hallar aquellos estados que maximicen la desinformación del sistema. Es importante no confundir esta entropía con la mencionada en el párrafo anterior, ya que en este caso se hace alusión a este término como una medida de la desinformación que presenta un estado cuántico con múltiples grados de libertad, no a la entropía termodinámica del sistema.

En [4] se propone este formalismo empleando, por sencillez, la entropía de Von Neumann

linealizada. Lo que propone este trabajo es hacer uso de la entropía de Rényi como modelo de la desinformación de la parte cuántica del sistema en lugar de la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann y comprobar si estas dos opciones difieren o no entre sí. En el caso en el que la dinámica evolucionase de forma similar considerando ambas entropías significaría que cualquier desinformación bien definida podría tomarse como válida para el estudio de los sistemas híbridos, lo que facilitaría en gran medida esta tarea al permitir escoger la más conveniente. En el caso contrario, si la dinámica difiere notablemente, daría pie a nuevas vías de estudio sobre la razón subyacente en esta diferencia, y lo que implica, a nivel físico, la elección de los diferentes modelos de desinformación.

En el capítulo 2 de este trabajo, se abordará la teoría subyacente de los sistemas híbridos y las sutilezas del método propuesto. Se hará hincapié en las bases de la dinámica de Ehrenfest y su implementación en la formulación geométrica. Además se introducirá el formalismo estadístico y su principal notación.

Ya en el capítulo 3 se entra de lleno en la formulación estadística del problema y en la necesidad de trabajar con los momentos para poder combinar las nociones de una entropía consistente con la dinámica de Ehrenfest. Esto conlleva una explicación de la dinámica de los mencionados momentos y se sienta ya por completo el marco teórico del ejemplo a tratar.

Por último, el capítulo 4 trata enteramente el ejemplo particular introducido en [4], en el cual se desarrollan las ecuaciones extraídas en el capítulo anterior y se expanden al plantear la entropía de Rényi como desinformación del sistema. Se llegan a estudiar diversos modelos de Rényi y estos se comparan con la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann que se había propuesto inicialmente.

Como conclusiones, en el capítulo 5 se trata en resumen lo que ha sido este proyecto y se exponen las consecuencias de los resultados obtenidos. En adición, se han dejado varios apéndices al final del documento donde se desarrolla más en profundidad el marco teórico, se recogen todas las imágenes de los resultados que no han podido exponerse y el código de las simulaciones realizadas para su obtención.

Capítulo 2

Dinámica de Ehrenfest

Cuando tratamos de describir la evolución en el tiempo de un sistema cuántico, la ecuación de Schrödinger nos da la información necesaria sobre como cambia un estado concreto Ψ cuando el sistema viene descrito por un hamiltoniano, H .

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (2.0.1)$$

Al lidiar con sistemas compuestos por múltiples partículas, la complejidad del problema aumenta notablemente, por lo que es necesario tomar ciertas aproximaciones que nos permitan la resolución del mismo. A grandes rasgos, el modelo de Ehrenfest se basa en la distinción del sistema en dos conjuntos, el nuclear, conformado por nucleones y electrones muy ligados de capas internas, y electrónico, constituido por unos pocos electrones externos. De este modo separaremos tanto el estado general como el hamiltoniano de la forma que se expresa a continuación:

$$|\Psi\rangle = |\Psi_N\rangle \otimes |\Psi_e\rangle ; \quad \hat{H} = \hat{H}_N + \hat{H}_e \quad (2.0.2)$$

La primera aproximación que se impondrá será en relación a la separabilidad de la función de onda híbrida, tal y como se expresa en la ecuación 2.0.2. Esta aproximación se hace bajo la asunción de que la dispersión del paquete de onda asociado al núcleo es muy pequeña [6].

Siendo $\epsilon(t)$ la dispersión en el tiempo, esta tendrá una cota superior y será de un valor despreciable, $\epsilon(t) \leq \varepsilon \ll 1$, lo que asegura que la función de onda nuclear se asemeja a una δ centrada en la posición del núcleo. De manera más específica, esta separación de la función de onda lleva a una perturbación del orden $\mathcal{O}(\frac{\varepsilon}{L})$, donde L corresponde a la longitud característica del sistema molecular.

La separabilidad alcanzada tras imponer la primera aproximación transforma la ecuación de Schrödinger para la función híbrida como un sistema de dos ecuaciones, una para el sistema electrónico, y otra para el nuclear.

$$\dot{\Psi}_e(x, t) = H_e(x, q)\Psi_e(x, t) \quad (2.0.3)$$

$$\dot{\Psi}_N(q, t) = H_N(x, q)\Psi_N(q, t) \quad (2.0.4)$$

Se puede demostrar de forma sencilla la ortonormalidad de $\Psi_{e,N}(x, t)$ con respecto de $\dot{\Psi}_{e,N}(x, t)$, esta se deja en la sección del apéndice B.1.

Ha de tenerse en cuenta que este razonamiento es posible únicamente asumiendo separabilidad de la función molecular en dos funciones de onda normalizadas, lo cual es factible como condición inicial, $\langle \Psi_e | \Psi_e \rangle (t = 0) = \langle \Psi_N | \Psi_N \rangle (t = 0) = 1$.

El problema es que la separabilidad no se mantiene en el tiempo de forma general para cualquier paquete de ondas, de forma que se tiende a aproximar la función de onda nuclear a una gaussiana por comodidad, aunque esta se vaya deformando a medida que pasa el tiempo. De esta forma sí que se puede considerar que se cumplen las ecuaciones 2.0.3 y 2.0.4 para todo instante.

$$\Psi_N(q, t) = \frac{1}{(\epsilon(t)\sqrt{2\pi})^{\frac{d}{2}}} \cdot \exp\left(-\frac{(q - \langle q \rangle)^2}{4\epsilon(t)^2}\right) \exp\left(i\frac{\langle P \rangle}{\hbar}q\right) \quad (2.0.5)$$

La segunda aproximación corresponde a la búsqueda del límite clásico en el subsistema nuclear. Se supondrá, con bastante acierto, que la masa del conjunto nuclear será mucho mayor que la del conjunto electrónico, $M \gg m$. Esto permitirá someter al núcleo a un tratamiento clásico mientras se mantiene el formalismo cuántico para los electrones. [6]

El tratamiento que recibe la función de onda nuclear será la de expresarla en una expansión de WKB [6]. Este consiste en desarrollar la acción como una serie de potencias de la constante de Planck y truncar en un término de interés para lo que se trata de hallar. El procedimiento más detallado puede hallarse en el apéndice B.2.

De esta forma, se cuenta con la ecuación de Schrödinger para la función de onda de los electrones externos:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi_e(x, t) = H_e(x, q) \Psi_e(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 + V(x, q) \right] \Psi_e(x, t) \quad (2.0.6)$$

Mientras que para el núcleo se contemplan las conocidas soluciones clásicas de las ecuaciones de Hamilton-Jacobi:

$$\dot{q}_k = \frac{p_k}{M} \quad (2.0.7)$$

$$\dot{p}_k = -\langle \Psi_e | \nabla_{q_k} V(x, q) | \Psi_e \rangle \quad (2.0.8)$$

La expresión de la ecuación 2.0.8 corresponde al gradiente de un potencial producto de haber realizado el valor promedio del potencial electrónico, $V(x, q)$, con respecto al estado de los electrones, $U(x, q, t) = \langle \Psi_e | V(x, q) | \Psi_e \rangle$. Cabe destacar que el error asumido bajo las dos aproximaciones previamente mencionadas será del orden $\mathcal{O}\left[\left(\frac{\epsilon}{L}\right)^2 + \sqrt{\frac{m}{M}}\right]$, por lo que la efectividad de las aproximaciones aumentará al considerar sistemas moleculares de mayores dimensiones.

2.1. Sistemas Híbridos

Una vez se conocen los sistemas clásicos y cuánticos así como las características de la dinámica hamiltoniana en los mismos (expuestas en el anexo A), no queda más que combinar estos modelos para construir un sistema híbrido bien definido[7].

Para empezar, es necesario construir el espacio de fases híbrido, lo cual seguirá un razonamiento intuitivo en perspectiva con los apartados anteriores. Dada la separabilidad de los estados nucleares y electrónicos que se ha asumido, se considerará una variedad diferenciable híbrida, M_H , la cual se definirá como el producto cartesiano entre una variedad clásica M_C y una variedad cuántica, M_Q .

$$M_H = M_C \times M_Q. \quad (2.1.1)$$

Ambas variedades clásica y cuántica siendo variedades simplécticas tal y como se ha desarrollado en A.2. De esta forma, es posible recuperar los espacios de fases separados mediante las aplicaciones de proyección.

$$\pi_C : M_H = M_C \times M_Q \longrightarrow M_C \quad (2.1.2)$$

$$\pi_Q : M_H = M_C \times M_Q \longrightarrow M_Q \quad (2.1.3)$$

Debida a esta propiedad de la variedad híbrida tal y como ha sido definida, es posible construir una forma simpléctica híbrida como combinación lineal de las formas simplécticas de las variedades clásica y cuántica separadas tras aplicarles los respectivos *pullbacks*.

$$\omega_H = \pi_C^* \omega_C + \pi_Q^* \omega_Q \quad (2.1.4)$$

Por último, destacar un cambio de notación para evitar confusiones más adelante. Visto ya el tratamiento formal análogo que tienen las coordenadas de M_Q y las canónicas y sus momentos de M_C , se empleará la siguiente notación:

- Grados de libertad clásicos en $M_C \implies \xi \equiv (Q_k, P_k) \in M_C$
- Grados de libertad cuánticos en $M_Q \implies (q_i, p_i) \in M_Q$

2.2. Observables híbridos

Ya en las ecuaciones de Ehrenfest se aprecia el acoplamiento entre los grados de libertad clásicos y cuánticos, por consiguiente, carece de sentido definir un único observable sobre un sistema híbrido. En este caso se construye una familia de dichos observadores, indexada por el punto en el espacio de fases clásico pero que actúa sobre los estados cuánticos.

$$\mathcal{O} = \{\hat{O}(\xi) \in \text{Lin}(\mathcal{H}) \mid \forall \xi \in M_C\} \quad (2.2.1)$$

Dando así lugar a una familia de funciones observables en la cual cada elemento queda asociado a su respectivo observable en \mathcal{F} .

$$\mathcal{F} = \{f_O = \langle \Psi | \hat{O}(\xi) | \Psi \rangle \in C^\infty(M_H) \mid \hat{O}(\xi) \in \text{Lin}(\mathcal{H}) \mid \forall \xi \in M_C\} \quad (2.2.2)$$

Más adelante se abordará la forma de determinar eficientemente este espacio de Hilbert \mathcal{H} .

2.3. Corchete de Poisson Híbrido

La herramienta que se empleará para codificar la dinámica en apartados siguientes será el corchete de Poisson definido sobre M_H . Tal y como se muestra en los apartados del apéndice A.2 y A.3 respectivamente, ambas variedades M_C y M_Q están dotadas de su propio corchete de Poisson, por lo que resulta lógico pensar que la construcción del caso híbrido será la suma de los anteriores.

$$\{\cdot, \cdot\}_H = \{\cdot, \cdot\}_C + \hbar^{-1} \{\cdot, \cdot\}_Q \quad (2.3.1)$$

Al actuar sobre dos funciones observables híbridas cualesquiera, $f_{\hat{A}(\xi)}$ y $f_{\hat{B}(\xi)}$, cada corchete que conforma el híbrido actuará consecuentemente sobre los grados de libertad clásicos y cuánticos.

$$\{f_{\hat{A}(\xi)}, f_{\hat{B}(\xi)}\}_H = \{f_{\hat{A}(\xi)}, f_{\hat{B}(\xi)}\}_C + \hbar^{-1} \{f_{\hat{A}(\xi)}, f_{\hat{B}(\xi)}\}_Q \quad (2.3.2)$$

Donde,

$$\{f_{\hat{A}(\xi)}, f_{\hat{B}(\xi)}\}_C = \sum_k \left(f_{\partial_{Q_k} \hat{A}(Q_k, P_k)} f_{\partial_{P_k} \hat{B}(Q_k, P_k)} - f_{\partial_{Q_k} \hat{B}(Q_k, P_k)} f_{\partial_{P_k} \hat{A}(Q_k, P_k)} \right) \quad (2.3.3)$$

$$\{f_{\hat{A}(\xi)}, f_{\hat{B}(\xi)}\}_Q = f_i[\hat{B}(\xi), \hat{A}(\xi)] \quad (2.3.4)$$

Es importante notar que $\{\cdot, \cdot\}_C$ resulta en una dependencia cuártica con los grados de libertad cuánticos, mientras que $\{\cdot, \cdot\}_Q$ la mantiene cuadrática. Es por esto que es necesario extender el álgebra para que esta sea cerrada al aplicar repetidamente $\{\cdot, \cdot\}_H$. A esta extensión la denotaremos como \mathcal{O}' .

Por último, de la misma forma que se contemplaba un campo vectorial hamiltoniano que dicta la evolución temporal de los observables en los marcos clásico y cuántico, este también aparece en el formalismo híbrido.

$$X_H = \{\cdot, f_{\hat{H}(\xi)}\} \implies \dot{f} = X_H f = \{f, f_{\hat{H}(\xi)}\} \quad (2.3.5)$$

Por la linealidad de la construcción, es sencillo ver que, en efecto, la forma simpléctica híbrida define la ecuación de la dinámica de Hamilton en la variedad híbrida.

$$i_{X_{f_H}} \omega_H = df_H \quad (2.3.6)$$

Como ya se ha mencionado, las bases de esta sección se recogen en las secciones del apéndice A.2 y A.3.

2.4. Acercamiento estadístico a un sistema de Ehrenfest

De la misma forma que en la que se estudia en el apartado A.4 del apéndice, a continuación se explorará la forma en la que puede emplearse un tratamiento estadístico para abordar un

sistema caracterizado por una dinámica de Ehrenfest en vez de puramente clásica o cuántica.

En primer lugar, considerando el espacio de fases híbrido, $M_H = M_C \times M_Q$, será necesario definir una medida híbrida. Para ello, y gracias a la estructura con la que M_H ha sido definido, se tendrá que la medida híbrida será de la siguiente forma:

$$d\mu_H = d\mu_C d\mu_Q = d\vec{Q} d\vec{P} d\vec{q} d\vec{p} \quad (2.4.1)$$

En consecuencia, una vez especificada la medida del espacio híbrido, el sistema estadístico requiere de una función de distribución híbrida para que este quede bien definido.

$$F_{QC} \in \mathcal{O} \mid \int_{M_H} d\mu_H F_{QC}(\vec{Q}, \vec{P}, \vec{q}, \vec{p}) = 1 \quad y \quad F_{QC}(\vec{Q}, \vec{P}, \vec{q}, \vec{p}) \geq 0 \quad \forall (\vec{Q}, \vec{P}) \in M_C ; (\vec{q}, \vec{p}) \in M_Q \quad (2.4.2)$$

Siguiendo un procedimiento similar al caso hamiltoniano, se contemplan ahora los observables híbridos. Dada la naturaleza de dichos observables, siendo estos familias de observables cuánticos indexados por los puntos en el espacio de fases clásico, es posible definir un operador densidad de probabilidad sobre el espacio cuántico. Este operador también correspondería al primer momento cuántico de una distribución condicionada, pero eso se abordará en más detalle en capítulos posteriores.

$$\hat{\rho}(\vec{Q}, \vec{P}) = \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\vec{Q}, \vec{P}, \vec{q}, \vec{p}) |\Psi(\vec{q}, \vec{p})\rangle \langle \Psi(\vec{q}, \vec{p})| \quad (2.4.3)$$

Notar que la forma de construir un valor esperado cuántico de la familia de observables será como la traza del producto entre el operador densidad y el propio observable.

$$\langle \hat{O}(\vec{Q}, \vec{P}) \rangle_Q = \text{Tr} \left(\hat{\rho}(\vec{Q}, \vec{P}) \hat{O}(\vec{Q}, \vec{P}) \right) = \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\vec{Q}, \vec{P}, \vec{q}, \vec{p}) f_{\hat{O}(\vec{Q}, \vec{P})} \quad (2.4.4)$$

Dejando así la expresión para el valor esperado híbrido como:

$$\langle \hat{O} \rangle = \int_{M_C} d\mu_C \langle \hat{O}(\vec{Q}, \vec{P}) \rangle_Q = \int_{M_C} d\mu_C \text{Tr} \left(\hat{\rho}(\vec{Q}, \vec{P}) \hat{O}(\vec{Q}, \vec{P}) \right) \quad (2.4.5)$$

De nuevo, la derivada temporal de la función de distribución híbrida será de la forma:

$$\dot{F}_{QC} = \{f_{\hat{H}}, F_{QC}\}_H \quad (2.4.6)$$

Como anotación final de este capítulo, es posible realizar todo el desarrollo de la dinámica híbrida en formulación de mecánica geométrica utilizando proyectores en vez de estados en cuanto a los grados de libertad cuánticos se refiere. La demostración es una ardua tarea y de una fineza matemática que se escapa de los objetivos de este trabajo, y es por dicho motivo que se deja como parte de la bibliografía [7].

Lo que sí es posible considerar es la formulación análoga del modelo de Ehrenfest en términos de proyectores. La cuestión es definir una aplicación entre el espacio de estados cuántico, M_Q , y el espacio de proyectores de rango uno, $\mathcal{D}^1(\mathcal{H})$, $\mu : M_Q \rightarrow \mathcal{D}^1(\mathcal{H})$.

La finalidad de esta aplicación es la de pasar de considerar un rayo de infinitos estados a un solo elemento del espacio proyectivo. Este punto queda definido como:

$$|\Psi\rangle \in M_Q \implies \mu(\Psi) = \rho_\Psi = \frac{|\Psi\rangle \langle \Psi|}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.4.7)$$

El cambio formal que se presenta en las ecuaciones de Ehrenfest, ya definidas con anterioridad (ecuaciones 2.0.6, 2.0.7 y 2.0.8), se verá reflejado en el cálculo del valor esperado del hamiltoniano electrónico y en que el estado del electrón pasa de estar descrito por la ecuación de Schrödinger a la de von Neumann. Por consiguiente, las ecuaciones de Ehrenfest expresadas en términos de proyectores quedan de la siguiente forma:

$$i\hbar\dot{\rho}_\Psi = [H_e(x, q), \rho_\Psi] \quad (2.4.8)$$

$$\dot{q}_k = \frac{p_k}{M} \quad (2.4.9)$$

$$\dot{p}_k = \nabla_{q_k} \text{Tr} (H_e(x, q) \rho_\Psi) \quad (2.4.10)$$

Resulta de vital importancia remarcar cómo la evolución de tanto la parte cuántica como de la clásica dependen de los grados cuánticos y clásicos, es decir, ambos subsistemas evolucionan de forma acoplada.

Expresada en términos de los proyectores, ρ_Ψ , la formulación de la mecánica de Ehrenfest estadística es completamente análoga, aunque los grados de libertad cuánticos se parametrizan con los proyectores. Así, la densidad de probabilidad híbrida será una función de la forma $F_{QC}(\vec{Q}, \vec{P}, \rho_\Psi)$.

Capítulo 3

Liouville y la dinámica estadística

El objetivo de este capítulo es profundizar en el tratamiento estadístico aplicado a un sistema híbrido y estudiar como se traducen las ecuaciones de la dinámica de Ehrenfest cuando esta se extrae a la función de distribución. Además será relevante más adelante considerar la desinformación inherente del sistema estadístico híbrido para aplicar el formalismo de máxima entropía.

Otro punto a considerar es el hecho que, de ahora en adelante, resultará más conveniente el uso de la formulación de proyectores para lidiar con el consecuente subsistema cuántico. De esta forma, un punto en la variedad híbrida vendrá dado por dos coordenadas, $(\xi, \rho_\Psi) \in M_H$, el punto en el espacio de fases clásico, $\xi \in M_C$, y el estado cuántico, $\rho_\Psi \in M_Q$.

Como preludio, y a riesgo de resultar repetitivo, es importante insistir en la noción de observable híbrido y en su función asociada. Como se ha mencionado anteriormente, para las funciones de observables se escoge el valor esperado sobre el estado cuántico evaluado para cualquier punto clásico. Con la notación establecida en el párrafo anterior, se tendrá un observable $\hat{O}(\xi) \in \mathcal{O}$ con su función asociada $f_{\hat{O}(\xi)} \in \mathcal{F}$ descrita por la siguiente ecuación.

$$f_{\hat{O}(\xi)}(\hat{\rho}_\Psi) = \text{Tr} \left(\hat{\rho}_\Psi \hat{O}(\xi) \right) \quad (3.0.1)$$

A continuación, si se requiere calcular el valor esperado de dicha magnitud, se cuenta con la medida de la variedad híbrida $d\mu_H \equiv d\mu_{QC} = d\mu_Q d\mu_C$ y la función de distribución $F_{QC}(\xi, \rho_\Psi)$ [1]. En consecuencia, el valor estimado de $\hat{O}(\xi)$ se representa como:

$$\langle \hat{O}(\xi) \rangle = \int_{M_C \times M_Q} d\mu_{QC} F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) f_{\hat{O}(\xi)} \quad (3.0.2)$$

A raíz de esta definición, tiene cabida la introducción del primer momento cuántico de la distribución híbrida como familia de operadores que caracteriza por completo el valor esperado de los operadores. Este primer momento viene dado por:

$$\hat{\rho}(\xi) = \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \rho_\Psi \quad (3.0.3)$$

A partir de esta definición es sencillo ver que no es necesario considerar órdenes superiores en lo relativo a los momentos cuánticos cuando se trata de calcular el valor esperado de un observable de la forma 3.0.1 [4]. Sustituyendo 3.0.1 en la ecuación 3.0.2:

$$\langle \hat{O}(\xi) \rangle = \int_{M_C} d\mu_C \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \text{Tr}(\hat{\rho}_\Psi \hat{O}(\xi)) = \int_{M_C} d\mu_C \text{Tr} \left(\int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \hat{\rho}_\Psi \hat{O}(\xi) \right) \quad (3.0.4)$$

Implementando la definición de 3.0.3 se obtiene la expresión del valor esperado del observable en términos del primer momento cuántico.

$$\langle \hat{O}(\xi) \rangle = \int_{M_C} d\mu_C \text{Tr}(\hat{\rho}(\xi) \hat{O}(\xi)) \quad (3.0.5)$$

Separándose del desarrollo del capítulo anterior, es posible considerar la distribución híbrida, bajo un prisma puramente matemático, como una distribución bivariada. Esta nueva formulación da lugar a dos nuevos conceptos:

- Distribución marginal de probabilidad
- Distribución condicionada de probabilidad

Durante este trabajo se tomará como marginal una distribución clásica y como condicionada una distribución cuántica pues es el caso más natural físicamente dados los tiempos naturales de unos grados de libertad y otros (mucho más rápidos en el caso cuántico que en el clásico), pero cabe remarcar que matemáticamente la elección inversa es también posible. Se define la distribución marginal clásica al integrar la distribución conjunta híbrida sobre el espacio cuántico.

$$F_C(\xi) = \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \quad (3.0.6)$$

Dado que las coordenadas en el espacio proyectivo, ρ_Ψ , corresponden a estados cuánticos, no es difícil probar que la traza del primer momento cuántico corresponde a la distribución marginal clásica.

$$\text{Tr}(\hat{\rho}(\xi)) = \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \underbrace{\text{Tr}(\rho_\Psi)}_{=1} = \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) = \hat{\rho}^{\otimes 0}(\xi) = F_C(\xi) \quad (3.0.7)$$

Para la distribución condicionada cuántica, dado un punto fijo del espacio de fases clásico, se tendrá una distribución condicionada cuántica $F_Q(\rho_\Psi | \xi)$. Por definición de la distribución bivariada, ha de cumplirse el siguiente resultado.

$$F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) = F_C(\xi) F_Q(\rho_\Psi | \xi) \quad (3.0.8)$$

Al plantear la condición de normalización, será posible realizar una separación en la función de distribución híbrida siguiendo 3.0.8. Se introduce la traza de la variable cuántica, $\text{Tr}(\rho_\Psi)$, por conveniencia para el desarrollo.

$$\int_{M_C} d\mu_C F_C(\xi) \int_{M_Q} d\mu_Q F_Q(\rho_\Psi | \xi) = \int_{M_C} d\mu_C F_C(\xi) \int_{M_Q} d\mu_Q F_Q(\rho_\Psi | \xi) \underbrace{\text{Tr}(\rho_\Psi)}_{=1} = 1 \quad (3.0.9)$$

Extrayendo la traza a toda la integral sobre el espacio de estados cuántico:

$$\int_{M_C} d\mu_C \text{Tr} \left(F_C(\xi) \int_{M_Q} d\mu_Q F_Q(\rho_\Psi | \xi) \rho_\Psi \right) = 1 \quad (3.0.10)$$

El teorema de Gleason [8] afirma que existe un operador densidad, $\hat{\rho}_\xi$, capaz de determinar el valor esperado de cualquier observable del sistema cuántico, por lo que en este marco será conveniente trabajar con dicho operador densidad ya que representa un estado puramente cuántico. A partir de la ecuación 3.0.10 se puede definir este operador densidad como:

$$\hat{\rho}_\xi = \int_{M_Q} d\mu_Q F_Q(\rho_\Psi | \xi) \rho_\Psi, \quad (3.0.11)$$

Pudiéndose interpretar $\hat{\rho}_\xi$ como el primer momento cuántico de la distribución condicionada.

Por consiguiente, el primer momento cuántico $\hat{\rho}(\xi)$, que no era un estado como tal ya que no quedaba normalizado, queda definido mediante el producto de la distribución marginal clásica y un operador densidad cuántico bien definido.

$$\hat{\rho}(\xi) = F_C(\xi) \hat{\rho}_\xi \quad (3.0.12)$$

Desde los primeros estudios sobre sistemas híbridos, el mecanismo más utilizado para referirse a un estado híbrido ha sido el primer momento cuántico de la distribución híbrida, $\hat{\rho}(\xi)$, ya que recoge la información necesaria sobre un estado cuántico y su peso global dictaminado por la función de distribución híbrida. Además, se ha comprobado que es el único momento necesario para calcular el valor esperado de un observable híbrido. Aún así, surge un problema cuando se trata de describir la dinámica del sistema a partir de $\hat{\rho}(\xi)$, y esto se debe a que este deja de ser suficiente para representar la evolución temporal, como veremos a continuación.

Notar que, debido a la naturaleza de la construcción de la distribución condicionada, el requerimiento de momentos de mayor orden puede trasladarse de la distribución total F_{QC} a la condicionada $F_Q(\rho_\Psi | \xi)$.

$$\hat{\rho}^{\otimes k}(\xi) \iff \hat{\rho}_\xi^{\otimes k} \quad (3.0.13)$$

Nótese que esto supone que, de forma efectiva, se está considerando una matriz densidad generalizada sobre el espacio de Hilbert $\mathcal{H} \overbrace{\otimes \cdots \otimes \mathcal{H}}^k$.

3.1. La necesidad de momentos de mayor orden

Ya se ha hecho mención del papel del corchete de Poisson híbrido en la evolución de las funciones observables (Ec. 2.3.5), pero existen ciertas sutilezas en la formulación de la dinámica de los observables cuando se desarrolla en el marco de los proyectores. Si se considera una función observable dependiente del tiempo $f(\xi, \rho_\Psi; t) = f(\xi(t), \rho_\Psi(t))$, es evidente que esta presenta una dependencia lineal con los grados de libertad cuánticos (Ec. 3.0.1). Por consiguiente, al evaluar en

el corchete híbrido se tendrá la consiguiente progresión ascendente en lo relativo a la dependencia con los grados de libertad cuánticos. Dada una función observable híbrido $C_0(\xi, \rho_\Psi; t)$, se le aplica el corchete híbrido reiteradamente:

$$\begin{aligned} C_1 &= \{f, C_0\}_H = \underbrace{\{f, C_0\}_C}_{\sim \text{Tr}(\rho_\Psi^{\otimes 2} \cdot)} + \hbar^{-1} \underbrace{\{f, C_0\}_Q}_{\sim \text{Tr}(\rho_\Psi \cdot)} \\ C_2 &= \{f, C_1\}_H = \underbrace{\{f, \{f, C_0\}_C\}_C}_{\sim \text{Tr}(\rho_\Psi^{\otimes 3} \cdot)} + \hbar^{-1} \underbrace{\{f, \{f, C_0\}_Q\}_Q}_{\sim \text{Tr}(\rho_\Psi^{\otimes 2} \cdot)} \\ C_3 &\sim \text{Tr}(\rho_\Psi^{\otimes 4} \cdot) + \text{Tr}(\rho_\Psi^{\otimes 3} \cdot) \\ C_4 &\sim \text{Tr}(\rho_\Psi^{\otimes 5} \cdot) + \text{Tr}(\rho_\Psi^{\otimes 4} \cdot) \\ &\vdots \end{aligned}$$

En consecuencia, al aplicar el corchete de Poisson, la parte correspondiente al corchete clásico (Ec. 2.3.3) aumenta progresivamente el orden de la dependencia con los grados cuánticos. Debido a esto, era necesario considerar una extensión del álgebra para que esta fuese cerrada. Con los proyectores el orden de esta dependencia abarca todas las potencias de ρ_Ψ , por lo que al extender el álgebra se han de considerar todas las funciones $f \in C^\infty(M_H)$.

Dejando esto de lado, al proponer la expresión de la evolución temporal del valor esperado de un observable arbitrario, esta queda:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{O}(\xi) \rangle(t) &= \int_{M_C \times M_Q} d\mu_{QC} F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \frac{d}{dt} f_{\hat{O}(\xi)}(t) = \int_{M_C \times M_Q} d\mu_{QC} F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \{f_{\hat{O}(\xi)}, f_{\hat{H}(\xi)}\}_H \\ &= \int_{M_C \times M_Q} d\mu_{QC} F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \{f_{\hat{O}(\xi)}, f_{\hat{H}(\xi)}\}_C + \hbar^{-1} \int_{M_C \times M_Q} d\mu_{QC} F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \{f_{\hat{O}(\xi)}, f_{\hat{H}(\xi)}\}_Q \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

Donde cada sumando corresponde a los siguientes valores esperados:

$$\int_{M_C \times M_Q} d\mu_{QC} F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \{f_{\hat{O}(\xi)}, f_{\hat{H}(\xi)}\}_C = \langle f_{\partial_{Q_k} \hat{O}} f_{\partial_{P_k} \hat{H}} \rangle - \langle f_{\partial_{Q_k} \hat{H}} f_{\partial_{P_k} \hat{O}} \rangle \quad (3.1.2)$$

$$\int_{M_C \times M_Q} d\mu_{QC} F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \{f_{\hat{O}(\xi)}, f_{\hat{H}(\xi)}\}_Q = \langle f_{i[\hat{H}, \hat{O}](\xi)} \rangle \quad (3.1.3)$$

El término del conmutador, $f_{i[\hat{H}, \hat{O}](\xi)}$, se mantiene dentro del álgebra:

$$\langle f_{i[\hat{H}, \hat{O}](\xi)} \rangle = \int_{M_C} d\mu_C \text{Tr} \left(i \hat{\rho}(\xi) [\hat{H}(\xi), \hat{O}(\xi)] \right) = \int_{M_C} d\mu_C \text{Tr} \left(i [\hat{\rho}(\xi), \hat{H}(\xi)] \hat{O}(\xi) \right) \quad (3.1.4)$$

Pero es en los términos clásicos donde se aprecia la aparición de momentos cuánticos de órdenes superiores:

$$\begin{aligned}
\left\langle f_{\partial_{Q_k}\hat{O}} f_{\partial_{P_k}\hat{H}} \right\rangle &= \int_{M_C} d\mu_C \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \text{Tr} \left(\hat{\rho}_\Psi \partial_{Q_k} \hat{O}(\xi) \right) \text{Tr} \left(\hat{\rho}_\Psi \partial_{P_k} \hat{H}(\xi) \right) \\
&= \int_{M_C} d\mu_C \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \text{Tr} \left(\hat{\rho}_\Psi \otimes \hat{\rho}_\Psi \partial_{Q_k} \hat{O}(\xi) \otimes \partial_{P_k} \hat{H}(\xi) \right) \\
&= \int_{M_C} d\mu_C \text{Tr} \left(\left(\int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \hat{\rho}_\Psi \otimes \hat{\rho}_\Psi \right) \partial_{Q_k} \hat{O}(\xi) \otimes \partial_{P_k} \hat{H}(\xi) \right) \\
&= \int_{M_C} d\mu_C \text{Tr} \left(\hat{\rho}^{\otimes 2}(\xi) \partial_{Q_k} \hat{O}(\xi) \otimes \partial_{P_k} \hat{H}(\xi) \right)
\end{aligned} \tag{3.1.5}$$

Donde el segundo momento cuántico aparece por primera vez, notando que, aunque no fuese relevante para el cálculo del valor esperado del observable, lo es para su evolución temporal.

La expresión del segundo momento es la siguiente:

$$\hat{\rho}^{\otimes 2}(\xi) = \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \rho_\Psi \otimes \rho_\Psi \tag{3.1.6}$$

Este razonamiento se puede generalizar para el k -ésimo momento cuántico de la distribución:

$$\left\langle f_{\hat{O}_1(\xi)} \cdots f_{\hat{O}_k(\xi)} \right\rangle = \int_{M_C} d\mu_C \text{Tr} \left(\hat{\rho}^{\otimes k}(\xi) \left(\hat{O}_1(\xi) \otimes \cdots \otimes \hat{O}_k(\xi) \right) \right) \tag{3.1.7}$$

$$\hat{\rho}^{\otimes k}(\xi) = \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) \overbrace{\rho_\Psi \otimes \cdots \otimes \rho_\Psi}^k \tag{3.1.8}$$

3.2. Dinámica de los momentos

En el caso de calcular la derivada temporal de orden k del valor esperado de un observable es donde se manifiesta el principal inconveniente de la dinámica híbrida. Al generalizar el desarrollo que da lugar a la ecuación 3.1.1, se observa que esta siempre va a depender de todos los momentos cuánticos hasta k -ésimo orden y del momento cuántico de orden inmediatamente superior, $\hat{\rho}^{\otimes k+1}(\xi)$, siendo esto debido al corchete de Poisson clásico.

$$\frac{d^k}{dt^k} \left\langle \hat{O}(\xi) \right\rangle(t) = F(\hat{\rho}^{\otimes 0}(\xi), \dots, \hat{\rho}^{\otimes k+1}(\xi), \hat{O}(\xi), \hat{H}(\xi)) \tag{3.2.1}$$

Se explica en la sección del apéndice A.4 que es posible trasladar la dependencia temporal de las funciones observables a la propia distribución del sistema.

$$F_{QC}(\xi, \rho_\Psi) f_{\hat{O}}(\xi, \rho_\Psi; t) \iff F_{QC}(\xi, \rho_\Psi; t) f_{\hat{O}}(\xi, \rho_\Psi) \tag{3.2.2}$$

Esto es extremadamente útil ya que la dinámica de los observables deja de estar gobernada por la evolución de sus funciones asociadas y pasa a regirse por la evolución de la distribución. Las implicaciones de esta proposición son las de pasar de contar con una ecuación diferencial para cada observable a manejar únicamente una ecuación maestra para la distribución híbrida

(Ec. 2.4.6).

Ahora bien, habiendo visto como los observables y su dinámica dependen de los infinitos momentos de la distribución $F_{QC}(\xi, \rho_\Psi; t)$, es lógico tratar de determinar como se comportan dichos momentos estadísticos a lo largo de un intervalo temporal.

$$\hat{\rho}^{\otimes k}(\xi; t) = \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC}(\xi, \rho_\Psi; t) \overbrace{\rho_\Psi \otimes \cdots \otimes \rho_\Psi}^k \quad (3.2.3)$$

Por consiguiente, la dinámica de la distribución se verá reflejada como un sistema de infinitas ecuaciones, cada una correspondiente a la evolución de un momento determinado:

$$\dot{F}_{QC}(\xi, \rho_\Psi; t) \iff \left\{ \dot{\hat{\rho}}^{\otimes 0}(\xi; t), \dot{\hat{\rho}}(\xi; t), \dot{\hat{\rho}}^{\otimes 2}(\xi; t), \dots, \dot{\hat{\rho}}^{\otimes k}(\xi; t), \dots \right\} \quad (3.2.4)$$

Comenzando por el primer momento, la derivada temporal de este elemento será:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}(\xi; t) &= \int_{M_Q} d\mu_Q \frac{d}{dt} F_{QC}(\xi, \rho_\Psi; t) \rho_\Psi = \int_{M_Q} d\mu_Q \{f_{\hat{H}}, F_{QC}\}_H(\xi, \rho_\Psi) \rho_\Psi \\ &= i\hbar^{-1} [\hat{\rho}(\xi), \hat{H}] + \int_{M_Q} d\mu_Q \{f_{\hat{H}}, F_{QC}\}_C(\xi, \rho_\Psi) \rho_\Psi \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

La expresión del corchete clásico se puede deducir a partir de desarrollar el corchete clásico y manipulando ligeramente la traza. Por ello, un concepto necesario para deducir la expresión de $\dot{\hat{\rho}}(\xi; t)$ es el de la traza parcial. Al realizar la traza parcial sobre un operador con descomposición en productos tensoriales tal y como los momentos, se obtiene un momento de menor orden.

$$\text{Tr}_p \left(\hat{\rho}^{\otimes k}(\xi) \right) = \text{Tr}_p \left(\overbrace{\hat{\rho}(\xi) \otimes \cdots \otimes \hat{\rho}(\xi)}^k \right) = \overbrace{\hat{\rho}(\xi) \otimes \cdots \otimes \hat{\rho}(\xi)}^{k-p} = \hat{\rho}^{\otimes k-p}(\xi) \quad (3.2.6)$$

Será útil para lidiar con la expresión del corchete clásico el poder expresar la variable cuántica en términos de la traza, dado que los puntos de la subvariedad cuántica, ρ_Ψ , son estados puros, tal y como se muestra a continuación:

$$\rho_\Psi = \text{Tr}_1 (\rho_\Psi \otimes \rho_\Psi) \quad (3.2.7)$$

De esta forma,

$$\begin{aligned} \int_{M_Q} d\mu_Q \{f_H, F_{QC}\}_C \rho_\psi &= \int_{M_Q} d\mu_Q \text{Tr}_1 \left(\partial_Q \hat{H}(\xi) \partial_P F_{QC} \rho_\psi \otimes \rho_\psi - \partial_P \hat{H}(\xi) \partial_Q F_{QC} \rho_\psi \otimes \rho_\psi \right) \\ &= \text{Tr}_1 \left(\partial_Q \hat{H}(\xi) \partial_P \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC} \rho_\psi \otimes \rho_\psi - \partial_P \hat{H}(\xi) \partial_Q \int_{M_Q} d\mu_Q F_{QC} \rho_\psi \otimes \rho_\psi \right) \\ &= \text{Tr}_1 \left(\partial_Q \hat{H}(\xi) \partial_P \rho(\xi)^{\otimes 2} - \partial_P \hat{H}(\xi) \partial_Q \rho(\xi)^{\otimes 2} \right) \\ &= \text{Tr}_1 \left(\partial_Q \hat{H}(\xi) \partial_P \rho(\xi)^{\otimes 2} - \partial_P \hat{H}(\xi) \partial_Q \rho(\xi)^{\otimes 2} \right) = \text{Tr}_1 \{ \hat{H}(\xi) \otimes \mathbb{I}, \hat{\rho}^{\otimes 2}(\xi) \}_C \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

Recordando que ahora la dependencia temporal ya no se encuentra en el observable, sino en la distribución y sus momentos.

Generalizando la expresión de $\dot{\hat{\rho}}(\xi; t)$ al k -ésimo momento se tiene:

$$\dot{\hat{\rho}}^{\otimes k}(\xi; t) = i\hbar^{-1} [\hat{H}^k(\xi), \hat{\rho}^{\otimes k}(\xi; t)] + \text{Tr}_1 \left(\{\hat{H}(\xi) \otimes \overbrace{\mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}}^k, \hat{\rho}^{\otimes k+1}(\xi; t)\}_C \right) \quad (3.2.9)$$

Donde, $\hat{H}^k(\xi) = \overbrace{\hat{H}(\xi) \otimes \mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}}^k + \cdots + \overbrace{\mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I} \otimes \hat{H}(\xi)}^k$

Vistas así las expresiones de las derivadas temporales de los infinitos momentos cuánticos de la distribución híbrida, se plantea la ecuación de Liouville en forma de un sistema de infinitas ecuaciones acopladas.

A efectos prácticos, pasar de una ecuación maestra a una colección de infinitas ecuaciones no parece una solución eficiente que simplifique el problema. Es por ello que es posible argumentar que la evolución de la distribución en intervalos finitos de tiempo solo se refleja en un número finito de momentos. De esta forma, restringir la solución a un tiempo máximo lo suficientemente pequeño permite quedarse únicamente con las ecuaciones diferenciales de los primeros k momentos de la distribución.

No obstante, surge un inconveniente fruto de la construcción inherente de la evolución generalizada de los momentos mostrada en 3.2.9. Al acotar las ecuaciones necesarias hasta un k -ésimo momento en función del tiempo máximo de evolución elegido, también es requerida una dependencia con el $(k+1)$ -ésimo momento.

$$\dot{\hat{\rho}}^{\otimes k}(\xi; t) = F(\hat{\rho}^{\otimes k}(\xi; t), \hat{\rho}^{\otimes k+1}(\xi; t)) \quad (3.2.10)$$

Para liberar el nuevo sistema truncado de una dependencia que escapa de las consideraciones tomadas al acotar el tiempo de evolución, se tomará el formalismo de *Máxima Entropía* como criterio para elegir $\hat{\rho}^{\otimes k+1}(\xi; t)$. El argumento radica en que, dado que físicamente no se aprecian los efectos de $\hat{\rho}^{\otimes k+1}(\xi; t)$ en los valores esperados de los observables, se tomará aquel que proporcione un mayor nivel de desinformación en el sistema. El objetivo con esta decisión es la de elegir el caso más general posible y minimizar todo lo posible el error cometido en el truncamiento. Es importante destacar que esta entropía actúa únicamente como una herramienta matemática, no como una entropía termodinámica, por lo que se tiene una mayor libertad al tratar con esta.

Además, es necesario tratar de fijar los grados de libertad de $\hat{\rho}^{\otimes k+1}(\xi; t)$ que dependan de $\hat{\rho}^{\otimes k}(\xi; t)$. Para ello se utilizan las propias ligaduras del sistema, así como aquellas impuestas por la traza, pureza, o algunas más específicas como la desigualdad de Cauchy-Schwartz. De esta forma, se fijan cierto número de grados de libertad mientras que a los restantes se les aplica el ya mencionado formalismo de *Máxima Entropía*.

En consecuencia, la expresión más adecuada de la ecuación 3.2.9 sería el siguiente:

$$\dot{\hat{\rho}}^{\otimes k}(\xi; t) = i\hbar^{-1} \left[\hat{H}^k(\xi), \hat{\rho}^{\otimes k}(\xi; t) \right] + \text{Tr}_1 \left(\{ \hat{H}(\xi) \otimes \overbrace{\mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}}^k, \hat{\rho}_{MaxEnt}^{\otimes k+1}(\xi; t) \}_C \right) \quad (3.2.11)$$

A continuación, será conveniente aplicar la dinámica desarrollada en estos capítulos a un ejemplo sencillo para estudiar su comportamiento y verificar las hipótesis planteadas.

Capítulo 4

Ejemplo particular y aplicación

El simple sistema que se utilizará como ejemplo será el de un solo q-bit [4], por lo que es posible emplear una base ampliamente conocida como las matrices de Pauli, $\{\hat{\sigma}_j\}_{j=0,1,2,3}$, como base del espacio de proyectores, \mathcal{P}_1 .

$$\hat{\sigma}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.0.1)$$

De esta forma, es posible expresar la matriz densidad de 3.0.11 como combinación lineal de la base.

$$\hat{\rho}_\xi = \sum_{j=0}^3 \mu_j \hat{\sigma}_j, \quad (4.0.2)$$

donde las variables μ_j corresponden a las coordenadas de $\hat{\rho}_\xi$ en la base de matrices de Pauli.

A continuación, es necesario tomar una decisión sobre el límite temporal que se impone al sistema para considerar la aproximación del truncamiento en la dependencia de momentos. En este caso, dado que el objetivo es observar el comportamiento de la mecánica y no tratar de representar un sistema concreto con precisión, se optará por restringir la evolución temporal hasta el segundo momento, $\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}$. Ciertamente, esta decisión provocará un error a tener en cuenta en los resultados, pero simplificará los cálculos y simulaciones en gran medida.

Si se toma en consideración la definición de $\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}$ expresada en la ecuación 3.1.6 (Esta corresponde a $\hat{\rho}(\xi)^{\otimes 2}$, pero es análoga por 3.0.12), se observa que el segundo momento se sale de \mathcal{P}_1 , por lo que es necesario tomar $\mathcal{P}_2 \equiv \mathcal{P}_1 \otimes \mathcal{P}_1$ como espacio en el que definir $\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}$.

Como elección de base para \mathcal{P}_2 se tomará la base simétrica de productos tensoriales entre las matrices de Pauli de la base de \mathcal{P}_1 .

$$\text{Base de } \mathcal{P}_2 : \quad \left\{ \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_j \otimes \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \otimes \hat{\sigma}_j) \right\}_{j \leq k=0,1,2,3} \quad (4.0.3)$$

Por lo tanto, al considerar la expresión general del segundo momento cuántico condicionado se tendrá:

$$\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2} = \mu_{00} (\hat{\sigma}_0 \otimes \hat{\sigma}_0) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \mu_{0k} (\hat{\sigma}_0 \otimes \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \otimes \hat{\sigma}_0) + \frac{1}{2} \sum_{j \leq k=1}^3 \mu_{jk} (\hat{\sigma}_j \otimes \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \otimes \hat{\sigma}_j) \quad (4.0.4)$$

Teniendo en cuenta la naturaleza estadística de los operadores densidad $\hat{\rho}_\xi$ y $\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}$, se obtiene como consecuencia directa interpretar las coordenadas de dichas matrices como los valores esperados de todos los puntos de M_Q , ρ_ψ , correspondientes a estados puros.

$$\mu_j = \mathbb{E}(\mu_j(\rho_\psi)); \quad \mu_{jk} = \mathbb{E}(\mu_j(\rho_\psi)\mu_k(\rho_\psi)) \quad (4.0.5)$$

Para lidiar con la complejidad que conlleva tratar con el momento de segundo orden, será necesario recurrir a ciertas restricciones impuestas sobre las coordenadas fruto de diversas condiciones.

En primer lugar, dado que $\hat{\rho}_\xi$ y $\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}$ son operadores densidad bien definidos, su traza ha de estar normalizada.

$$\begin{cases} \text{Tr}(\hat{\rho}_\xi) = 1 \implies \mu_0 = \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \text{Tr}(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}) = 1 \implies \mu_{00} = \frac{1}{2} \end{cases}$$

Adicionalmente, es posible extraer otra relación entre coordenadas a raíz de la expresión ?? mediante la identificación de términos por inspección.

$$\text{Tr}_1(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}) = \frac{2}{\sqrt{2}} \mu_{00} \hat{\sigma}_j + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=1}^3 \mu_{0k} \hat{\sigma}_k = \sum_{j=0}^3 \mu_j \hat{\sigma}_j = \hat{\rho}_\xi \quad (4.0.6)$$

De esta forma, se tiene que:

$$\mu_j = \frac{\mu_{0j}}{\sqrt{2}} \quad (4.0.7)$$

Otra propiedad aprovechable de los operadores densidad es su pureza. Cualquier matriz densidad bien definida ha de tener una pureza menor o igual a la unidad, lo que se traduce a $\mathcal{P}(\hat{\rho}_\xi) = \text{Tr}(\hat{\rho}_\xi^2) \leq 1$ y $\mathcal{P}(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}) = \text{Tr}((\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2})^2) \leq 1$. Las restricciones que se pueden extraer concernientes a las coordenadas son las siguientes:

$$\begin{cases} \mathcal{P}(\hat{\rho}_\xi) \leq 1 \implies \sum_{j=1}^3 \mu_j^2 \leq \frac{1}{2} \\ \mathcal{P}(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}) \leq 1 \implies \mu_{00}^2 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \mu_{0k}^2 + \frac{1}{2} \sum_{j \leq k=1}^3 \mu_{jk}^2 \leq 1 \implies \sum_{k=1}^3 \mu_{0k}^2 + \sum_{j \leq k=1}^3 \mu_{jk}^2 \leq \frac{3}{2} \end{cases}$$

A partir de las definiciones de las coordenadas como valores esperados en 4.0.5 se pueden deducir algunas consecuencias útiles. Así como:

$$\mu_{jj} - \mu_j^2 = \mathbb{E}(\mu_j^2(\rho_\psi)) - \mathbb{E}(\mu_j(\rho_\psi))^2 = \mathbb{E}((\mu_j(\rho_\psi) - \mu_j)^2) \geq 0 \quad (4.0.8)$$

Además, como ya se ha establecido que $\mu_j(\rho_\psi) \in M_Q$ son estados puros, estos deben cumplir la igualdad estricta referida a la pureza, por lo que:

$$\sum_{j=1}^3 \mu_{jj} = \sum_{j=1}^3 \mathbb{E}(\mu_j^2(\rho_\psi)) = \mathbb{E}\left(\sum_{j=1}^3 \mu_j^2(\rho_\psi)\right) = \mathbb{E}\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} \quad (4.0.9)$$

Por último, las coordenadas de los momentos deben cumplir la desigualdad de Cauchy-Schwartz:

$$|\mu_{ij} - \mu_i \mu_j| \leq \sqrt{(\mu_{ii} - \mu_i^2)(\mu_{jj} - \mu_j^2)} \quad (4.0.10)$$

A continuación, es imprescindible remarcar el cambio de notación para las coordenadas del segundo momento. Esto se debe a la necesidad de incluir estas variables como parte de simulaciones numéricas donde la indexación es relevante. En consecuencia, se tendrá:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mu_{00} = \lambda_0 & \mu_{23} = \lambda_5 \\ \mu_{01} = \lambda_1 & \mu_{13} = \lambda_6 \\ \mu_{02} = \lambda_2 & \mu_{11} = \lambda_7 \\ \mu_{03} = \lambda_3 & \mu_{22} = \lambda_8 \\ \mu_{12} = \lambda_4 & \mu_{33} = \lambda_9 \end{array} \right.$$

Inicialmente se planteó la utilización de una entropía de Von Neumann como expresión de la desinformación a maximizar. Esto conllevaría ciertos problemas que dificultarían en gran medida los cálculos, resultando en la pérdida de exactitud por la necesidad de aproximaciones.

$$S = -\text{Tr}\left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2} \log\left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}\right)\right) \quad (4.0.11)$$

Dada la estructura de la expresión 4.0.11, es necesaria la expansión en serie del logaritmo, $\log\left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}\right) = \left(\mathbb{I} - \hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}\right) + \frac{1}{2}\left(\mathbb{I} - \hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}\right)^2 + \dots$, lo cual ya introduce imprecisiones adicionales en los potenciales cálculos posteriores. Tomando únicamente los términos de orden lineal en la entropía, esta se puede aproximar tal que así:

$$S \simeq 1 - \text{Tr}\left(\left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}\right)^2\right) \quad (4.0.12)$$

La contribución llevada a cabo en este trabajo es la de escoger una entropía de Rényi como representante matemático de la desinformación. Es importante recordar que esta “entropía” no es más que una herramienta con la que se busca el estado de máxima desinformación del momento de orden cuadrático. Es por ello que, al no ser necesario lidiar con su equivalente termodinámico, se pueden considerar diferentes expresiones para la entropía siempre que estas estén bien definidas.

Se define la entropía de Rényi como una familia de estas indexadas por un parámetro α :

$$S_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \log \left[\text{Tr}\left(\left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}\right)^\alpha\right) \right] = \frac{1}{1-\alpha} \log \left[\sum_{k=0}^3 \Lambda_k^\alpha \right] \quad (4.0.13)$$

Donde $\{\Lambda_k\}_{k=0,1,2,3}$ corresponden a los autovalores de $\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}$. Por consiguiente, para encontrar el estado que maximice S_α se habrá de estudiar el comportamiento de los autovalores con respecto a las coordenadas cuadráticas, $\Lambda_k = \Lambda_k(\lambda_j) \forall j = 0, 1, \dots, 9$. En este caso particular, solo se considerarán las entropías correspondientes a $\alpha > 1 \implies \frac{1}{1-\alpha} < 0$, por lo que será necesario minimizar los autovalores para maximizar la entropía. El límite $\alpha \rightarrow 1$ se corresponde con la entropía de von Neumann. Se considerará el comportamiento del modelo de Rényi para varios valores del parámetro α , y se compararán.

En primer lugar, era necesario calcular los autovalores $\{\Lambda_k\} \in \mathbb{R}$ del segundo momento, dado que la estructura de la entropía de Rényi (4.0.13) permite trasladar el estudio de su monotonía a la de estos parámetros. Durante la realización de esta tarea, se observaron la aparición de estructuras repetidas y reconocibles en la forma de los autovalores, las cuales se denotaron como \tilde{P} y C .

$$\Lambda_0 = 0 \quad (4.0.14)$$

$$\Lambda_1 = \frac{-\tilde{P}}{3\sqrt[3]{C + \sqrt{C^2 - \frac{\tilde{P}}{27}}}} - \sqrt[3]{C + \sqrt{C^2 - \frac{\tilde{P}}{27}}} + \frac{1}{3} \quad (4.0.15)$$

$$\Lambda_2 = \Lambda_3 = \frac{-\tilde{P}}{3\sqrt[3]{C + \sqrt{C^2 - \frac{\tilde{P}}{27}}}} + \sqrt[3]{C + \sqrt{C^2 - \frac{\tilde{P}}{27}}} + \frac{1}{3} \quad (4.0.16)$$

Así pues, el objetivo era el de optimizar los autovalores a partir de estas dos variables, y una vez obtenidos los valores que maximizan la entropía, despejar las coordenadas haciendo uso del resto de restricciones.

$$\tilde{P} = \tilde{P} \left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2} \right) = \sum_{i=1}^6 \lambda_i^2 \quad (4.0.17)$$

$$C = C \left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2} \right) = -(\lambda_1 \lambda_2 \lambda_4 + \lambda_1 \lambda_3 \lambda_6 + \lambda_2 \lambda_3 \lambda_5) + \lambda_4 \lambda_5 \lambda_6 \quad (4.0.18)$$

Uno de los pasos clave para resolver este problema es el de analizar cuidadosamente las restricciones y tratar de simplificar todo lo posible las expresiones. Ya se ha sustituido la expresión 4.0.9, y es por ello que no aparece una dependencia con $\{\lambda_7, \lambda_8, \lambda_9\}$. Otra medida de gran relevancia será la de considerar sub-esferas de Bloch para los elementos de la base de \mathcal{P}_2 , de forma que es equivalente escoger cualquier punto de estas esferas. Esto permite simplificar parcialmente las coordenadas y reducir el número de incógnitas. Así pues, se consideran las coordenadas $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ como representantes de los puntos de la sub-esfera formada por los elementos de la base $\left\{ \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_0 \otimes \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \otimes \hat{\sigma}_0) \right\}_{k=1,2,3}$, y las coordenadas $\{\lambda_4, \lambda_5, \lambda_6\}$ los de $\left\{ \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_j \otimes \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \otimes \hat{\sigma}_j) \right\}_{j < k=2,3}$.

Como se ha mostrado en 4.0.7, las coordenadas $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ quedan fijas porque están ligadas a las de $\hat{\rho}_\xi$. Haciendo uso de la pureza del primer momento y 4.0.7, se tiene que:

$$\sum_{k=1}^3 \lambda_k \leq 1 \implies \tilde{P} \left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2} \right) \geq 1 \quad (4.0.19)$$

Si se tiene en cuenta la pureza de $\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2}$, se puede deducir la cota superior del parámetro \tilde{P} .

$$1 \leq \tilde{P} \left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2} \right) \leq \frac{4}{3} \quad (4.0.20)$$

Quedan tres grados de libertad $\{\lambda_4, \lambda_5, \lambda_6\}$. Gracias a esto, se han elegido tres casos diferentes que simplifican el problema. Para acotar el parámetro $C \left(\hat{\rho}_\xi^{\otimes 2} \right)$ en cada caso, se supondrá una dependencia simétrica de $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ en el sumatorio de 4.0.19, $\lambda_k \leq \frac{\sqrt{3}}{3}; \forall k = 1, 2, 3$, sin pérdida de generalidad para lo que se trata de hallar.

1. $\lambda_4 = \lambda; \lambda_5 = \lambda_6 = 0 \implies C = -\lambda_1\lambda_2\lambda \implies -\frac{1}{3} \leq C \leq \frac{1}{3}$
2. $\lambda_4 = \lambda_5 = \lambda; \lambda_6 = 0 \implies C = -\lambda_1\lambda_2\lambda - \lambda_2\lambda_3\lambda \implies -\frac{2}{3} \leq C \leq \frac{2}{3}$
3. $\lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = \lambda \implies C = -\lambda_1\lambda_2\lambda - \lambda_2\lambda_3\lambda - \lambda_1\lambda_3\lambda + \lambda^3 \implies -2 \leq C \leq 2$

La construcción de estas cotas en los parámetros que maximizan la entropía es necesario, ya que los métodos numéricos implementados en el código que permiten hallar los valores exactos precisan el rango de valores en el que tiene sentido evaluar los parámetros acorde con las restricciones impuestas sobre el problema. Otro aspecto a considerar es que en el cuerpo del documento solo se discutirán los resultados del primer caso por razones de simplicidad tanto numérica como de extensión. Se pueden hallar los datos relativos a los casos 2 y 3 en C.3 y C.4.

También recordar que el proceso para hallar \tilde{P} y C es necesario realizarlo en cada paso temporal, ya que el estado cuántico va a evolucionar de forma acoplada con la distribución cuántica. Para facilitar la compresión del trabajo llevado a cabo, se mostrará en un esquema las iteraciones del ciclo.

$$\begin{aligned} \{\tilde{P}, C\}_{MaxEnt}(t) & \xrightarrow{\quad \Downarrow \quad} \{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}(t + \Delta t) \\ \{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}(t) & \implies \{\lambda_4, \lambda_5, \lambda_6\}_{MaxEnt}(t) \end{aligned}$$

Para concretar la forma en la que se calcula la evolución temporal de las coordenadas, en este ejemplo particular se toma el Hamiltoniano y las expresiones de las derivadas temporales, $\dot{\mu}_j(x_i)$, de [4].

$$\hat{H}(\xi) = \hat{H}(Q, P) = \frac{1}{2} (Q^2 + P^2) \hat{\sigma}_0 + E_1(Q, P) \hat{\pi}_1(Q, P) + E_2(Q, P) \hat{\pi}_2(Q, P) \quad (4.0.21)$$

Donde:

$$\begin{cases} \hat{\pi}_1(Q, P) = \hat{\sigma}_0 + \sin(Q)\hat{\sigma}_1 + \cos(Q)\hat{\sigma}_3 \\ \hat{\pi}_2(Q, P) = \hat{\sigma}_0 - \sin(Q)\hat{\sigma}_1 - \cos(Q)\hat{\sigma}_3 \end{cases} ; \quad \begin{cases} E_1(Q, P) = \frac{1}{1+Q^2} \\ E_2(Q, P) = E_1(Q, P) + 1 + \frac{Q^2}{10} \end{cases}$$

La evolución temporal de las coordenadas se da como:

$$\dot{\mu}_0(\xi) = \sum_{k=0}^3 \{H_k(\xi), \mu_k(\xi)\}_C \quad (4.0.22)$$

$$\dot{\mu}_j(\xi) = \sum_{kl} c_{kl}^j \mu_k(\xi) H_l(\xi) + \frac{1}{2} \{H_0(\xi), \mu_j(\xi)\}_C + \sum_{k=1}^3 \{H_k(\xi), \mu_{jk}(\xi)\}_C; \quad \forall j = 1, 2, 3 \quad (4.0.23)$$

Donde cabe destacar que c_{jk} corresponden a las constantes de estructura de $u(2)$ en correspondencia con la base elegida. Además, se tiene que $\mu_j(\xi) = F_C(\xi)\mu_j$ y $\mu_{jk}(\xi) = F_C(\xi)\mu_{jk}$, por lo que las derivadas temporales se desarrollan mediante la regla de la cadena, dando así $\dot{\mu}_0(\xi) = \dot{F}_C(\xi)$ y $\dot{\mu}_j(\xi) = \dot{F}_C(\xi)\mu_j + F_C\dot{\mu}_j$.

Por último, para la resolución de la ecuación diferencial se considerará una distribución clásica inicial:

$$F_C(\xi) = \frac{1}{2\pi} e^{\frac{-(Q^2+P^2)}{5}} \quad (4.0.24)$$

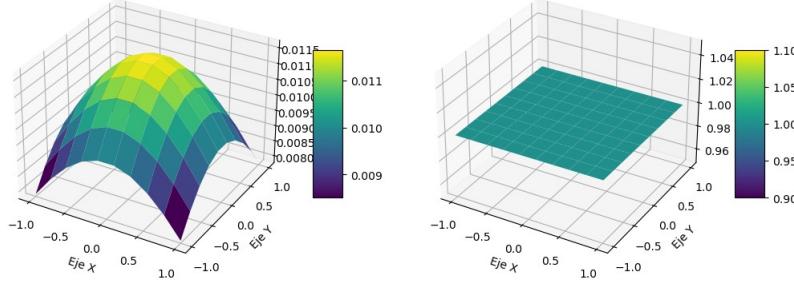
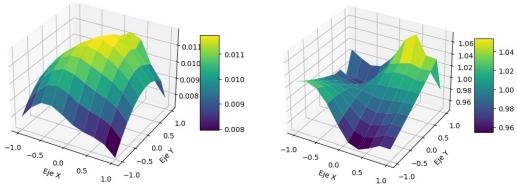
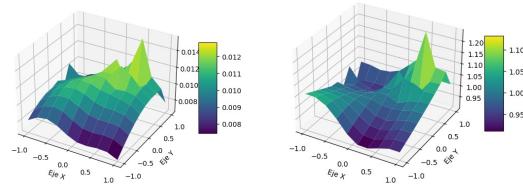
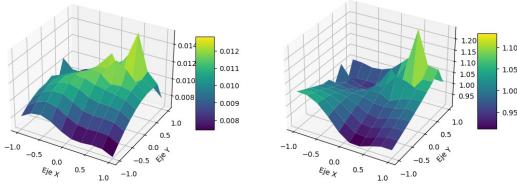
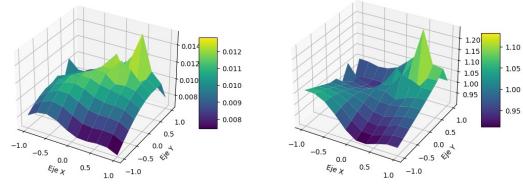
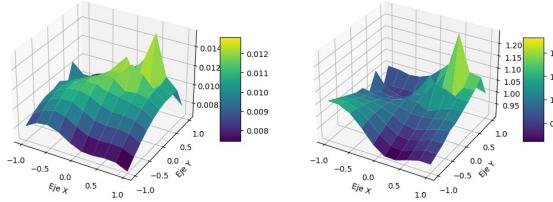


Figura 4.0.1: Condiciones iniciales de F_C y la pureza a $t = 0$

Para determinar la evolución de las coordenadas del primer momento cuántico, se ha elaborado un integrador en un entorno de Python que calcula los valores de dichos parámetros en cada instancia temporal en todos los puntos del supuesto espacio de fases clásico (C.1). Esto resultó ser una tarea bastante más complicada de lo que inicialmente se tenía en cuenta ya que, dada la complejidad de los cálculos y las limitaciones del propio lenguaje, solo se ha podido implementar mediante el método de Euler (en vez de alguno más preciso como un RK4), lo que conlleva imprecisiones inherentes pero permite realizar los cálculos en intervalos de tiempo razonables.

Ahora bien, una vez se ha calculado la evolución del subsistema cuántico, se ha de seleccionar aquello pude proporcionar información relevante acerca del mismo. En este caso, se cree que representar la pureza y su evolución sobre el espacio de fases clásico puede reflejar de manera más intuitiva cómo varía el sistema. Con la finalidad de aligerar esta parte, solo se muestran los resultados de uno de los casos propuestos, el caso 1.

Figura 4.0.2: $\alpha = 2$ Figura 4.0.3: $\alpha = \frac{7}{4}$ Figura 4.0.4: $\alpha = \frac{3}{2}$ Figura 4.0.5: $\alpha = \frac{5}{4}$ Figura 4.0.6: F_C y pureza a tiempo $t = 24$ considerando entropía de Rényi a diferentes valores de α Figura 4.0.7: F_C y pureza a tiempo $t = 24$ considerando entropía de Von Neumann

Una vez construido el integrador, fue sencillo modificar la expresión de la entropía para que se ajustase a un elemento determinado dentro de la familia de entropías de Rényi ($\alpha = 2, \frac{7}{4}, \frac{3}{2}, \frac{5}{4}$), o a la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann (4.0.12). Es así como se obtuvieron las gráficas 4.0.6 y 4.0.7. Ciertamente, se aprecia cualitativamente como, a medida que se acerca al límite de $\alpha \rightarrow 1$, la pureza del sistema modelado con Rényi se va acercando cada vez más al propuesto por la aproximación lineal. De todas formas, en todos los modelos se aprecia claramente como en los primeros instantes se mantienen fuertes similitudes en las purezas representadas con cada modelo. A nivel cuantitativo, es notable como existen puntos del espacio de fases lineal donde la pureza supera la unidad, pero se considera aceptable atribuir estos fenómenos que físicamente no tienen sentido a la implementación del método de Euler en el integrador. Por tanto, se considerarán problemas fruto del método numérico y no de la teoría subyacente. Vistos los resultados de este ejemplo, es factible estipular que cualquier modelo de desinformación bien definido es viable para un sistema híbrido, por lo que uno de los objetivos futuros en esta línea sería tratar de encontrar el modelo más óptimo para tratar los SH . De todas formas, se desde este proyecto se anima a estudiar dichos sistemas bajo diferentes modelos de desinformación a los propuestos con el fin de reforzar o desmentir los resultados expuestos.

Capítulo 5

Conclusiones

La finalidad de este trabajo era el de desarrollar un método consistente para el estudio de SH bajo un acercamiento estadístico, de tal forma que la dinámica de Erhenfest fuese compatible con la formulación de la entropía del sistema. Las notables contribuciones de proyectos anteriores [4] muestran que para lograr este propósito es necesario abordar la función de distribución desde sus momentos estadísticos. Estos momentos están acoplados entre sí, lo cual supone un problema cuando se trata de considerar un conjunto finito de estos, debido a la dependencia con órdenes superiores excluidos del conjunto. Para solucionarlo se tomó una desinformación con forma de entropía de Von Neumann la cual, al maximizarla, eliminaría los grados de libertad dependientes de dichos órdenes superiores.

La aportación de este proyecto es la de proponer una forma de entropía de Rényi para la desinformación. Esto se debe a las grandes dificultades que se presentan al utilizar la de Von Neumann, y la necesidad de adoptar una aproximación lineal. Al tomar en consideración estos factores, se tomó el relevo del ejemplo presentado en [4] y se desarrollaron las ecuaciones presentadas en mencionado artículo.

Al representar las ecuaciones, se ha determinado que las similitudes entre los diferentes modelos son suficientes como para afirmar que, en intervalos pequeños de tiempo, cualquier desinformación es válida. Es cierto que el ejemplo tratado en este documento es sencillo a nivel fundamental, ya que las limitaciones impuestas por los cálculos, las simulaciones y los métodos numéricos empleados no han permitido abarcar problemas de mayor magnitud. Es por este motivo que se incentiva a futuras investigaciones en la materia a considerar sistemas más complejos y mejorar y optimizar toda la parte computacional involucrada, ya que es seguro que será determinante para extraer conclusiones con mucha mayor precisión y exactitud.

Bibliografía

- [1] J. L. Alonso, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, J. C. Cuchí, P. Echenique, and F. Falceto, “Statistics and Nosé formalism for Ehrenfest dynamics,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 44, p. 395004, Sept. 2011.
- [2] J. L. Alonso, J. Clemente-Gallardo, J. C. Cuchí, P. Echenique, and F. Falceto, “Ehrenfest dynamics is purity non-preserving: A necessary ingredient for decoherence,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 137, p. 054106, Aug. 2012.
- [3] J. L. Alonso, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, J. C. Cuchí, P. Echenique, J. G. Esteve, and F. Falceto, “Nonextensive thermodynamic functions in the Schrödinger-Gibbs ensemble,” *Physical Review E*, vol. 91, p. 022137, Feb. 2015.
- [4] J. L. Alonso, C. Bouthelier-Madre, J. Clemente-Gallardo, D.ínez-Crespo@, and J. Pomar, “Effective nonlinear Ehrenfest hybrid quantum-classical dynamics,” *The European Physical Journal Plus*, vol. 138, p. 649, July 2023.
- [5] F. J. Pomar Villuendas, *Estudio de la dinámica de sistemas estadísticos híbridos clásico-cuánticos*. Trabajo de fin de grado, Universidad de Zaragoza, Zaragoza, June 2021.
- [6] F. A. Bornemann, P. Nettesheim, and C. Schütte, “Quantum-classical molecular dynamics as an approximation to full quantum dynamics,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 105, p. 1074, July 1996.
- [7] J. Clemente-Gallardo, “The Geometrical Formulation of Quantum Mechanics,” *Revista de la Real Academia de Ciencias de Zaragoza*, vol. 67, p. 51, 2012.
- [8] A. Gleason, “Measures on the Closed Subspaces of a Hilbert Space,” *Indiana University Mathematics Journal*, vol. 6, no. 4, pp. 885–893, 1957.
- [9] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics, Second Edition*. Taylor & Francis, June 2003.
- [10] R. Abraham and J. E. Marsden, *Foundations of Mechanics*. American Mathematical Soc., 2008.

Apéndice A

Dinámica de Hamilton

El formalismo de Hamilton para el estudio de la mecánica de un sistema nos será de gran utilidad para abordar este problema, como ya se ha mencionado con anterioridad. Para facilitar el consecuente razonamiento y agilizar su uso a lo largo de este trabajo, se habrá de recordar los conceptos más básicos.

A.1. Espacio de fases clásico

Un sistema visto bajo el prisma del formalismo hamiltoniano se ve definido por una variedad diferenciable M de dimensión $d_M = 2n$. A cada punto en este espacio se le etiqueta con una tupla de $2n$ componentes reales que serán categorizadas en dos conjuntos, las *coordenadas generalizadas*, $\vec{q} = (q_1, \dots, q_n)$, y los *momentos asociados*, $\vec{p} = (p_1, \dots, p_n)$. Por consiguiente, un punto del espacio de fases $P \in M$ se expresará de la siguiente forma:

$$P \equiv (\vec{q}, \vec{p}) = (q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n); \quad q_k, p_k \in \mathbb{R} \quad (\text{A.1.1})$$

Estas coordenadas y sus momentos presentan una dependencia temporal, lo cual implica que la evolución de cualquier sistema descrito por el formalismo de Hamilton se verá representada por una trayectoria en el espacio de fases.

Como último apunte, esta trayectoria no es aleatoria cuando se trata de un sistema hamiltoniano, sino que viene determinada por una función específica del sistema. A la función que guarda toda la información sobre la dinámica de un sistema la llamaremos función de Hamilton, o hamiltoniano, $H : M \rightarrow \mathbb{R}; \quad H \in C^\infty(M)$.

Para saber como evolucionan en el tiempo las coordenadas generalizadas y sus momentos hemos de recurrir a las conocidas como *Ecuaciones de Hamilton* [9].

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_k} \quad (\text{A.1.2})$$

$$\dot{p}_k = \frac{\partial H(q, p)}{\partial q_k} \quad (\text{A.1.3})$$

Otro apartado importante a tener en cuenta serían aquellas magnitudes funciones de las coordenadas y momentos en el espacio de fases a las que denotaremos como *Observables*, $f : M \rightarrow \mathbb{R}; f \in C^\infty(M)$. La evolución temporal de los observables se deduce de la inmediata aplicación de la regla de la cadena.

$$\frac{d}{dt} f(\vec{q}(t), \vec{p}(t)) = \dot{f}(\vec{q}(t), \vec{p}(t)) = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial f}{\partial p_k} \dot{p}_k \right) = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) \quad (\text{A.1.4})$$

Conviene definir la siguiente estructura algebraica para aligerar la notación de ahora en adelante, el conocido como *Corchete de Poisson*: $\{\cdot, \cdot\}_C : C^\infty(M) \times C^\infty(M) \rightarrow C^\infty(M)$. Las propiedades de esta estructura son:

- Antisimétrico $\rightarrow \{f, g\}_C = -\{g, f\}_C \quad \forall f, g \in C^\infty(M)$
- Cumple la identidad de Jacobi $\rightarrow \{f, \{g, h\}_C\}_C + \{h, \{f, g\}_C\}_C + \{g, \{h, f\}_C\}_C = 0 \quad \forall f, g, h \in C^\infty(M)$
- Cumple la regla de Leibniz $\rightarrow \{f, gh\}_C = \{f, g\}_C h + g\{f, h\}_C \quad \forall f, g, h \in C^\infty(M)$

Por consiguiente, la evolución temporal de un observable arbitrario descrito mediante el uso de los corchetes de Poisson se expresará de la siguiente forma:

$$\dot{f}(\vec{q}(t), \vec{p}(t)) = \{f, H\}_C = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) \quad (\text{A.1.5})$$

A.2. Variedades simplécticas y mecánica geométrica

Resulta de gran utilidad recurrir al formalismo geométrico para estudiar la mecánica de un sistema hamiltoniano, y es por eso que se debe abordar los aspectos esenciales para el posterior desarrollo de la dinámica.

Considerando un sistema físico, este se supondrá embebido en el espacio vectorial \mathbb{R}^n . A continuación, se contemplan ambos fibrados tangente y cotangente del mismo, los cuales presentan un homeomorfismo con el espacio lineal simpléctico, tal y como dicta el teorema de Darboux.

$$T\mathbb{R}^n \sim T^*\mathbb{R}^n \sim \mathbb{R}^{2n} \quad (\text{A.2.1})$$

Al describir $T^*\mathbb{R}^n$ bajo el atlas construido en coordenadas de Darboux, (q_i, p_i) , es posible construir la siguiente 1-forma [9], conocida como *Forma de Liouville*.

$$\theta = \sum_i p_i dq^i \quad (\text{A.2.2})$$

Cuando se considera la derivada exterior de dicha 1-forma se encuentra una relación con la forma simpléctica canónica [9] asociada al anteriormente mencionado espacio lineal simpléctico, $(\mathbb{R}^{2n}, \omega)$:

$$\omega = -d\theta = \sum_i dq^i \wedge dp_i \quad (\text{A.2.3})$$

Las principales características de esta 2-forma o forma simpléctica son:

- ω es cerrada $\implies d\omega = 0$
- ω es no degenerada

Estas propiedades de la 2-forma aseguran la posible construcción de un elemento de volumen o una medida, Ω , en la variedad simpléctica.

$$\Omega = \omega \wedge \overbrace{\dots}^{n \text{ veces}} \wedge \omega = d\theta \wedge \overbrace{\dots}^{n \text{ veces}} \wedge d\theta \quad (\text{A.2.4})$$

A continuación, es conveniente redefinir la dinámica Hamiltoniana tanto clásica como cuántica en términos geométricos, ya que se hará uso de esta formulación para demostrar que el elemento de volumen, Ω , cumple el teorema de Liouville.

En primer lugar, se observa que es posible describir un campo vectorial a partir de los corchetes de Poisson introducidos con anterioridad. Este campo vectorial viene asociado a una función determinada, y en este caso será el campo vectorial hamiltoniano el que será de mayor interés para tratar la dinámica del sistema.

En el caso clásico se parte de una variedad simpléctica denotada como $M_C = (\mathbb{R}^{2n}, \omega)$. Si la dinámica está caracterizada por una función hamiltoniana, H , el campo vectorial asociado, X_H , será:

$$H(q, p) \longrightarrow X_H = \{\cdot, H\}_C \quad (\text{A.2.5})$$

De forma equivalente, podemos escribir una ecuación implícita para el campo X_H a partir de la forma simpléctica:

$$i_{X_H} \omega = dH \quad (\text{A.2.6})$$

Una vez construido el campo vectorial hamiltoniano, se puede probar que las curvas integrales del campo vectorial definido en A.2.5 son solución de las ecuaciones de Hamilton A.1.2 y A.1.3.

A.3. Sistemas cuánticos

Hasta ahora únicamente se han tratado sistemas hamiltonianos clásicos y su respectiva formulación en términos de mecánica geométrica, pero es inevitable notar que un sistema híbrido se compone por uno clásico y uno cuántico. Por ello, y aunque sea análogo en varios aspectos, es imprescindible apuntar algunas características de la dinámica geométrica hamiltoniana en sistemas cuánticos. El formalismo geométrico para la Mecánica cuántica se ha desarrollado desde finales de los años 70 del siglo pasado [10], y sus características más importantes pueden resumirse como se desarrolla a continuación.

En primer lugar, es necesario tomar un espacio de Hilbert como el equivalente cuántico al espacio de fases. En el caso de restringir la dimensión del espacio de Hilbert al caso finito, este será isomorfo a \mathbb{C}^n , lo cual será de gran utilidad y se tomará así durante el resto del trabajo, $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$.

Como no resulta conveniente contar con un espacio de fases real en el ámbito clásico y uno complejo en el cuántico, se realifica el espacio cuántico construyendo una variedad diferenciable real, $M_Q \sim \mathbb{R}^{2n}$, que recogerá los estados cuánticos $|\Psi\rangle$. Por consiguiente, los estados cuánticos vendrán descritos por coordenadas reales, $(q_i, p_i) \in \mathbb{R}^{2n}$, que representan la parte real y la imaginaria de las coordenadas complejas del antes mencionado espacio de Hilbert. Notar que, aunque sea formalmente análogo, las coordenadas cuánticas no se corresponden a las coordenadas canónicas y sus momentos asociados del caso clásico. Para concluir la realificación, cabe destacar que el producto escalar hermítico se puede desglosar en una estructura Kähler, (g, ω, J) . Expresando las formas que caracterizan la estructura Kähler de la realificación en función de las coordenadas (q_i, p_i) :

- $g = dq_k \otimes dq_k + dp_k \otimes dp_k \longrightarrow$ Estructura Riemanniana
- $\omega = dq_k \wedge dp_k \longrightarrow$ Forma simpléctica
- $J = \partial_{p_k} \otimes dq_k - \partial_{q_k} \otimes dp_k \longrightarrow$ Estructura compleja

De forma que el producto escalar hermítico queda definido en función de g y de ω :

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = g(X_{\Psi_1}, X_{\Psi_2}) + i\omega(X_{\Psi_1}, X_{\Psi_2}) \quad (\text{A.3.1})$$

Donde (X_{Ψ_1}, X_{Ψ_2}) son los campos vectoriales asociados a los estados (Ψ_1, Ψ_2) respectivamente. Nótese que estamos usando el hecho de que el espacio de estados es una variedad lineal para asumir que el espacio tangente en todos los puntos es isomorfo a la propia variedad.

Para tratar los observables cuánticos, $O \in \text{Lin}(\mathcal{H})$ de una forma análoga a los observables clásicos, les asociaremos una función que se corresponderá con el valor esperado del observable que actúa sobre M_Q .

$$O \implies f_O = \langle \Psi | O | \Psi \rangle \quad (\text{A.3.2})$$

Será con las funciones de dichos observables con las que se describirá la dinámica. De forma análoga al razonamiento clásico, se define un corchete de Poisson cuántico que codifica la evolución temporal de las funciones observables en función del hamiltoniano del sistema.

$$\dot{f}_O = \hbar^{-1} \{f_O, f_H\}_Q \quad (\text{A.3.3})$$

Además, partiendo desde la ecuación de Heisenberg, $i\hbar \frac{dO}{dt} = [O, H]$, es posible transformarla a formulación geométrica para llegar al siguiente resultado:

$$\dot{f}_O = \hbar^{-1} f_{i[H,O]} \iff \{f_O, f_H\}_Q = f_{i[H,O]} \quad (\text{A.3.4})$$

Mecánica geométrica en un sistema cuántico

En el caso cuántico se consideraba el espacio de Hilbert y su isomorfismo con \mathbb{C}^n , y su producto hermítico, dejando así una variedad diferenciable $(\mathbb{C}^n, \langle \cdot | \cdot \rangle)$. Tras el proceso de realificación, el espacio de Hilbert pasaba a uno real y la estructura algebraica se veía registrada en una estructura Khäler, dejando así una variedad simpléctica $M_Q = (\mathbb{R}^{2n}, (g, \omega, J))$. Para tratar los observables se les asociaba sus valores esperados como funciones observables, por lo que el campo vectorial hamiltoniano quedará definido como:

$$\hat{H} \longrightarrow X_{f_H} = \hbar^{-1} \{\cdot, f_H\}_Q \quad (\text{A.3.5})$$

Análogamente al caso clásico, las curvas integrales de este campo vectorial serán la solución de la ecuación que describe la mecánica.

$$i_{X_{f_H}} \omega = df_H \quad (\text{A.3.6})$$

Puede comprobarse [10] que las curvas integrales de este campo vectorial coinciden con las soluciones de la ecuación de Schrödinger.

Para concluir, se puede demostrar de forma breve de que la derivada de Lie sobre el campo vectorial hamiltoniano deja invariante la forma simpléctica. Para el siguiente desarrollo, se utilizará H o f_H indistintamente, ya que la demostración solo requiera de que el campo sea hamiltoniano. Así, dada la derivada de Lie, esta puede ser expresada como:

$$\mathcal{L}_{X_H} \omega = (i_{X_H} d + di_{X_H}) \omega \quad (\text{A.3.7})$$

El primer sumando, $i_{X_H} d\omega$, se anula porque la forma simpléctica es cerrada, $d\omega = 0$. El segundo sumando, $di_{X_H} \omega$, se anula directamente al sustituir la ecuación A.2.6, dejando así

$$d(dH) = 0.$$

Por consiguiente, la derivada de Lie sobre el elemento de volumen es directamente nula.

$$\mathcal{L}_{X_H}\Omega = \mathcal{L}_{X_H}(\omega \wedge \overbrace{\cdots}^{n \text{ veces}} \wedge \omega) = 0 \quad (\text{A.3.8})$$

Este resultado quiere decir que, siempre que la dinámica de un sistema descrito en una variedad simpléctica sea hamiltoniana, se cumple el teorema de Liouville.

$$\Omega(t=0) = \Omega(t) \quad \forall t \quad (\text{A.3.9})$$

A.4. Formulación estadística en dinámica Hamiltoniana

Ya se ha mencionado con anterioridad que la validez del modelo dinámico de Ehrenfest se basa en dos factores: la diferencia de masas entre los sistemas nuclear y electrónico, y la magnitud de la dispersión del paquete nuclear con respecto a la longitud característica del problema. Esto lleva a pensar que conviene tomar sistemas con una gran cantidad de nucleones y electrones para contemplar una dinámica híbrida más sólida. Aún así, esto conlleva la necesidad de pasar al formalismo estadístico para ser capaces de estudiar las consecuencias macroscópicas de dicha dinámica. Por ende, se cree conveniente dar un breve repaso sobre este tema con el fin de agilizar su posterior uso.

Si se considera un sistema hamiltoniano descrito por el espacio de fases y una serie de observables, rápidamente se nota que existen ciertos observables que no dependen de las coordenadas y momentos individuales de cada componente, sino que adquieren un enfoque macroscópico. Por consiguiente, resulta de vital importancia conocer la forma de construir estos observables macroscópicos a partir de los microscópicos. Es aquí donde el concepto de la *Función de distribución* hace su aparición.

Dado un observable $f(q(t), p(t)) \equiv f(q, p; t)$, construiremos su observable macroscópico asociado de la siguiente forma:

$$\langle f \rangle(t) = \int_M dq dp F(q, p; 0) f(q, p; t) = \int_M dq dp F(q, p; -t) f(q, p; 0) \quad (\text{A.4.1})$$

Donde $F(q, p)$ es la ya mencionada función de distribución, la cual debe ser definida positiva, $F(q, p) \geq 0$, y cumplir la condición de normalización:

$$\int_M dq dp F(q, p) = 1 \quad (\text{A.4.2})$$

El cambio de paradigma que tiene lugar al adoptar este enfoque se refleja en la interpretación del espacio de fases como herramienta que describe el sistema. Anteriormente, cada punto del espacio de fases (q, p) a un tiempo t constituía una descripción del sistema, mientras que ahora se aboga por un formalismo estadístico de microestados, en el que cada punto $(q(t), p(t))$ se asocia a un microestado pesado por la función de distribución.

Así bien, la complejidad del sistema se reduciría en gran medida si fuese posible transferir la evolución de los muchos observables a la evolución de una única función de distribución. Esto es posible debido en gran medida a que la medida, $dqdp$, se mantiene en el tiempo, como ya se ha demostrado en el apartado A.2. Esto asegura el cumplimiento del teorema de Liouville sobre la medida, lo que a grandes rasgos implica $dq(t=0)dp(t=0) = dq(t)dp(t) \forall t$.

Por consiguiente, al expresar los puntos del espacio de fases en función del operador de evolución temporal y una condición inicial:

$$(q(t), p(t)) = \phi_t^*(q(0), p(0)) \iff \phi_{-t}^*(q(t), p(t)) = (q(0), p(0)) \quad (\text{A.4.3})$$

De esta forma, si realizamos dicho cambio de variable en la ecuación A.4.1, y habiendo dejado claro que esto es posible gracias al cumplimiento del teorema de Liouville, se transfiere la dependencia temporal a la función de distribución $F(q, p)$.

$$\langle f \rangle(t) = \int_M dqdp F(q, p) f(q, p; t) = \int_M dqdp F(q, p; t) f(q, p) \quad (\text{A.4.4})$$

Donde se tendrá que:

$$F(q, p; t) = \phi_{-t}^* [F(q, p)] \quad (\text{A.4.5})$$

Por último, viendo que la dependencia de $F(q, p; t)$ con el operador evolución temporal va con ϕ_{-t}^* , así la derivada temporal de la función de distribución será:

$$\dot{F} = \{H, F\} \quad (\text{A.4.6})$$

Apéndice B

Notas adicionales sobre la dinámica de Ehrenfest

B.1. Demostración de ortogonalidad

Se puede demostrar la ortogonalidad de los estados electrónico y nuclear con respecto a sus propias derivadas temporales de la siguiente forma:

$$\langle \Psi_e | \Psi_e \rangle = \langle \Psi_N | \Psi_N \rangle = 1 \quad (\text{B.1.1})$$

Al derivar B.1.1, se obtiene que:

$$\langle \dot{\Psi}_e | \Psi_e \rangle = \langle \dot{\Psi}_N | \Psi_N \rangle = 0 \quad (\text{B.1.2})$$

Por consiguiente, al considerar la derivada temporal de la función de onda híbrida:

$$\frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \frac{d}{dt} (|\Psi_e\rangle |\Psi_N\rangle) = \langle \dot{\Psi}_e | \Psi_N \rangle + \langle \Psi_e | \dot{\Psi}_N \rangle \quad (\text{B.1.3})$$

De tal forma que la ecuación de Schrödinger híbrida puede expresarse en términos de ambas funciones.

$$i\hbar \left(\langle \dot{\Psi}_e | \Psi_N \rangle + \langle \Psi_e | \dot{\Psi}_N \rangle \right) = \left(\hat{H}_e + \hat{H}_N \right) |\Psi_e\rangle |\Psi_N\rangle \quad (\text{B.1.4})$$

Para finalizar, se obtienen ambas ecuaciones proyectando sobre cada estado, según cual interese. Al proyectar sobre $\langle \Psi_N |$ y $\langle \Psi_e |$ respectivamente:

$$i\hbar \langle \dot{\Psi}_e \rangle = \langle \Psi_N | \left(\hat{H}_e + \hat{H}_N \right) |\Psi_N\rangle |\Psi_e\rangle = H_e(x, q) |\Psi_e\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 + \langle \Psi_N | V(x, q) |\Psi_N\rangle \right) |\Psi_e\rangle \quad (\text{B.1.5})$$

$$i\hbar \left| \dot{\Psi}_N \right\rangle = \langle \Psi_e | \left(\hat{H}_e + \hat{H}_N \right) | \Psi_e \rangle | \Psi_N \rangle = H_N(x, q) | \Psi_N \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_q^2 + \langle \Psi_e | V(x, q) | \Psi_e \rangle \right) | \Psi_N \rangle \quad (\text{B.1.6})$$

B.2. Expansión en serie WKB

En primer lugar, esta se escribirá en función de la acción como una exponencial:

$$\Psi_N(q, t) = A(q, t) \exp \left(i \frac{S(q, t)}{\hbar} \right) \quad (\text{B.2.1})$$

A continuación, dada la complejidad de la acción como función analítica, estase desarrolla como una serie de potencias de la constante de Planck, \hbar .

$$S(q, t) = S_0(q, t) + S_1(q, t)\hbar + S_2(q, t)\hbar^2 + S_3(q, t)\hbar^3 + \dots \quad (\text{B.2.2})$$

Al considerar que el término de orden cero es dominante en la expansión en serie de la acción, es posible expresar la función de onda nuclear como la exponencial de dicho término más el resto de contribuciones en forma de infinitésimo.

$$\Psi_N(q, t) = A(q, t) \exp \left(i \frac{S_0(q, t)}{\hbar} \right) + \mathcal{O} \left(\sqrt{\frac{m}{M}} \right) \quad (\text{B.2.3})$$

Al introducir dicha expresión en la función de Schrödiner para la función de onda nuclear 2.0.6, se obtiene que la acción sigue una ecuación del tipo Hamilton-Jacobi y la amplitud una ecuación de continuidad.

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2M} \nabla_q^2 S_0 + \langle \Psi_e | V(x, q) | \Psi_e \rangle = 0 \quad (\text{B.2.4})$$

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} + \nabla_q \left(A^2 \frac{\nabla_q S_0}{M} \right) = 0 \quad (\text{B.2.5})$$

Apéndice C

Datos adicionales del ejemplo particular

C.1. Espacio de fases clásico computacional

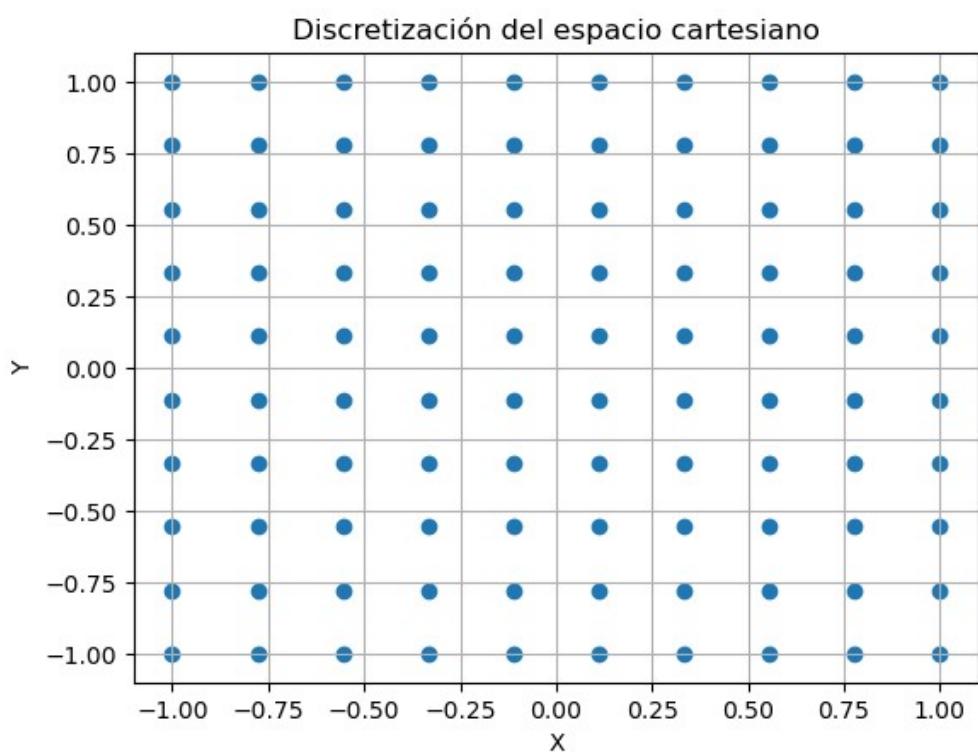


Figura C.1.1: Discretización del espacio de fases clásico para cálculo numérico

C.2. Caso 1

C.2.1. Entropía de Rényi con parámetro $\alpha = 2$

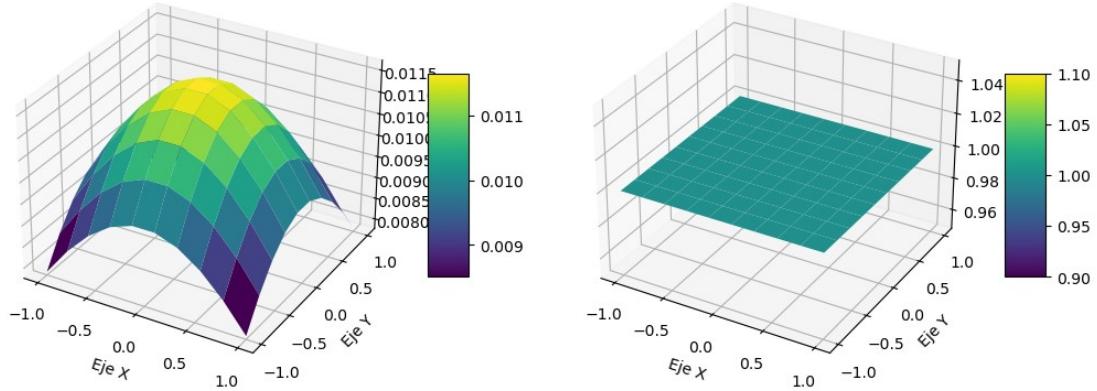


Figura C.2.1: F_C y pureza a tiempo $t = 0$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

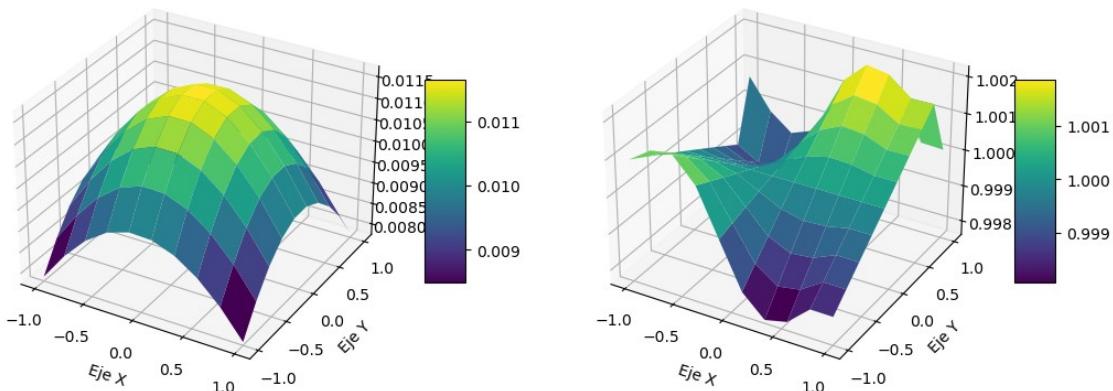


Figura C.2.2: F_C y pureza a tiempo $t = 1$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

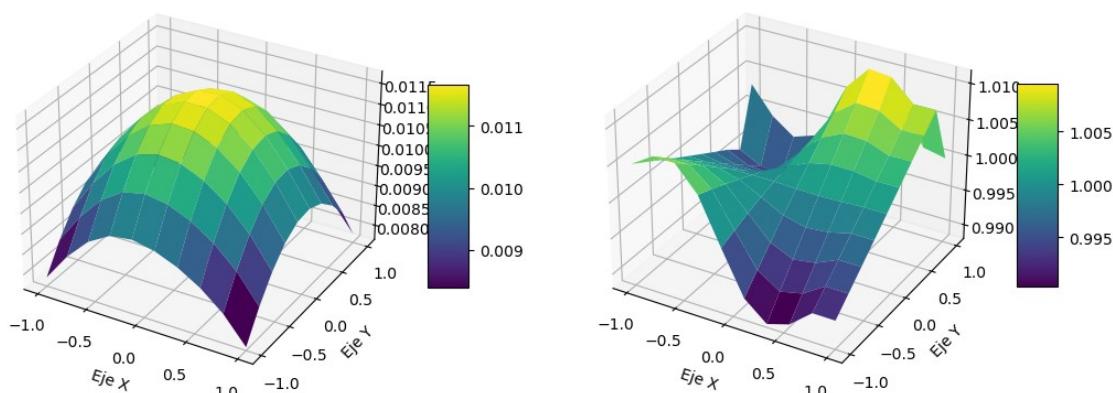


Figura C.2.3: F_C y pureza a tiempo $t = 5$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

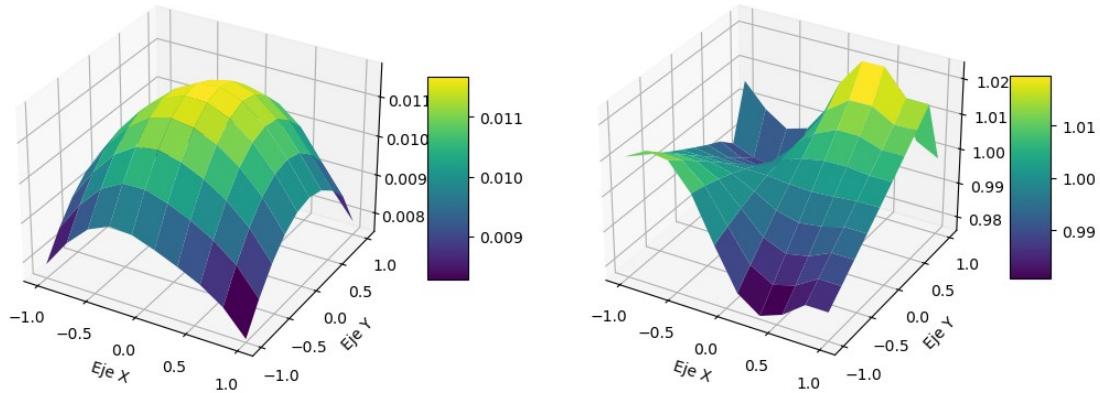


Figura C.2.4: F_C y pureza a tiempo $t = 10$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

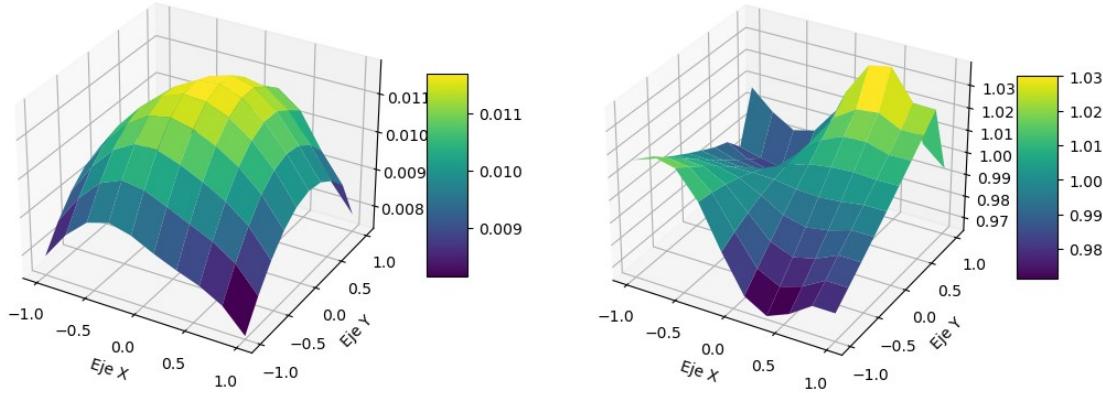


Figura C.2.5: F_C y pureza a tiempo $t = 15$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

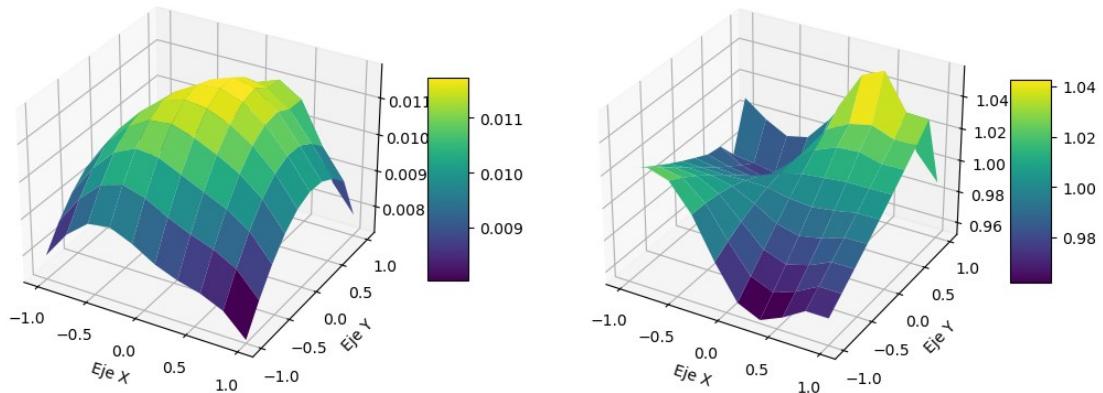
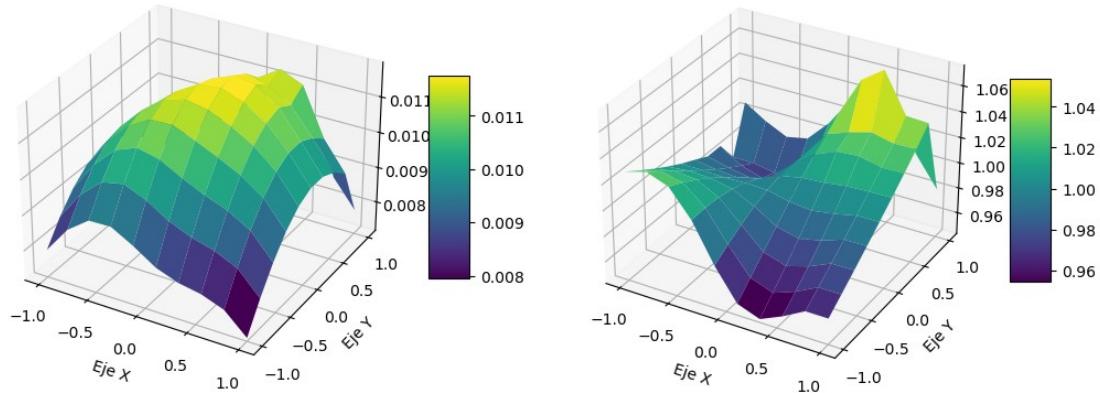
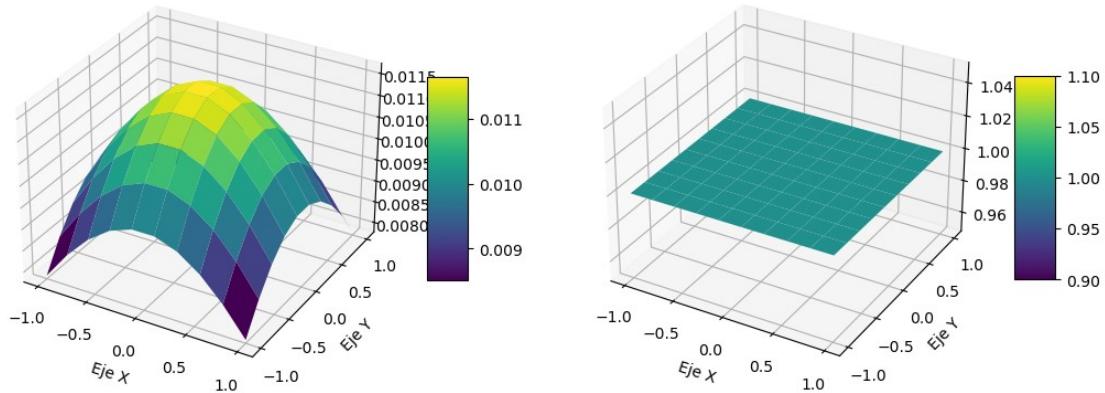
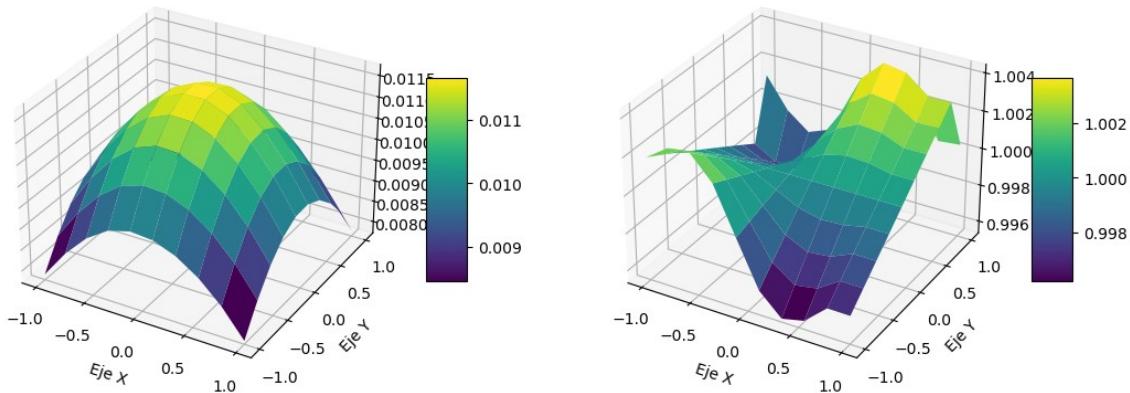


Figura C.2.6: F_C y pureza a tiempo $t = 20$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

Figura C.2.7: F_C y pureza a tiempo $t = 24$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

C.2.2. Entropía de Rényi con parámetro $\alpha = \frac{7}{4}$

Figura C.2.8: F_C y pureza a tiempo $t = 0$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{7}{4}$ Figura C.2.9: F_C y pureza a tiempo $t = 1$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{7}{4}$

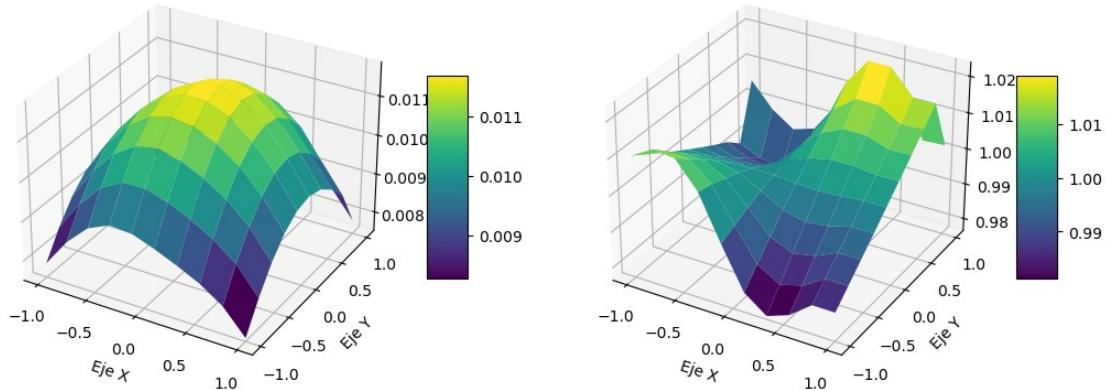


Figura C.2.10: F_C y pureza a tiempo $t = 5$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{7}{4}$

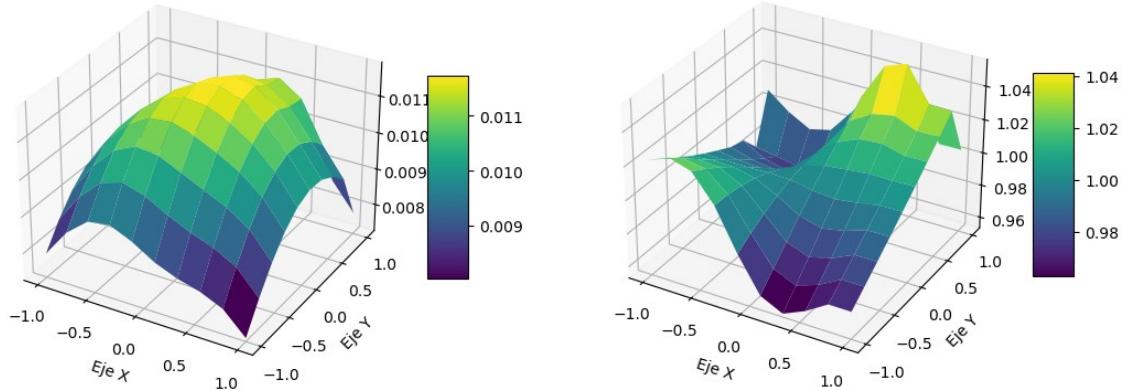


Figura C.2.11: F_C y pureza a tiempo $t = 10$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{7}{4}$

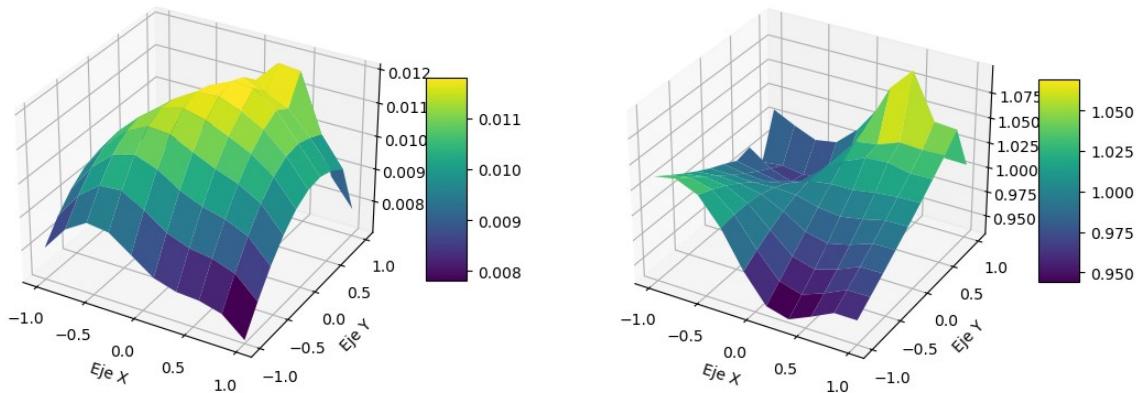


Figura C.2.12: F_C y pureza a tiempo $t = 15$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{7}{4}$

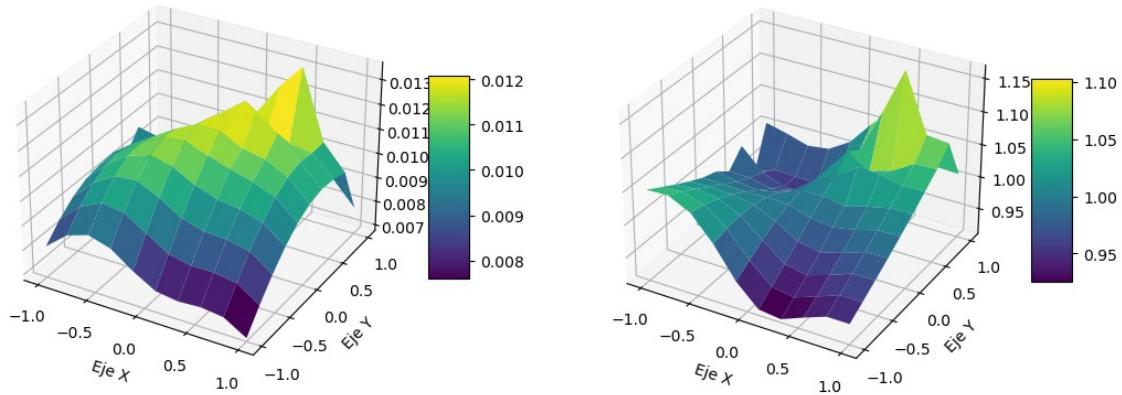


Figura C.2.13: F_C y pureza a tiempo $t = 20$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{7}{4}$

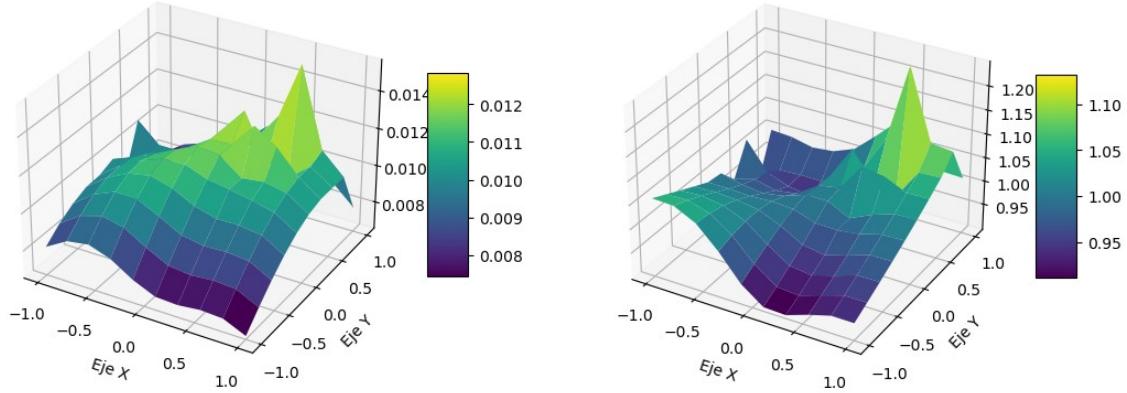


Figura C.2.14: F_C y pureza a tiempo $t = 24$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{7}{4}$

C.2.3. Entropía de Rényi con parámetro $\alpha = \frac{3}{2}$

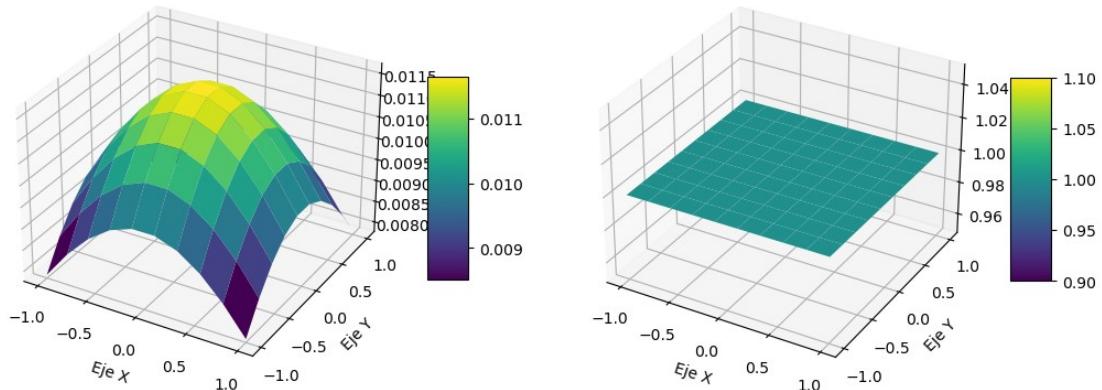


Figura C.2.15: F_C y pureza a tiempo $t = 0$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{3}{2}$

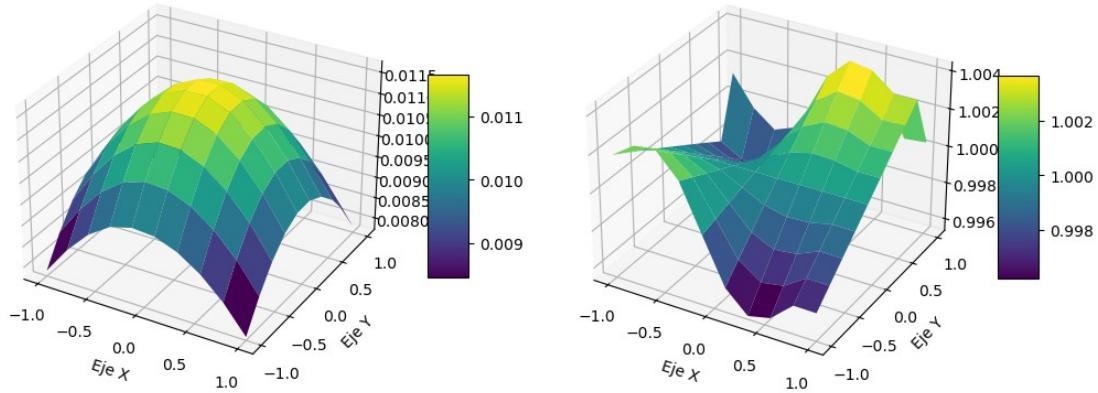


Figura C.2.16: F_C y pureza a tiempo $t = 1$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{3}{2}$

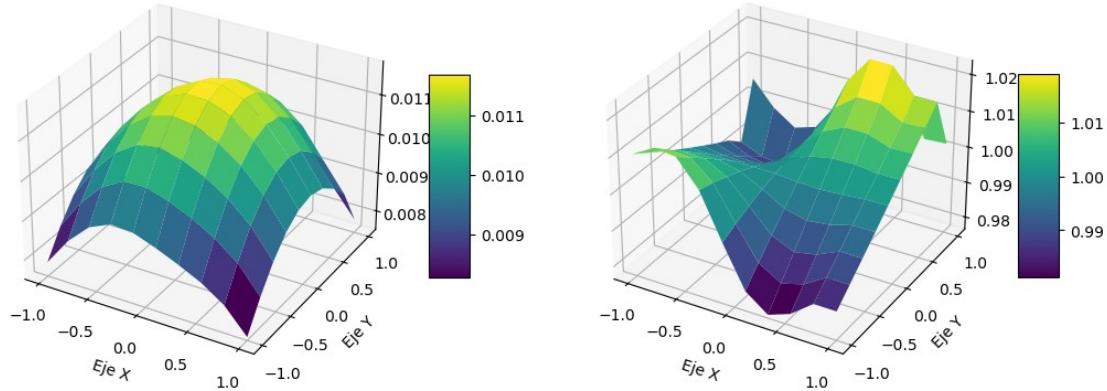


Figura C.2.17: F_C y pureza a tiempo $t = 5$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{3}{2}$

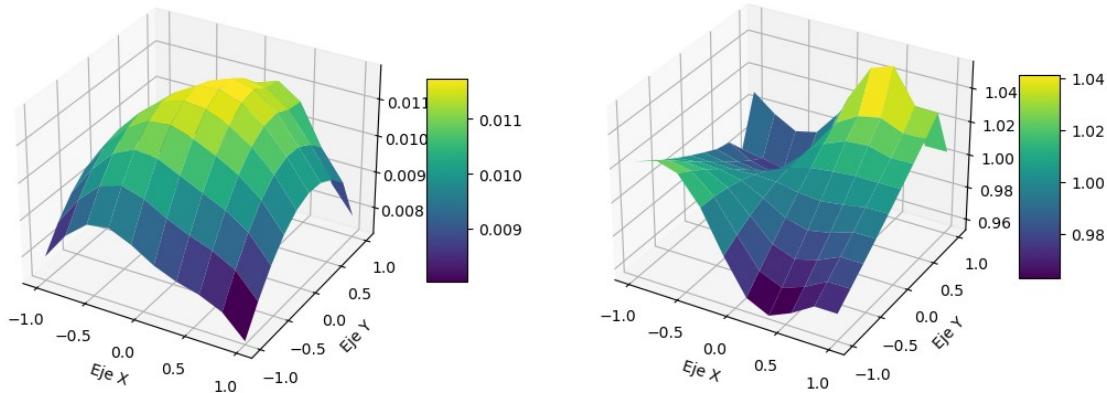


Figura C.2.18: F_C y pureza a tiempo $t = 10$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{3}{2}$

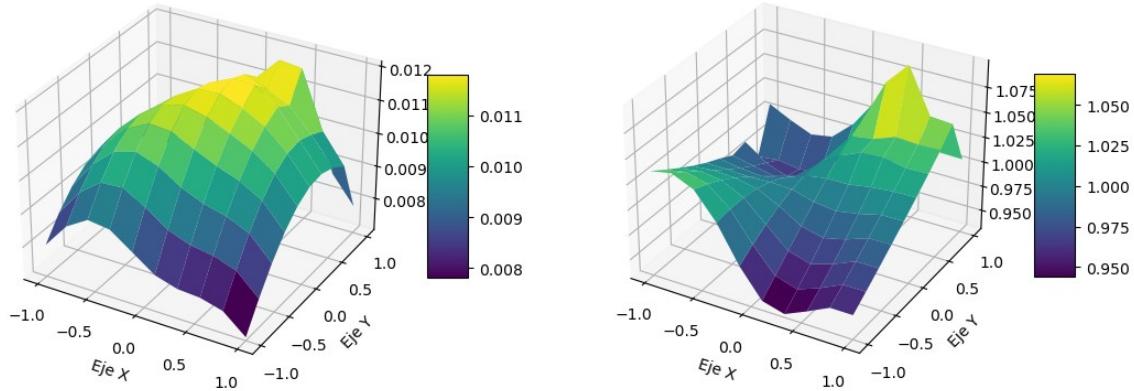


Figura C.2.19: F_C y pureza a tiempo $t = 15$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{3}{2}$

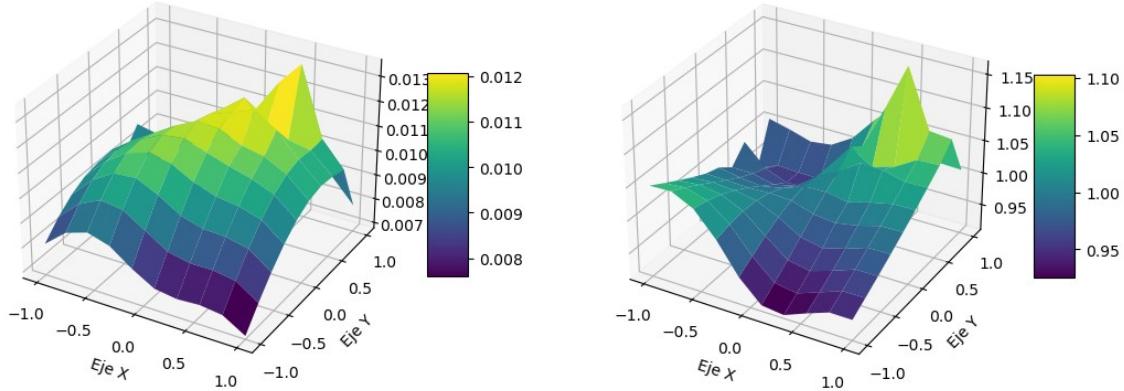


Figura C.2.20: F_C y pureza a tiempo $t = 20$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{3}{2}$

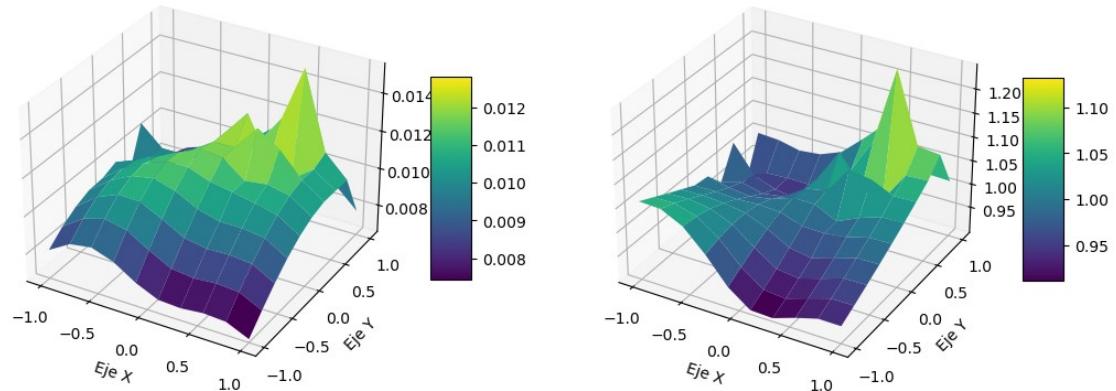


Figura C.2.21: F_C y pureza a tiempo $t = 24$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{3}{2}$

C.2.4. Entropía de Rényi con parámetro $\alpha = \frac{5}{4}$

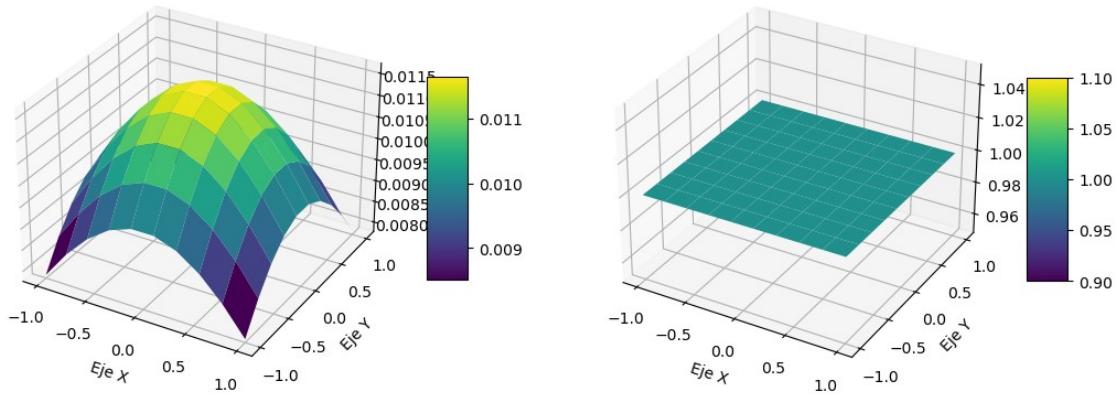


Figura C.2.22: F_C y pureza a tiempo $t = 0$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{5}{4}$

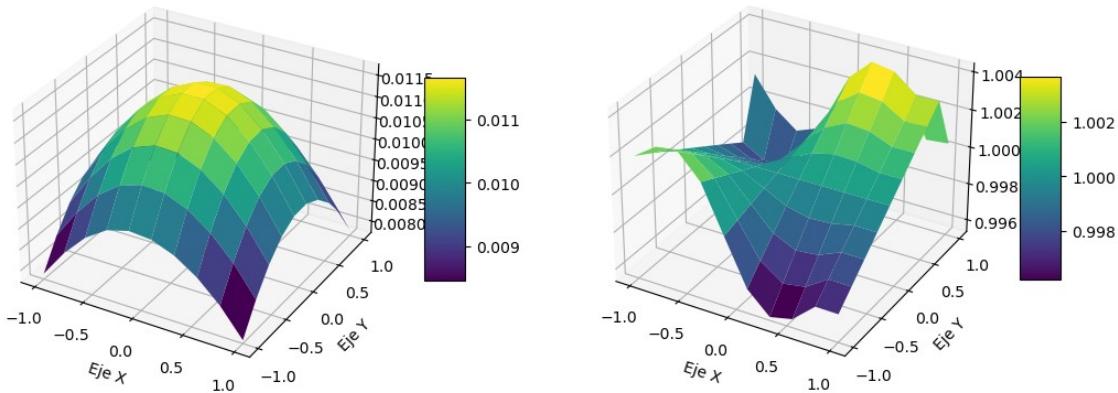


Figura C.2.23: F_C y pureza a tiempo $t = 1$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{5}{4}$

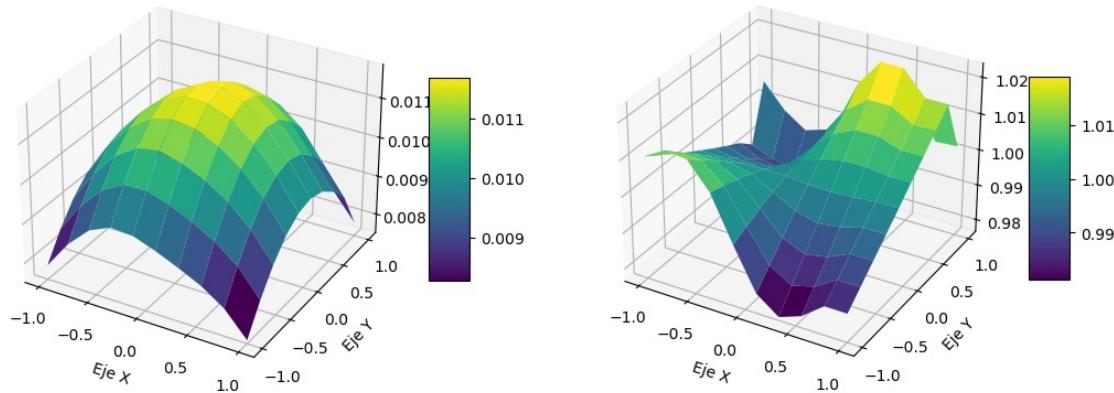


Figura C.2.24: F_C y pureza a tiempo $t = 5$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{5}{4}$

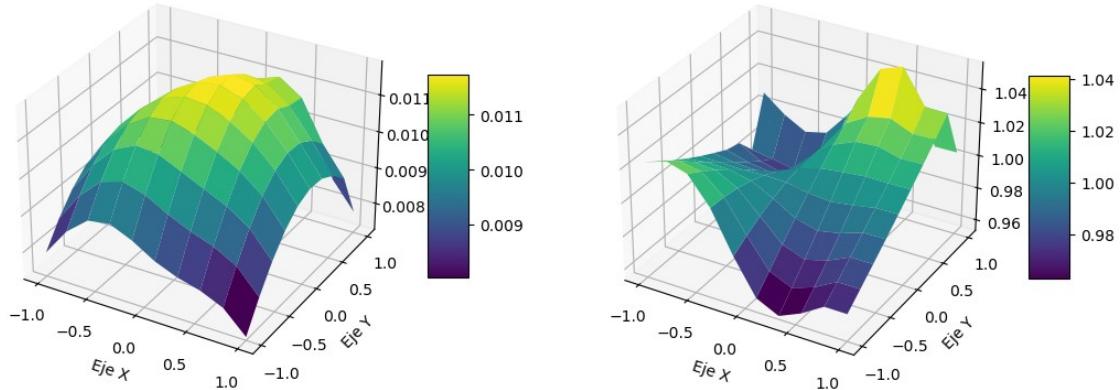


Figura C.2.25: F_C y pureza a tiempo $t = 10$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{5}{4}$

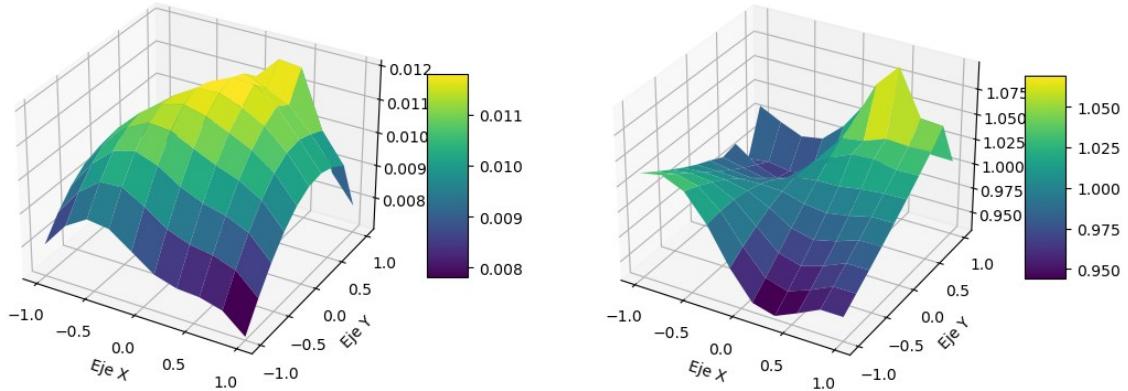


Figura C.2.26: F_C y pureza a tiempo $t = 15$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{5}{4}$

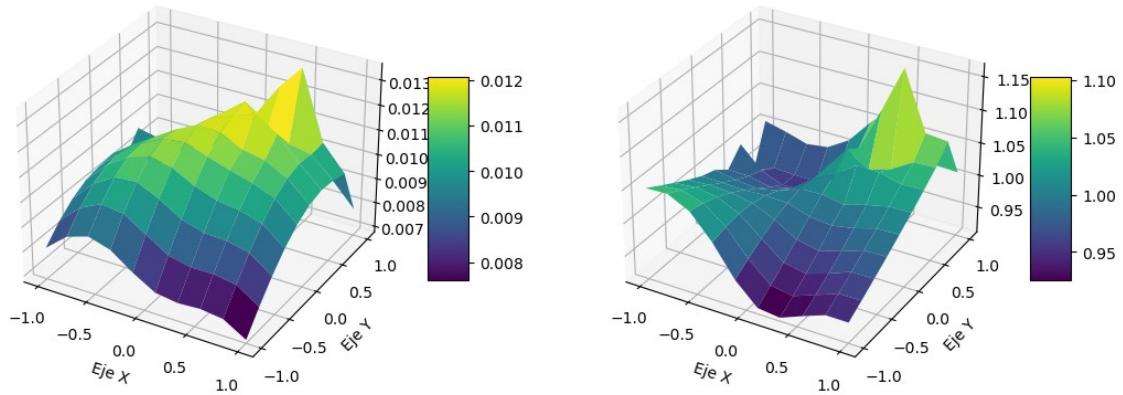


Figura C.2.27: F_C y pureza a tiempo $t = 20$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{5}{4}$

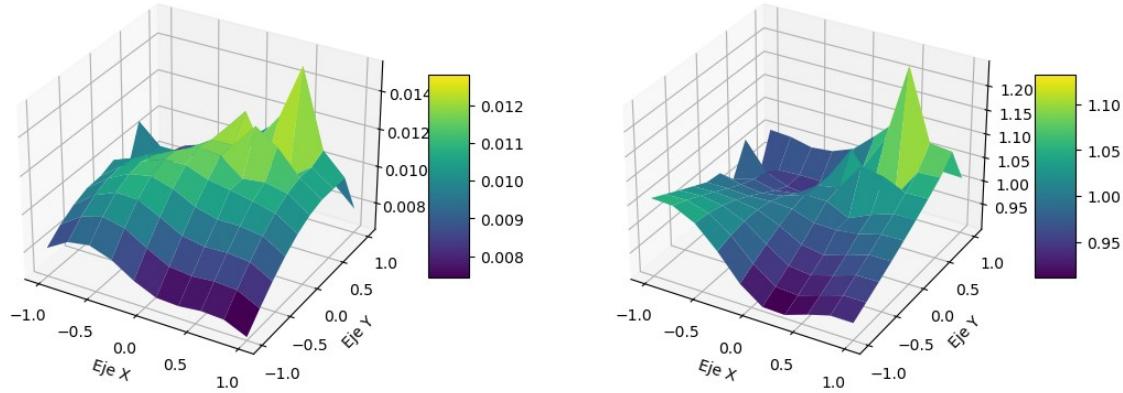


Figura C.2.28: F_C y pureza a tiempo $t = 24$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = \frac{5}{4}$

C.2.5. Aproximación lineal de la entropía de Von Neumann

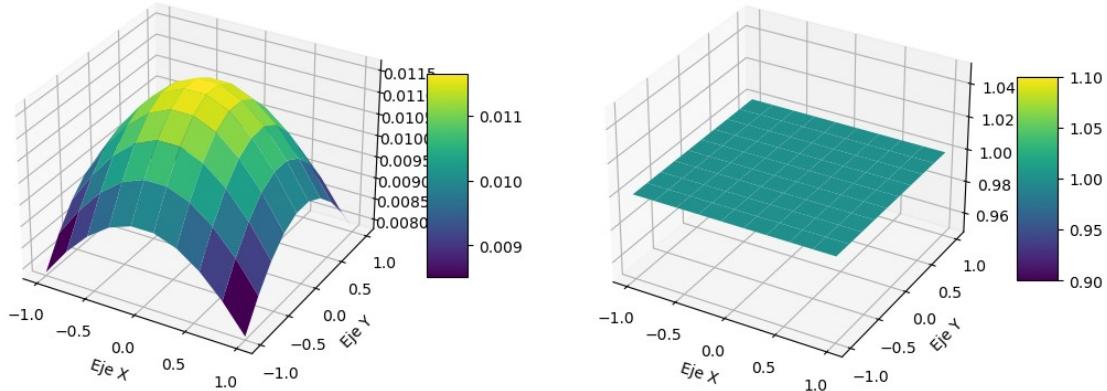


Figura C.2.29: F_C y pureza a tiempo $t = 0$ considerando la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann

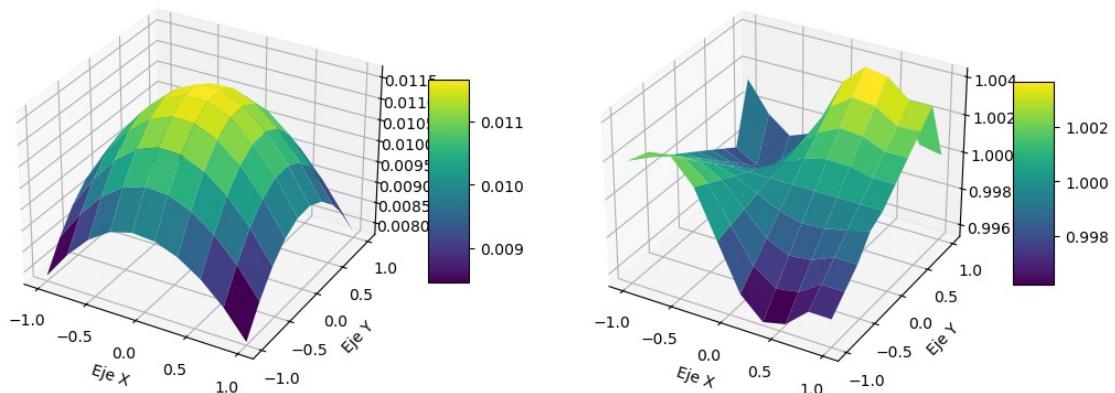


Figura C.2.30: F_C y pureza a tiempo $t = 1$ considerando la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann

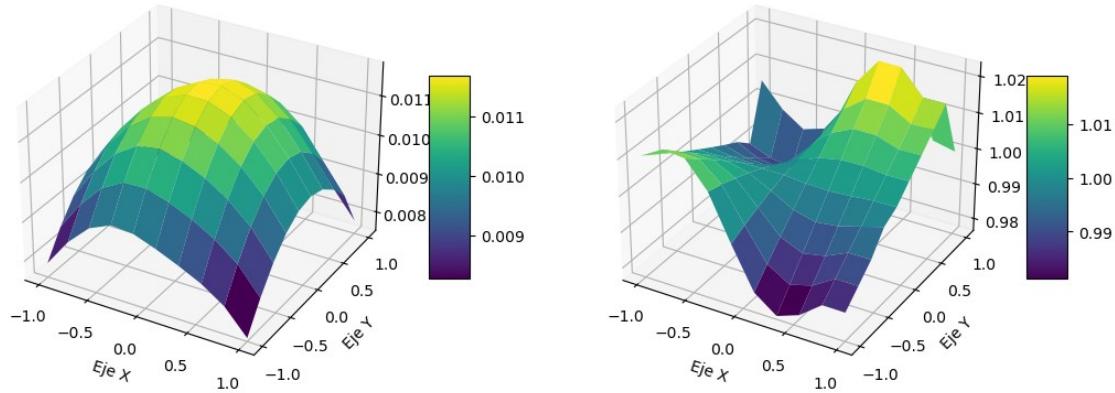


Figura C.2.31: F_C y pureza a tiempo $t = 5$ considerando la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann

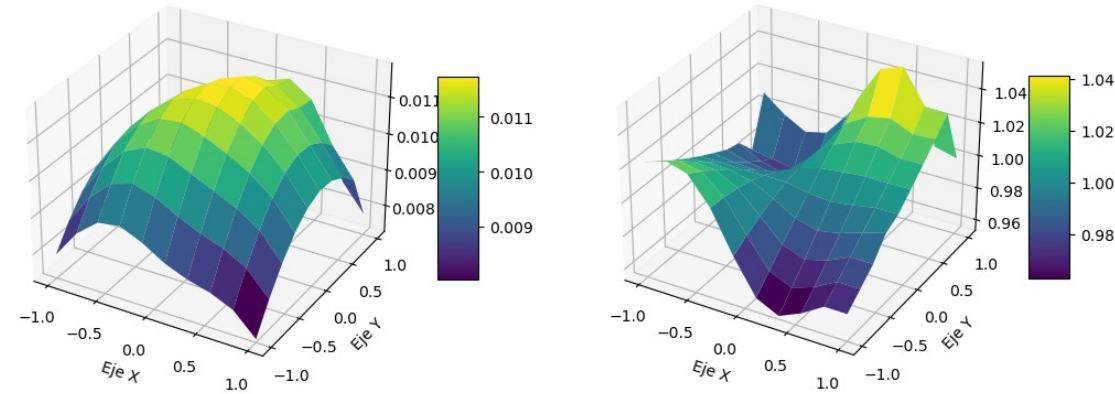


Figura C.2.32: F_C y pureza a tiempo $t = 10$ considerando la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann

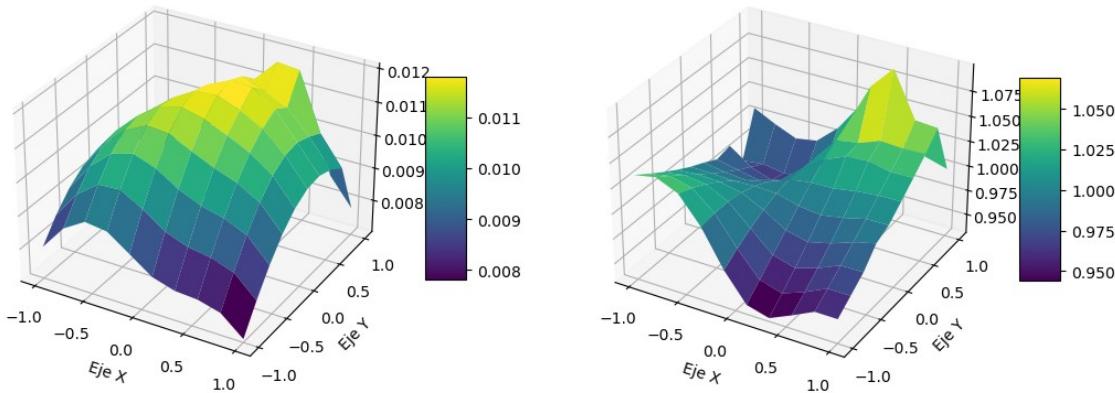


Figura C.2.33: F_C y pureza a tiempo $t = 15$ considerando la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann

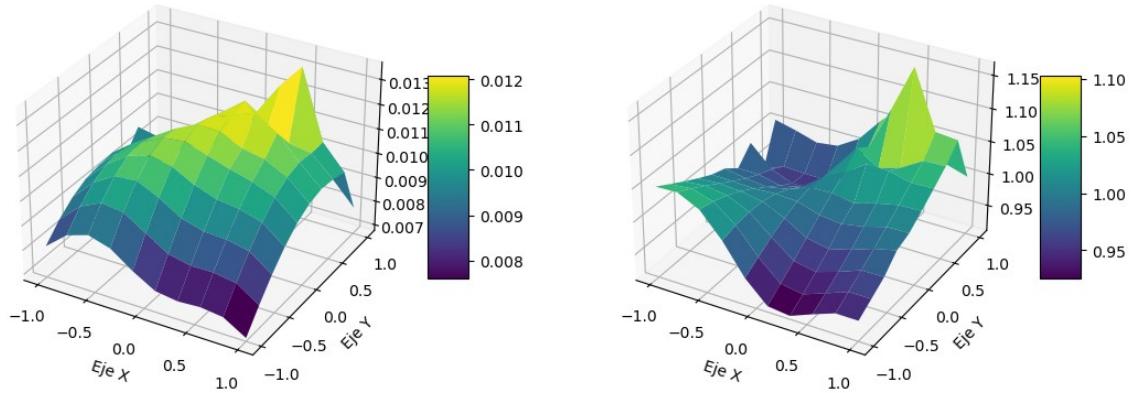


Figura C.2.34: F_C y pureza a tiempo $t = 20$ considerando la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann

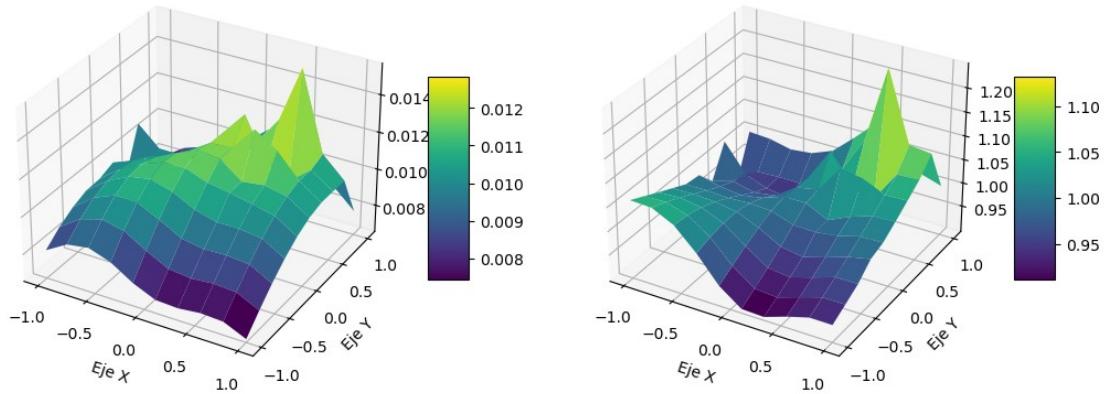


Figura C.2.35: F_C y pureza a tiempo $t = 24$ considerando la aproximación lineal de la entropía de Von Neumann

C.3. Caso 2

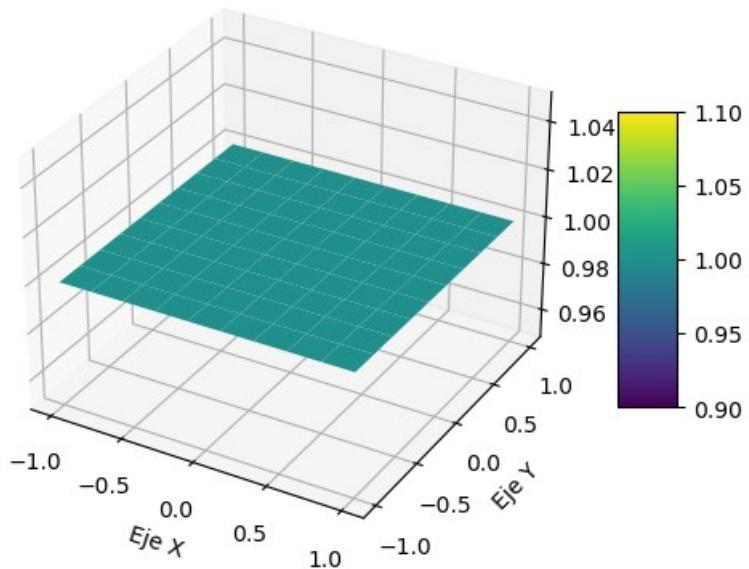


Figura C.3.1: Pureza del caso 2 a tiempo $t = 0$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

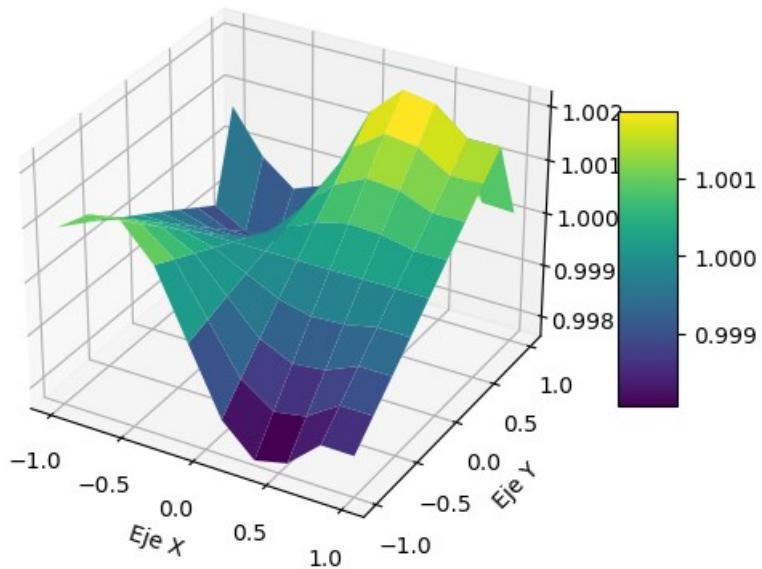


Figura C.3.2: Pureza del caso 2 a tiempo $t = 1$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

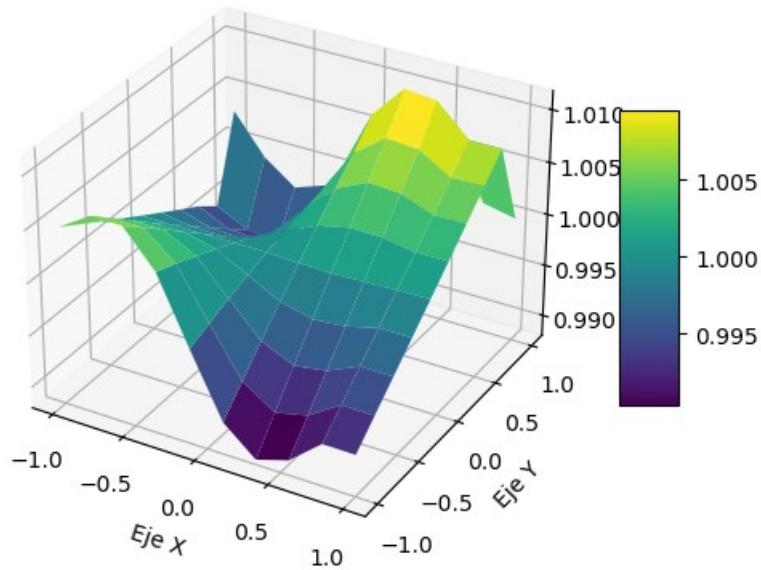


Figura C.3.3: Pureza del caso 2 a tiempo $t = 5$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

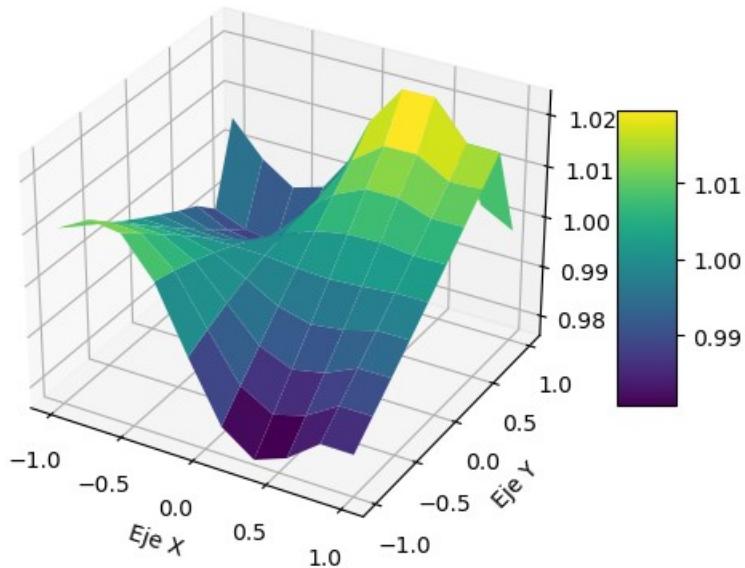


Figura C.3.4: Pureza del caso 2 a tiempo $t = 10$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

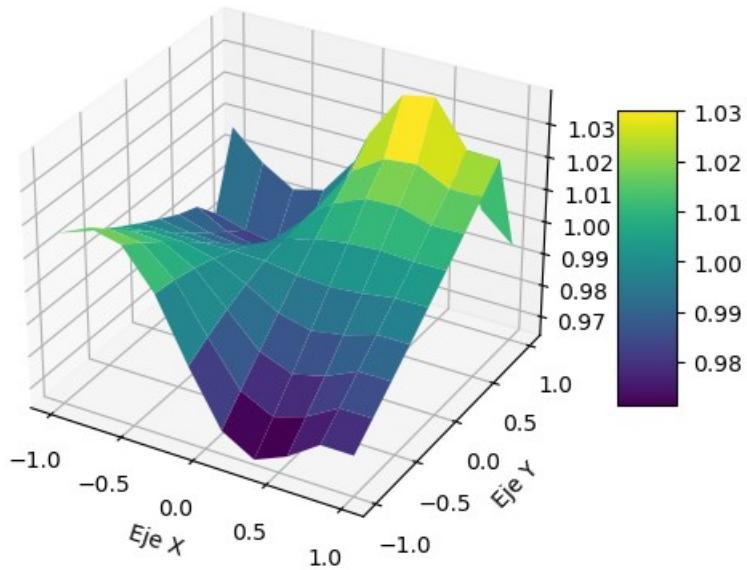


Figura C.3.5: Pureza del caso 2 a tiempo $t = 15$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

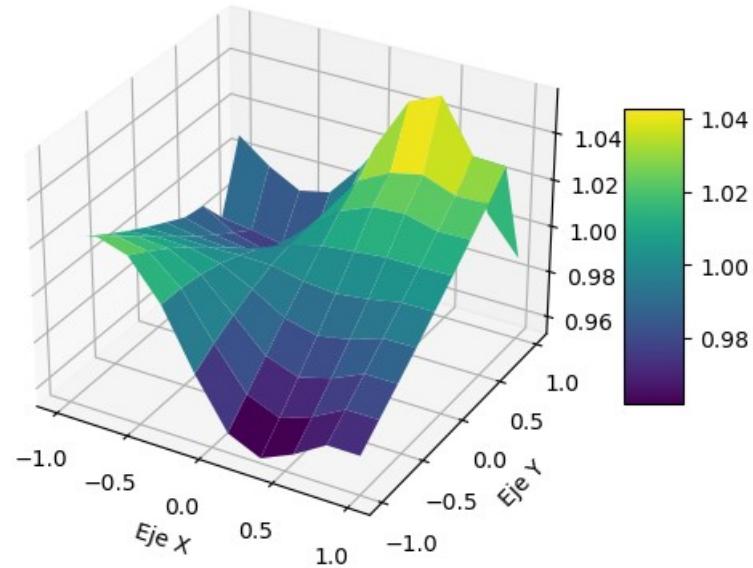


Figura C.3.6: Pureza del caso 2 a tiempo $t = 20$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

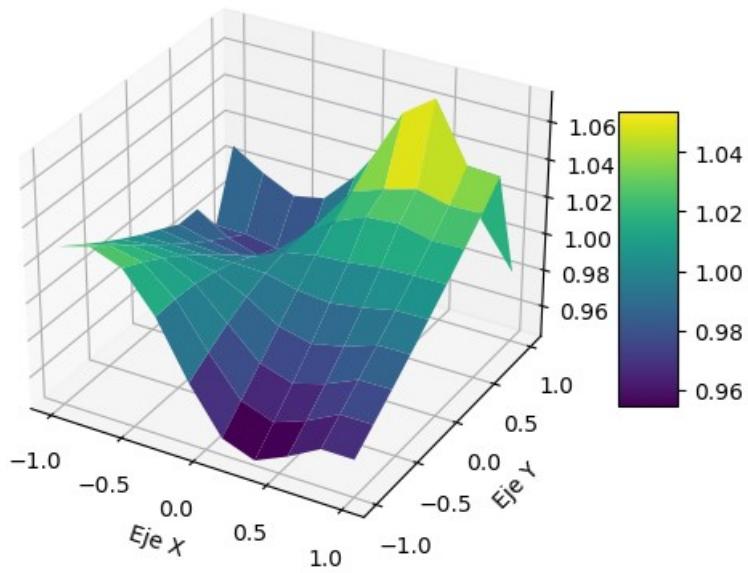


Figura C.3.7: Pureza del caso 2 a tiempo $t = 24$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

C.4. Caso 3

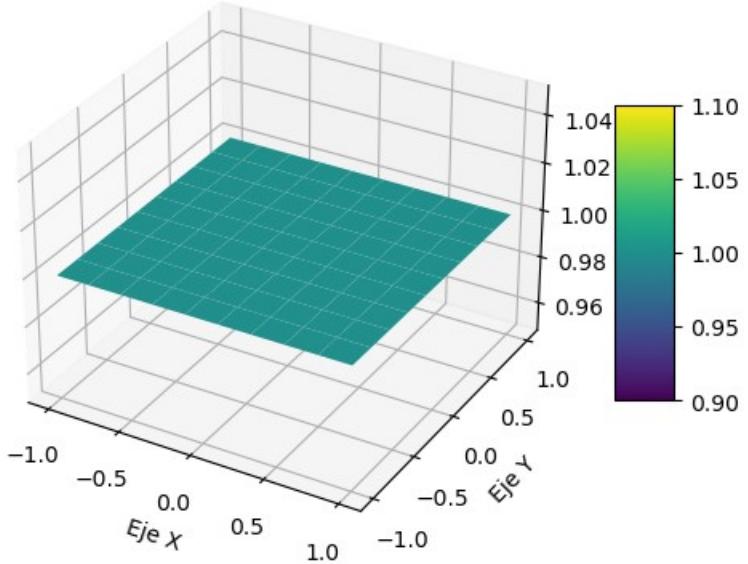


Figura C.4.1: Pureza del caso 3 a tiempo $t = 0$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

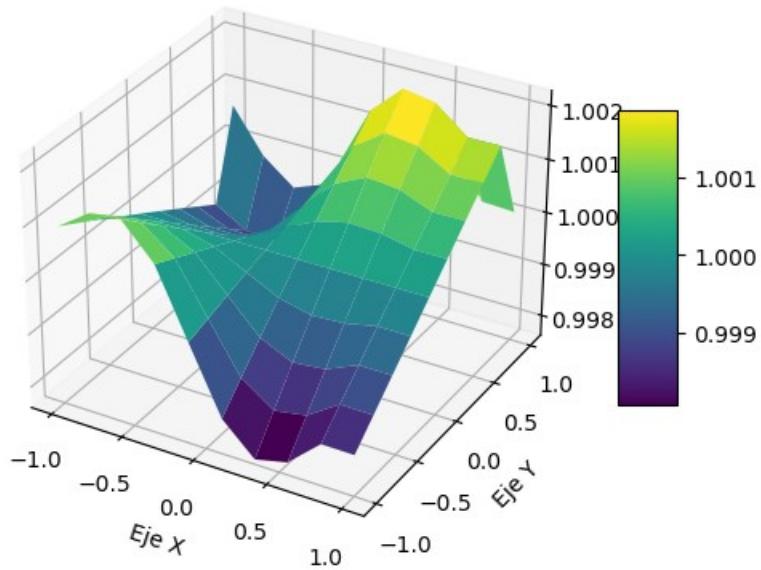


Figura C.4.2: Pureza del caso 3 a tiempo $t = 1$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

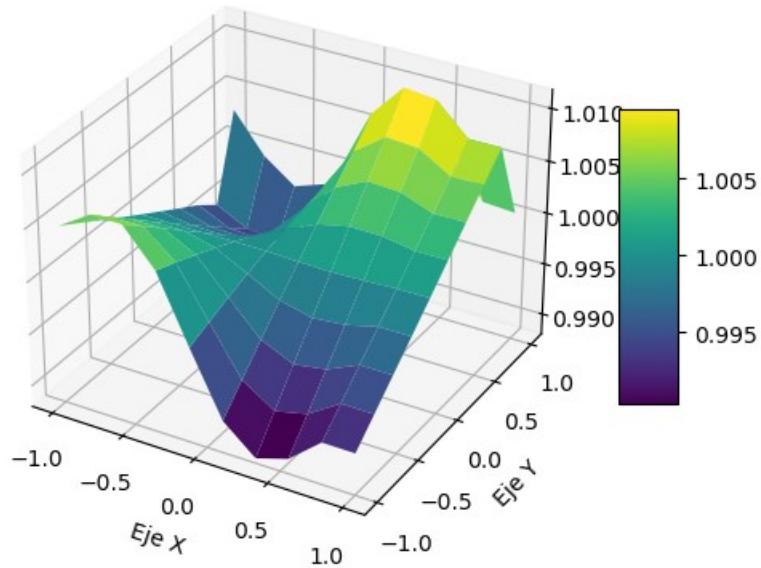


Figura C.4.3: Pureza del caso 3 a tiempo $t = 5$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

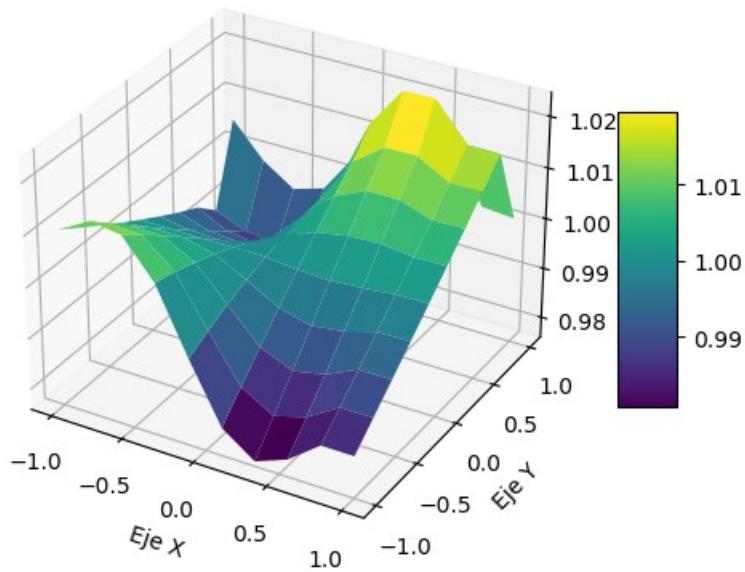


Figura C.4.4: Pureza del caso 3 a tiempo $t = 10$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

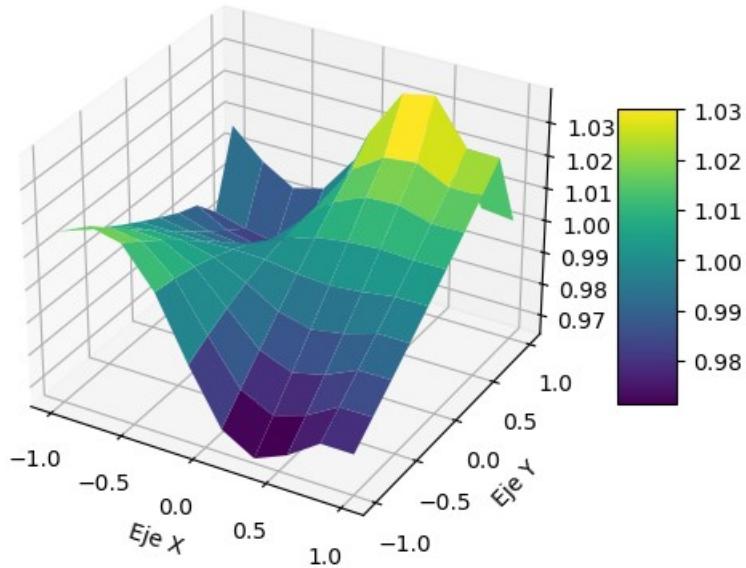


Figura C.4.5: Pureza del caso 3 a tiempo $t = 15$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

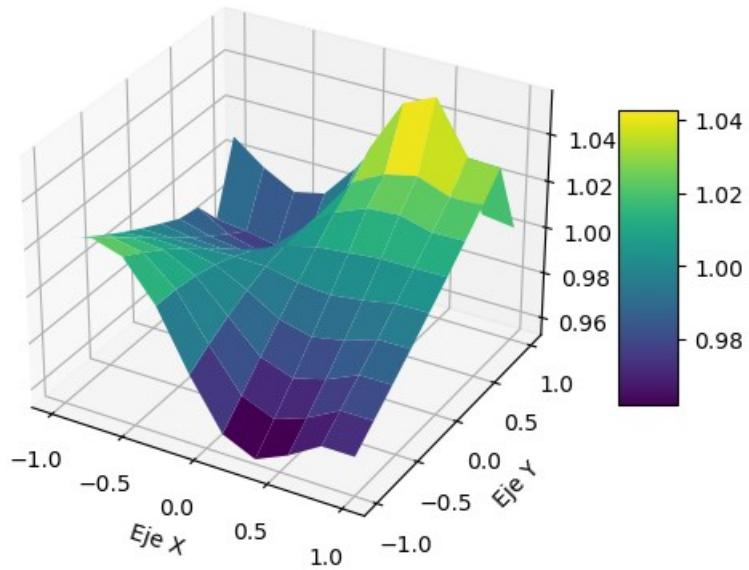


Figura C.4.6: Pureza del caso 3 a tiempo $t = 20$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

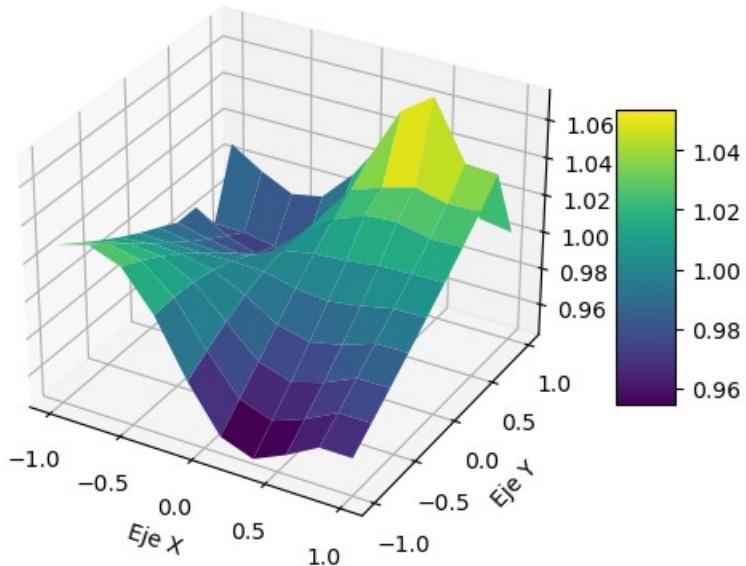


Figura C.4.7: Pureza del caso 3 a tiempo $t = 24$ considerando entropía de Rényi con $\alpha = 2$

Apéndice D

Código de la simulación computacional

A continuación se deja un enlace a Github donde se recoge el código empleado para construir las simulaciones de este trabajo de fin de grado, se advierte de que los tiempos de compilado son largos, 40 minutos como mínimo.

<https://github.com/Achertron/TFG>