

Universidad de Zaragoza
Grado en Física

CURSO 2023/2024

TRABAJO DE FIN DE GRADO

**El formalismo de Koopman en la dinámica
de sistemas híbridos clásico-cuánticos**

Autora

María del Carmen García Muñoz

Tutor

Jesús Clemente Gallardo



Universidad
Zaragoza

Índice general

1. Introducción	1
2. Marco teórico	4
2.1. El formalismo de Koopman en mecánica clásica	4
2.2. Dinámica Markoviana	8
3. Dinámica de los sistemas híbridos	11
3.1. Dinámica unitaria	12
3.2. Dinámica Lindbladiana	14
4. Implementación numérica	16
4.1. Descripción del sistema	16
4.2. Ejemplo 1	18
4.3. Ejemplo 2	18
4.4. Ejemplo 3	21
4.5. Ejemplo 4	22
5. Conclusiones	24
A. Formalismo geométrico de la mecánica clásica	26
A.1. Fibrados cotangentes	26
A.2. Variedades simplécticas	27
B. C^*-álgebras y construcción GNS	30
B.1. C^* -álgebra clásica	30
B.2. Representación de la C^* -álgebra cuántica	31

B.3. C^* -álgebra híbrida	31
C. Ecuación maestra de Lindblad	33
C.1. Aproximaciones	33
C.2. Forma general de la ecuación de Lindblad	35
D. Cierre del álgebra en la dinámica Lindbladiana	39
E. Aproximación finita del espacio de Hilbert clásico	42
E.1. Ejemplo 1	43
E.2. Ejemplo 2	44
E.3. Ejemplo 3	45
E.4. Ejemplo 4	47
F. Definiciones y resultados matemáticos auxiliares	48
F.1. Geometría diferencial	48
F.2. C^* -álgebras y representaciones	49
F.3. Teoría de la medida	50
F.4. Otros resultados	51

CAPÍTULO 1

Introducción

Un sistema híbrido es aquel formado por dos subsistemas acoplados, uno clásico y otro cuántico; y generalmente procede de tomar un límite parcial clásico de un sistema físico puramente cuántico. Esta aproximación de ciertos grados de libertad cuánticos a variables clásicas tiene su aplicación en la descripción de sistemas moleculares. En ellos, se puede tomar una aproximación clásica para modelizar la dinámica del núcleo y los electrones de capas más internas, al ser un sistema de masa considerablemente mayor y velocidad inferior que el formado por los electrones más externos, cuyos grados de libertad se tratan cuánticamente. El problema de encontrar una dinámica que describa estos sistemas considerando todos los grados de libertad cuánticos es especialmente complejo y las simulaciones resultan imposibles con ordenadores actuales. Además, el límite completamente clásico a través de la aproximación de Born-Oppenheimer no es adecuado en aquellos procesos donde la aproximación adiabática no es válida. Es por esto que modelizar los sistemas moleculares como sistemas híbridos supone una simplificación del sistema original que permitirá considerar dinámicas relativamente sencillas para describir el sistema, de forma que la desviación con respecto a la dinámica real sea inferior a la correspondiente a la aproximación puramente clásica.

Si bien existen diversos formalismos, el tratamiento matemático más general de la mecánica clásica está escrito en términos de geometría diferencial: los espacios de fases se corresponden con variedades de Poisson y la dinámica es solución de las ecuaciones de Hamilton (ver *Apéndice A*). Por el contrario, la mecánica cuántica está usualmente descrita por funciones en espacios de Hilbert mediante la ecuación de Schrödinger o por operadores en C^* -álgebras mediante la ecuación de Heisenberg. Para modelizar matemáticamente la dinámica híbrida, es preciso poder describir los grados de libertad clásicos y cuánticos a través del mismo formalismo matemático.

Una posible vía para solucionar esta incompatibilidad entre formalismos consiste en la transformación del espacio de Hilbert complejo en un espacio real de dimensión doble con una serie de ligaduras, de forma que es posible establecer un paréntesis de Poisson que permite transformar la ecuación de Schrödinger en un conjunto de ecuaciones hamiltonianas y construir así las ecuaciones de Ehrenfest en una variedad de Poisson [1]. Este tratamiento matemático clásico de los grados de libertad cuánticos permite describir geométricamente el sistema híbrido como producto cartesiano de los espacios de fases clásico y cuántico ($\mathcal{M}_H = \mathcal{M}_C \times \mathcal{M}_Q$), construyendo un paréntesis de Poisson a partir de los relativos a cada uno de los espacios independientes y estableciendo así un conjunto de ecuaciones de Ehrenfest globales acopladas. Éstas serán lineales en grados de libertad cuánticos y no lineales en grados de libertad clásicos. Además, el acople permite recuperar parte

del entrelazamiento perdido al suponer inicialmente los espacios cuántico y clásico dos sistemas desacoplados, de forma que la dinámica clásica afecta a la cuántica y viceversa.

Al tratar de realizar un tratamiento estadístico [2] considerando el espacio de fases descrito anteriormente, es precisa una definición de entropía del sistema híbrido. El Hamiltoniano y tensor de Poisson híbridos construidos permiten la definición de una función densidad de probabilidad F_H de forma análoga a la definida en mecánica estadística clásica, que debe satisfacer la ecuación de Liouville. Esto permite asociar al sistema una entropía de Gibbs:

$$S_G[F_H] = -k_B \int_{\mathcal{M}_H} d\mu_H(\xi, \rho_\psi) F_H(\xi, \rho_\psi) \log[F_H(\xi, \rho_\psi)] \quad (1.1)$$

con $(\xi, \rho_\psi) \in \mathcal{M}_C \otimes \mathcal{M}_Q$ puntos del espacio de fases y $d\mu_H = d\mu_C \wedge d\mu_Q$ la medida en el espacio de fases híbrido. El problema con esta definición es que los elementos de \mathcal{M}_Q no definen eventos mutuamente excluyentes (excepto aquellos estados que sean ortogonales), de forma que la medida sobre los subsistemas cuánticos no es correcta y las medidas físicas sobre el sistema resultan erróneas. Otra vía para la construcción de una función entropía consiste en considerar una matriz densidad híbrida $\hat{\rho}(\xi)$ (detalles acerca de su construcción matemática se pueden encontrar en [2]). Esto permite construir una entropía basada en la de von Neumann de la forma

$$S[\hat{\rho}(\xi)] = -k_B \int_{\mathcal{M}_C} d\mu_C(\xi) \text{Tr}[\hat{\rho}(\xi) \log \hat{\rho}(\xi)] \quad (1.2)$$

que se reduce a la entropía de von Neumann cuando el subsistema clásico es puro y a la función clásica de la entropía cuando el subsistema cuántico es puro. Con esta función es posible aplicar el principio de máxima entropía y hallar el *ensemble* que la maximice. Sin embargo, no es tan trivial asegurar la existencia de una dinámica que tenga este macroestado como punto de equilibrio.

Si bien es posible seguir trabajando en la línea descrita anteriormente para la descripción de los sistemas híbridos, utilizando modelos formalmente clásicos para estudiar el subsistema cuántico, existe otra línea de investigación abierta que se basa en tratar el subsistema clásico con el formalismo matemático característico de la mecánica cuántica. Esta construcción se basa en el formalismo de Koopman [3], que permite describir los estados clásicos como elementos de espacios de Hilbert, así como transformar la ecuación de Liouville que rige la mecánica estadística clásica en una ecuación de tipo Schrödinger sobre los elementos de dicho espacio de Hilbert. Esta formulación permite la construcción de una C^* -álgebra de observables clásicos (\mathcal{A}_C), cuya representación en el conjunto de los operadores lineales acotados sobre el espacio de los estados ($\pi_C(\mathcal{A}_C)$) es un álgebra commutativa. Además, la dinámica de estos operadores debe venir dada por un automorfismo externo. El formalismo matemático tras esta deducción se justificará rigurosamente en capítulos posteriores.

Se definirá, asimismo, la C^* -álgebra de observables híbridos como el producto tensorial de las C^* -álgebras clásica y cuántica ($\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$), quedando fijado el conjunto de estados híbridos como su espacio dual. Se considerarán dinámicas lineales sobre la representación de los observables híbridos en el conjunto de operadores lineales acotados, $\pi_H(\mathcal{A}_H) \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$:

$$\frac{d\pi_H(f)(t)}{dt} = \mathcal{L}\pi_H(f)(t) \quad \forall f \in \mathcal{A}_H \quad (1.3)$$

con $\mathcal{L} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$. Para que la evolución sea no trivial, \mathcal{L} será un elemento externo al álgebra de operadores, pero debe mantener el álgebra invariante: $\mathcal{L}(\pi_H(\mathcal{A}_H)) \subset \pi_H(\mathcal{A}_H)$. Esta condición impone ligaduras sobre las diferentes dinámicas consideradas. Alternativamente, esta dinámica se puede traducir a la imagen de Schrödinger sobre los estados, representados como elementos del conjunto de matrices densidad $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$.

En [4] se establecen las condiciones que debe satisfacer una dinámica unitaria y se concluye que no existe lo que se denomina *back-reaction*, esto es, la dinámica de la parte cuántica no afecta a la clásica. Se conoce que este fenómeno sucede experimentalmente en las moléculas, sistema físico que se trata de describir. Por tanto, es preciso encontrar dinámicas no unitarias más generales que conduzcan a una descripción más precisa del sistema físico. En este trabajo se tratará principalmente con dinámicas Markovianas o Lindbladianas.

El objetivo global es poder estudiar termodinámicamente los sistemas híbridos. Para ello, en [4] se describe la entropía híbrida como la entropía de von Neumann sobre las matrices densidad híbridas

$$S_{vN}(\hat{\rho}_H) = -Tr(\hat{\rho}_H \log \hat{\rho}_H), \quad \hat{\rho}_H \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q) \quad (1.4)$$

la cual se prueba que es equivalente a (1.2). La aplicación del formalismo de máxima entropía permite encontrar el *ensemble* canónico híbrido. El problema de encontrar una dinámica híbrida que satisfaga las condiciones enunciadas y tenga como punto fijo estable el *ensemble* descrito en [4], tiene utilidad en la modelización de sistemas estadísticos híbridos a temperatura finita. Este trabajo se limitará a un estudio sobre las características que debe cumplir la dinámica Lindbladiana para estar bien definida sobre el sistema híbrido, dejando como trabajo futuro la verificación de si estas dinámicas dejan invariante el *ensemble* canónico híbrido.

En el *Capítulo 2*, se dará una descripción formal de las deducciones de Koopman y su aplicación a los sistemas híbridos. Asimismo, se caracterizará la forma general de las dinámicas Markovianas, contextualizando su aplicación física. En el *Capítulo 3*, se determinarán las condiciones que deben cumplir las dinámicas unitaria y Lindbladiana para preservar el álgebra de operadores, estableciendo el rango de posibles dinámicas en las que puede existir *back-reaction*. Finalmente, en el *Capítulo 4* se mostrarán una serie de ejemplos implementados numéricamente que permitirán verificar la presencia de este *back-reaction* y visualizar la dinámica del sistema.

CAPÍTULO 2

Marco teórico

2.1. El formalismo de Koopman en mecánica clásica

A continuación, se dará una descripción de las ideas generales del formalismo de Koopman que permiten traducir la dinámica clásica descrita en términos de geometría diferencial a una dinámica análoga a la de Schrödinger en mecánica cuántica. Se seguirá el razonamiento de [5]. Para más detalle acerca del formalismo geométrico de la mecánica clásica véase el *Apéndice A*.

El espacio de fases clásico del que se parte es una variedad diferenciable simpléctica (\mathcal{M}_C, ω) de dimensión $2n$. En ella se puede definir un atlas de Darboux, de forma que localmente existe un conjunto de coordenadas $\{q^i\}$ y momentos $\{p_i\}$ sobre el que la dinámica está dada por las ecuaciones de Hamilton. Además, en estas coordenadas, la forma simpléctica se escribe como $\omega = \sum_i dq^i \wedge dp_i$.

Sobre esta variedad, se puede definir la medida de Liouville como

$$d\mu = \overbrace{\omega \wedge \dots \wedge \omega}^{\text{n veces}} \quad (2.1)$$

Esta medida tiene la propiedad de que una transformación que lleva $\{q(0), p(0)\}$ a $\{q(t), p(t)\}$, para algún $t \in \mathbb{R}$, deja invariante la integral $\int_{\Omega} \rho d\mu$ para cualquier región $\Omega \subset \mathcal{M}_C$ y función ρ analítica definida positiva sobre Ω . Esta propiedad es clave para poder aplicar el formalismo de Koopman. Se considera el espacio de todas las funciones complejas de cuadrado integrable en \mathcal{M}_C con la medida de Liouville.

$$\mathcal{L}^2(\mathcal{M}_C, d\mu) = \left\{ f : \mathcal{M}_C \rightarrow \mathbb{C} \left| \int_{\mathcal{M}_C} |f|^2 d\mu < +\infty \right. \right\} \quad (2.2)$$

Este espacio es de Hilbert y su métrica está dada por el producto escalar asociado,

$$\langle f | g \rangle = \int_{\mathcal{M}_C} \bar{f} g d\mu \quad (2.3)$$

Koopman demuestra en [3] que si φ es una transformación canónica en el espacio de fases que mantiene invariante el paréntesis de Poisson, entonces el operador dado por $U(f) = f \circ \varphi$ es una isometría unitaria. Así, el flujo Hamiltoniano F_t , por ser un simplectomorfismo, permite construir una transformación unitaria U_t dada por $U_t(f) = f \circ F_t, \forall f \in C^\infty(\mathcal{M}_C)$.

Lo anterior está definido para todo $t \in \mathbb{R}$, formando un grupo de transformaciones unitarias continuo sobre un único parámetro. Por el teorema de Stone (F.4.3), existe un operador autoadjunto L tal que $U_t = e^{-iLt}$, al cual se denominará operador de Koopman. Dado que este operador es generador infinitesimal de la evolución, depende localmente del Hamiltoniano de la forma

$$L = -i \left(\frac{\partial H}{\partial q^k} \frac{\partial}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial q^k} \right) \quad (2.4)$$

Así, se considera un estado $\psi_\rho \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_C, d\mu)$ que satisface $\rho = \bar{\psi}_\rho \psi_\rho$, de manera que ρ es la densidad de probabilidad en la mecánica estadística clásica y evoluciona según la ecuación de Liouville:

$$\dot{\rho} = -X_H(\rho) \quad (2.5)$$

La construcción anterior ha permitido trasladar esta dinámica al espacio de estados $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}_C, d\mu)$, de forma que la evolución de estos viene dada por

$$i\dot{\psi}_\rho = L\psi_\rho \quad (2.6)$$

que es una ecuación de tipo Schrödinger.

La idea de Koopman permite describir los estados clásicos como elementos de un espacio de Hilbert \mathcal{H}_C y los observables clásicos como operadores lineales sobre este espacio, siendo la evolución de los estados descrita por una ecuación de Schrödinger. La commutatividad de las funciones clásicas deriva en que el álgebra de operadores correspondiente debe ser commutativa.

El desarrollo anterior permite considerar el espacio de Hilbert que contiene a los estados híbridos $\mathcal{H}_H = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$, donde \mathcal{H}_Q es el espacio de Hilbert de estados cuánticos habitual en la formulación de la mecánica cuántica. Sin embargo, la diferente forma de los estados de los espacios de Hilbert clásico y cuántico dificulta el tratar de formular una dinámica sobre este espacio. Es por ello que se recurre a una formulación alternativa utilizada para describir la mecánica cuántica. Esta formulación se da en términos de C^* -álgebras, estructuras matemáticas que contienen a los observables físicos de un sistema. El objetivo es poder construir las C^* -álgebras de observables clásicos y cuánticos, construyendo finalmente una C^* -álgebra de observables híbridos. Como se verá posteriormente, el planteamiento de dinámicas sobre elementos de este conjunto es un problema más sencillo que el correspondiente a hacerlo sobre los estados del espacio de Hilbert híbrido. Si la dinámica de un sistema está contenida en los elementos de una C^* -álgebra, se está en representación de Heisenberg; mientras que si está contenida en los elementos de su dual (que se corresponderán con los estados) la representación es de Schrödinger.

El conjunto de funciones complejas de soporte compacto sobre la variedad diferenciable \mathcal{M}_C es una C^* -álgebra con las operaciones adecuadas (justificación en el *Apéndice B*) y contiene a los observables clásicos, por lo que constituirá la C^* -álgebra clásica \mathcal{A}_C . La construcción GNS (F.2.11) [6] afirma que, dado un estado, siempre es posible encontrar una representación π de una C^* -álgebra \mathcal{A} en el conjunto de operadores lineales acotados sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} , esto es, $\pi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Así, visto desde la imagen de Heisenberg, la commutatividad de los operadores se reduce a que la representación de la C^* -álgebra de observables clásicos en el conjunto de operadores lineales acotados sobre el conjunto de estados ($\pi_C(\mathcal{A}_C)$) es un álgebra commutativa, sobre la cual la dinámica viene dada por la ecuación de Heisenberg. Dado que esta ecuación describe la evolución de los operadores en términos del commutador con un Hamiltoniano, se debe tener un Hamiltoniano no perteneciente al álgebra de operadores clásicos para que la evolución sea no trivial; pero debe preservar este álgebra al actuar sobre ella: es un automorfismo externo. Asimismo, el espacio dual a \mathcal{A}_C se puede representar como un conjunto de matrices densidad clásicas (ver *Apéndice B*), cuya dinámica viene dada por la ecuación de von Neumann. Así, esta construcción convierte la dinámica no lineal de Liouville sobre \mathcal{M}_C en la dinámica lineal de von Neumann sobre el conjunto de matrices densidad clásicas $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$ (equivalente a una dinámica sobre los estados de \mathcal{A}_C^*) o de Heisenberg sobre los operadores lineales clásicos $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ (equivalente a una dinámica sobre los observables de \mathcal{A}_C). Sin embargo, esta dinámica pasa de estar caracterizada por una función Hamiltoniana en el álgebra de observables a estarlo por un Hamiltoniano fuera de ésta.

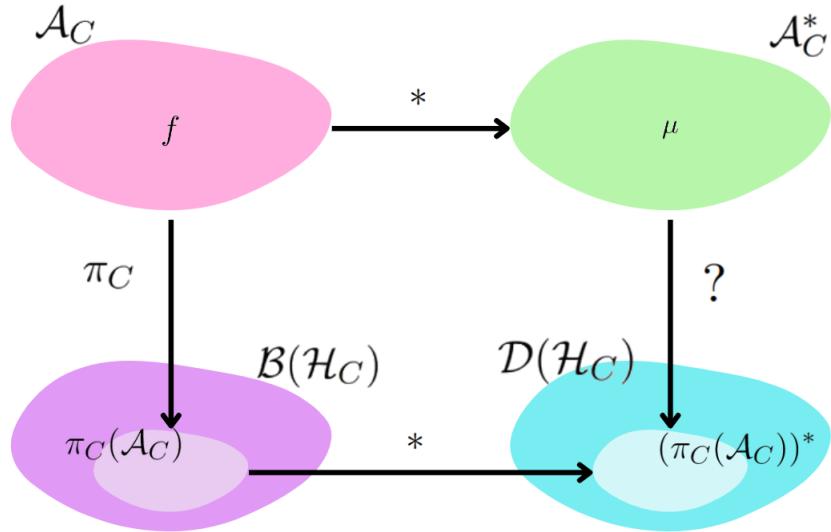


Figura 2.1: Esquema de los conjuntos de observables y estados clásicos y su representación.

En la *Figura 2.1* se muestra esquematizada la construcción anterior: la C^* -álgebra de observables \mathcal{A}_C (funciones complejas de soporte compacto sobre \mathcal{M}_C) se representa por π_C en un subconjunto del espacio de operadores lineales acotados $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$. El dual de este conjunto, $(\pi_C(\mathcal{A}_C))^*$, es un subconjunto del espacio de matrices densidad $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$ y representa a los estados de \mathcal{A}_C^* (que se corresponden con medidas de Radon sobre \mathcal{M}_C) a través de alguna aplicación que no se conoce. El hecho de que no se corresponda con el espacio $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$ completo es una intuición que se justificará en el *Capítulo 4*; aunque, en principio, podría ser subconjunto propio o no, ya que no está completamente caracterizado el espacio concreto que conforma $(\pi_C(\mathcal{A}_C))^*$.

Cada elemento de \mathcal{A}_C es una función de las coordenadas generalizadas $\{q^i\}$ y de los momentos generalizados $\{p_i\}$. Las coordenadas y momentos canónicos conjugados, $\{\Pi_{q^i}\}$ y $\{\Pi_{p_i}\}$, no son observables clásicos (son elementos derivativos), por lo que cualquier función dependiente de ellos está fuera del álgebra \mathcal{A}_C . Así, se tiene que los elementos de $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ dependerán de los operadores $\hat{Q}^i = \pi_C(q^i)$ y $\hat{P}_i = \pi_C(p_i)$ pero no de $\hat{\Pi}_{q^i} = \pi_C(\Pi_{q^i})$ y $\hat{\Pi}_{p_i} = \pi_C(\Pi_{p_i})$. Sin embargo, los elementos de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ sí dependerán, en general, de coordenadas y momentos conjugados. Por ello, para tomar un Hamiltoniano fuera del álgebra, basta tomar un operador acotado dependiente de coordenadas y momentos conjugados.

Por otro lado, la C^* -álgebra cuántica, \mathcal{A}_Q , es el conjunto de operadores acotados sobre el espacio de Hilbert cuántico ($\mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$), siendo los observables los operadores autoadjuntos y de forma que la representación es trivial (ver *Apéndice B*). Además, el teorema de Gleason asegura que los estados sobre \mathcal{A}_Q se corresponden uno a uno con las matrices densidad en $\mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$.

Con todo esto, se han resumido las ideas de Koopman que permiten la construcción de un espacio de Hilbert de estados clásicos \mathcal{H}_C y de una C^* -álgebra de observables clásicos \mathcal{A}_C . A partir de este álgebra y la C^* -álgebra de observables cuánticos \mathcal{A}_Q , se ha establecido un método para la construcción de representaciones $\pi_C : \mathcal{A}_C \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ y $\pi_Q : \mathcal{A}_Q \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$. Lo anterior permite generar dinámica en los sistemas clásico y cuántico a través de ecuaciones de tipo Schrödinger sobre los estados en \mathcal{H}_C y \mathcal{H}_Q , de tipo Heisenberg sobre los operadores de $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ y $\pi_Q(\mathcal{A}_Q)$ o de tipo von Neumann sobre las matrices densidad en $(\pi_C(\mathcal{A}_C))^*$ y $(\pi_Q(\mathcal{A}_Q))^*$. La ventaja de la formulación en los dos últimos casos para llegar a plantear una dinámica híbrida es la forma equivalente de los estados en $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$ y $\mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$, así como la forma equivalente de los observables en $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ y $\mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$.

A partir de esta formulación matemática común en los sistemas clásico y cuántico, se construyen los estados y observables híbridos sobre los cuales se podrá formular posteriormente una dinámica. Dado que los sistemas híbridos son límites parciales de otros puramente cuánticos, es lógico construir la C^* -álgebra híbrida de forma natural como $\mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$ (ver *Apéndice B*). A su vez, su representación sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$ se define como $\pi_H = \pi_C \otimes \pi_Q$, de forma que $\pi_H(\mathcal{A}_H) = \pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$. Los estados sobre \mathcal{A}_H son un conjunto de operadores cuánticos parametrizados por variables reales $\hat{\rho}(\xi)$. Cada estado $\hat{\rho}(\xi)$ tiene asociada una matriz densidad híbrida $\hat{\rho}_H \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$, sobre la cual está bien definida la entropía híbrida como la entropía de von Neumann (ver [4]).

2.2. Dinámica Markoviana

El estudio de dinámicas no unitarias en sistemas cuánticos ([7],[8],[9],[10]) surge de la necesidad de explicar el comportamiento de sistemas cuánticos abiertos, esto es, sistemas que interaccionan con el exterior. Tiene aplicación en gran cantidad de sistemas físicos reales, como pueden ser los procesos de emisión y absorción de fotones por parte de un átomo o, en general, todos aquellos sistemas cuánticos que intercambian energía con su entorno. Los procesos Markovianos, en particular, permiten describir el caso más simple posible de dinámica en sistemas abiertos.

En el caso de sistemas cerrados (no interaccionan con el exterior), un estado cuántico $|\psi(t)\rangle$ evoluciona según la ecuación de Schrödinger, de forma que existe un operador unitario $U(t, t_0)$ que transforma el estado en el tiempo como $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$. Esto implica que, desde el punto de vista de Schrödinger de la mecánica cuántica, las matrices densidad evolucionan como

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0) \quad (2.7)$$

lo que lleva a la ecuación de von Neumann. Por otro lado, la representación de Heisenberg conduce a una evolución de los operadores dada por

$$A(t) = U^\dagger(t, t_0)A(t_0)U(t, t_0) \quad (2.8)$$

obteniéndose la ecuación de Heisenberg. Así, la dinámica de un sistema cuántico cerrado es unitaria.

Esto no ocurre si se considera un sistema abierto. Se puede modelizar como una estructura formada por dos subsistemas, S y B , acoplados. Los estados del sistema total serán elementos del espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$. Estos subsistemas representarán físicamente lo siguiente:

- El subsistema S formará el sistema (abierto) de interés, aquel sobre el que se realizarán las medidas. Así, interesaría conocer la evolución de operadores de la forma $A \otimes \mathbb{I}_B$, con $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_S)$ y \mathbb{I}_B el operador identidad del subsistema B .
- El subsistema B corresponderá a un medio ambiente con el cual el subsistema S interacciona. A lo largo de las deducciones, siguiendo [7], se supondrá que este sistema tiene un número de grados de libertad muy elevado (reservorio), de forma que las frecuencias de los modos del subsistema tienden a formar un continuo. Además, se asumirá que está en estado de equilibrio térmico. Es por ello que se dice que este subsistema es un baño térmico.

Se puede suponer que el sistema total $S + B$ es cerrado y toda la interacción del sistema abierto a modelizar S se produce con el entorno B . El Hamiltoniano del sistema total es de la forma

$$H(t) = H_S \otimes \mathbb{I}_B + \mathbb{I}_S \otimes H_B + H_{int}(t) \quad (2.9)$$

asumiendo que los Hamiltonianos puros de los sistemas S y B son independientes del tiempo y permitiendo dependencia temporal en el Hamiltoniano de interacción H_{int} .

La matriz densidad del sistema reducido S , ρ_S , viene dada por la traza parcial en los grados de libertad de B de la matriz densidad total ρ . Es precisamente esta matriz reducida el objeto de interés para caracterizar la evolución del sistema abierto. Como el sistema completo es cerrado, la evolución del estado de éste es unitaria y se debe tener necesariamente que existe un operador unitario $U(t, t_0)$ tal que

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_B\{U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)\} \quad (2.10)$$

Se supondrá que el estado inicial es separable $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B$, con ρ_B el estado de equilibrio térmico en B . Esto no implica que no existan excitaciones en el reservorio causadas por el sistema reducido, sino que se está asumiendo que el tiempo de decaimiento de estas excitaciones es muy inferior a la escala de tiempo de evolución del sistema. Entonces, la transformación de la matriz reducida a un tiempo $t > 0$ viene dada por

$$\rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) = \text{Tr}_B\{U(t, 0)[\rho_S(0) \otimes \rho_B]U^\dagger(t, 0)\} \quad (2.11)$$

Utilizando la descomposición espectral de ρ_B , se puede escribir la ecuación (2.11) en términos de unos operadores sobre \mathcal{H}_S , $W_{\alpha\beta}(t)$, dependientes de los elementos de una base de \mathcal{H}_B y del operador $U(t, 0)$:

$$\rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) = \sum_{\alpha, \beta} W_{\alpha\beta}(t)\rho_S(0)W_{\alpha\beta}^\dagger(t) \quad (2.12)$$

donde α y β suman en la dimensión del espacio \mathcal{H}_B . Los operadores $W_{\alpha\beta}$ satisfacen

$$\sum_{\alpha\beta} W_{\alpha\beta}^\dagger(t)W_{\alpha\beta}(t) = \mathbb{I}_S \quad (2.13)$$

Esto último implica que $\text{Tr}_S\{\rho_S(t)\} = \text{Tr}_S\{V(t)\rho_S(0)\} = \text{Tr}\{\rho_S(0)\} = 1$, de forma que la aplicación $V(t)$ es completamente positiva y conserva la traza. Con todo esto, $V(t)$, denominada aplicación dinámica, es una transformación interna dentro del conjunto de matrices densidad del sistema S , que lleva el estado inicial al estado en un tiempo t fijo. El conjunto $\{V(t)|t \geq 0\}$ es, así, una familia de aplicaciones dinámicas dependiente de forma continua de un parámetro y describe la evolución completa de los estados del sistema S a tiempos posteriores al inicial. Si se supone que se cumple la propiedad $V(t_1)V(t_2) = V(t_1 + t_2) \forall t_1, t_2 \geq 0$ (propiedad de semigrupo), se tiene que el comportamiento es Markoviano. Esta suposición, derivada de la denominada aproximación de Born-Markov, puede justificarse cuando el tiempo de correlación característico del sistema B es mucho menor que la escala de tiempo de evolución del sistema, ya que en ese caso pueden despreciarse efectos de memoria. Las principales aproximaciones tomadas son la de Born, suponiendo acoplamiento débil entre subsistemas; la aproximación de Markov, suponiendo tiempos característicos de decaimiento de las funciones de correlación del reservorio (τ_B) muy inferiores a la escala de tiempo de relajación del sistema (τ_R); y una aproximación secular, justificada si esta escala de tiempo τ_R es mucho menor a la de evolución del sistema, τ_S . En el *Apéndice C.1* se exponen los procedimientos que permiten, a partir de estas aproximaciones, llegar a los resultados obtenidos.

A la familia $\{V(t)|t \geq 0\}$ descrita, cumpliendo la propiedad de semigrupo, se le denomina semigrupo dinámico cuántico. Lindblad, en [10], y Gorini, Kossakowski y Sudarshan, en [8], presentan una serie de propiedades que caracterizan a los semigrupos dinámicos y que les permiten hallar la forma más general posible del generador de estos semigrupos. A continuación se presentan algunas ideas muy generales que conducen a estos resultados.

El hecho de dotar al conjunto $\{V(t)|t \geq 0\}$ de la propiedad de semigrupo es determinante para poder asegurar que existe una aplicación lineal \mathcal{L} tal que cada elemento del semigrupo se puede expresar como $V(t) = \exp(\mathcal{L}t)$. Esta aplicación se denomina generador del semigrupo y la representación exponencial garantiza una evolución de las matrices densidad reducidas regida por una ecuación diferencial de primer orden ($\dot{\rho}_S(t) = \mathcal{L}\rho_S(t)$).

El desarrollo de los operadores $W_{\alpha\beta}$ en función de una base del espacio \mathcal{H}_S (ver *Apéndice C.2*), supuesto de dimensión finita N , traduce la dinámica anterior a la descrita por la ecuación (2.14), que es la forma más general posible de una evolución dada por un semigrupo dinámico cuántico. Esta ecuación se denomina ecuación maestra de Lindblad y la dinámica que genera es la dinámica Lindbladiana.

$$\dot{\rho}_S = \mathcal{L}\rho_S = -i[H, \rho_S] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left(V_k \rho_S V_k^\dagger - \frac{1}{2} V_k^\dagger V_k \rho_S - \frac{1}{2} \rho_S V_k^\dagger V_k \right) \quad (2.14)$$

En esta expresión los parámetros γ_k son no negativos y tienen relación con ciertas funciones de correlación del ambiente, H es el Hamiltoniano del sistema (de forma que el primer término describe la parte unitaria de la evolución) y los operadores V_k se denominan operadores de Kraus.

Por otro lado, la ecuación maestra anterior describe procesos irreversibles en sistemas abiertos, de manera que la entropía de los mismos es creciente hasta llegar al estado de equilibrio térmico, en el cual se vuelve constante. Esto se muestra en [7] a través de la definición de una tasa de producción de entropía $\sigma(\rho)$, la cual se demuestra que es un funcional convexo sobre el espacio de matrices densidad y tal que se desvanece en el estado estacionario.

Para obtener la representación de Heisenberg de la evolución Lindbladiana, hay que tener en cuenta que el valor medio de los operadores debe ser igual en ambas representaciones, esto es, $\text{Tr}_S\{A(V(t)\rho_S)\} = \text{Tr}_S\{(V^\dagger(t)A)\rho_S\}$. Un operador en representación de Heisenberg en un tiempo t dado es de la forma $A_H(t) = V^\dagger(t)A$, donde $A = A_H(0)$. Su evolución temporal viene dada por la ecuación maestra adjunta:

$$\dot{A}_H(t) = V^\dagger(t) \left(\mathcal{L}^\dagger(t)A \right) \quad (2.15)$$

En el caso de Lindbladiano \mathcal{L} independiente del tiempo, se tiene que \mathcal{L}^\dagger conmuta con $V^\dagger(t)$, de forma que la ecuación maestra resulta

$$\dot{A}_H(t) = i[H, A_H(t)] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left(V_k^\dagger A_H(t) V_k - \frac{1}{2} A_H(t) V_k^\dagger V_k - \frac{1}{2} V_k^\dagger V_k A_H(t) \right) \quad (2.16)$$

CAPÍTULO 3

Dinámica de los sistemas híbridos

En el capítulo anterior se ha visto cómo el formalismo de Koopman permite construir un espacio de Hilbert que contiene a los estados de un sistema clásico y formular en él una dinámica lineal equivalente a la dinámica no lineal de Liouville característica de la formulación geométrica usual de la mecánica clásica. Asimismo, se ha construido una C^* -álgebra de observables clásicos, \mathcal{A}_C , y su representación en el conjunto de operadores lineales acotados sobre el espacio de Hilbert de estados clásicos, $\pi_C(\mathcal{A}_C)$. Esto ha permitido formular la dinámica en términos de elementos de $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ a través de la ecuación de Heisenberg y en términos de las matrices densidad de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$ según la ecuación de von Neumann. Además, el álgebra de operadores clásicos es conmutativa y el Hamiltoniano que rige la evolución es un automorfismo externo a este álgebra. De manera análoga, y en base a la formulación habitual de la mecánica cuántica, se ha analizado cómo formular sistemas dinámicos equivalentes sobre el espacio de Hilbert cuántico \mathcal{H}_Q (ecuación de Schrödinger), sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$ (ecuación de Heisenberg) y sobre $\mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$ (ecuación de von Neumann). Finalmente, se ha construido una C^* -álgebra que contiene a los observables híbridos $\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$ y su representación sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$, $\pi_H(\mathcal{A}_H) = \pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$. En este capítulo se van a establecer las condiciones que debe cumplir la dinámica híbrida para estar bien definida, describiendo la evolución de elementos de $\pi_H(\mathcal{A}_H)$ (imagen de Heisenberg) o de su dual (imagen de Schrödinger).

La evolución de un operador de $\pi_H(\mathcal{A}_H)$ viene descrita por un automorfismo sobre este espacio. Debido a la conmutatividad de $\pi_C(\mathcal{A}_C)$, para que este automorfismo defina una evolución del sistema clásico no trivial, es preciso que sea externo al álgebra $\pi_H(\mathcal{A}_H)$. Esto es consecuencia directa de que la evolución clásica sea no trivial únicamente si viene dada por un automorfismo externo al álgebra clásica. Aquí se consideraran únicamente sistemas lineales, esto es, de la forma

$$\frac{d\pi_H(A)(t)}{dt} = \mathcal{L}\pi_H(A)(t), \quad \forall A \in \mathcal{A}_H \quad (3.1)$$

de manera que la condición de automorfismo externo deriva en que \mathcal{L} sea un superoperador definido en el conjunto $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ completo, pero tal que $\mathcal{L}(\pi_H(\mathcal{A}_H)) \subset \pi_H(\mathcal{A}_H)$. Se asume, así, que \mathcal{L} genera un operador acotado $e^{\mathcal{L}t} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$, el cual necesariamente cumple $e^{\mathcal{L}t}(\pi_H(\mathcal{A}_H)) \subset \pi_H(\mathcal{A}_H)$.

Entonces, en imágen de Schrödinger, la evolución será de la forma

$$\frac{d\hat{\rho}_H(t)}{dt} = \mathcal{L}^\dagger \hat{\rho}_H(t), \quad \forall \hat{\rho}_H \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) \quad (3.2)$$

Además de la condición de preservar el álgebra $\pi_H(\mathcal{A}_H)$, hay que imponer sobre \mathcal{L} otras condiciones adicionales. Éstas están relacionadas con el hecho de que una aplicación lineal como \mathcal{L}^\dagger , aplicada sobre una matriz densidad, no tiene por qué resultar otra matriz densidad, de forma que hay que imponer que $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ se preserve para tener una evolución bien definida sobre los estados. Esto requiere que la evolución sea tangente al conjunto de matrices densidad, de forma que, $e^{\mathcal{L}^\dagger t} \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) \subset \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$, definiendo así una curva en el conjunto de operadores autoadjuntos definidos positivos. Además, debe conservar la traza de las matrices densidad: $Tr \hat{\rho}_H(t) = 1 \forall t$, para cada $\hat{\rho}_H(t)$ que satisface (3.2).

Por otro lado, también se deben imponer restricciones sobre la entropía de von Neumann del sistema híbrido (1.4), permitiendo únicamente que ésta aumente o permanezca constante en el tiempo.

Finalmente, tal y como se ha mencionado previamente, habría que imponer que los *ensembles* de equilibrio definidos en [4] sean puntos fijos de la dinámica, pero esta última condición no se verificará en este trabajo, sino que se dejará para futuras investigaciones.

3.1. Dinámica unitaria

El caso más sencillo de dinámica es unitaria, aquella en la cual existe un operador Hamiltoniano $\hat{H} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ tal que el superoperador \mathcal{L} es su acción adjunta. En consecuencia, la ecuación (3.1) se traduce a

$$\frac{d}{dt}(\pi_H(A)(t)) = i[\hat{H}, \pi_H(A)(t)], \quad \forall A \in \mathcal{A}_H \quad (3.3)$$

mientras que la evolución de las matrices densidad viene dada por

$$\frac{d}{dt}(\hat{\rho}_H(t)) = -i[\hat{H}, \hat{\rho}_H(t)], \quad \forall \hat{\rho}_H \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) \quad (3.4)$$

La unitariedad de la evolución implica necesariamente que se cumple la condición de invariancia del conjunto de matrices densidad y que la entropía de von Neumann permanece constante, al preservarse el espectro de las matrices densidad. Por tanto, la única condición adicional a imponer sobre la evolución es la invariancia del álgebra de operadores.

Para ver las restricciones que supone esta condición, se escribe el Hamiltoniano de la siguiente forma.

$$\hat{H} = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I}_Q + \mathbb{I}_C \otimes \hat{H}_Q + \hat{H}_{CQ} = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I}_Q + \mathbb{I}_C \otimes \hat{H}_Q + \sum_{j,k} c_{jk} h_c^j \otimes h_Q^k \quad (3.5)$$

con $c_{jk} \in \mathbb{R}$.

Esto se hace sin pérdida de generalidad, ya que cualquier elemento de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ puede escribirse como suma de tres términos de esta forma. Así, \hat{H}_C y \hat{H}_Q son los Hamiltonianos actuando únicamente sobre grados de libertad clásicos y cuánticos respectivamente, mientras que \hat{H}_{CQ} es un Hamiltoniano de interacción entre los dos sistemas, escrito como combinación lineal de operadores separables. Con esto, en [4], se establecen las condiciones que debe cumplir cada término del Hamiltoniano para preservar el álgebra de operadores, las cuales se presentan a continuación:

- El término \hat{H}_C debe ser lineal en $\hat{\Pi}_{q^i} = \pi_C(\Pi_{q^i})$ y $\hat{\Pi}_{p_i} = \pi_C(\Pi_{p_i})$. La independencia con respecto a estos operadores provocaría una evolución trivial, mientras que la dependencia de potencias superiores deriva en el incumplimiento de la restricción $\mathcal{L}(\pi_H(\mathcal{A}_H)) \subset \pi_H(\mathcal{A}_H)$. Así, se tiene $\hat{H}_C \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ pero $\hat{H}_C \notin \pi_C(\mathcal{A}_C)$.
- El término \hat{H}_{CQ} no puede depender de $\hat{\Pi}_{q^i}$ y $\hat{\Pi}_{p_i}$ para que se cumpla la condición de cierre del álgebra. Esto implica que necesariamente $\hat{H}_{CQ} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$
- El término puramente cuántico tan solo debe satisfacer $\hat{H}_Q \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$.

Cualquier Hamiltoniano de la forma (3.5) que cumpla estas condiciones define una buena dinámica unitaria sobre los operadores y estados híbridos. Para recuperar la construcción de Koopman de la mecánica clásica, basta tomar \hat{H}_C , que es lineal en $\hat{\Pi}_{q^i}$ y $\hat{\Pi}_{p_i}$, como

$$\hat{H}_C = \sum_{k,j} \left[\pi_C \left(\frac{\partial H_C(q,p)}{\partial p_k} \right) \pi_C(\Pi_{q^k}) - \pi_C \left(\frac{\partial H_C(q,p)}{\partial q^j} \right) \pi_C(\Pi_{p_j}) \right] \quad (3.6)$$

con $H_C(q,p) \in \mathcal{A}_C$ representando la energía asociada a los grados de libertad clásicos.

Con todo esto, se han clasificado todas las posibles dinámicas unitarias que puede presentar el sistema híbrido. Todas ellas tienen una carencia importante: la falta de *back-reaction*. Este es un fenómeno existente en los sistemas que se trata de describir a través del modelo híbrido y, por el cual, la evolución de los grados de libertad cuánticos tiene influencia en la dinámica de los clásicos. En el caso de un Hamiltoniano cumpliendo las restricciones impuestas, se tiene que un operador puramente clásico $\hat{A} \otimes \mathbb{I}_Q$, $\hat{A} \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$ evoluciona de forma que nunca deja de ser puramente clásico, como se ve en [11].

$$\frac{d}{dt}(\hat{A} \otimes \mathbb{I}_Q) = i[\hat{H}_C, \hat{A}] \otimes \mathbb{I}_Q \quad (3.7)$$

dado que los restantes términos resultan nulos por la commutatividad de $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ o la commutatividad de cualquier operador lineal con la identidad. Esto significa que, cuando la evolución del sistema es unitaria, los observables clásicos no dependen de los grados de libertad cuánticos, esto es, no hay *back-reaction*. Para que este fenómeno se produzca, es necesario pasar a estudiar dinámicas no unitarias.

3.2. Dinámica Lindbladiana

Una posible generalización de la evolución unitaria es la denominada dinámica Lindbladiana o Markoviana, cuyos fundamentos teóricos se han expuesto en la *Sección 2.2*. En representación de Heisenberg, esta dinámica viene descrita por

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \mathcal{L}^\dagger(\hat{A}(t)) = i[\hat{H}, \hat{A}(t)] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left(V_k^\dagger \hat{A}(t) V_k - \frac{1}{2} \hat{A}(t) V_k^\dagger V_k - \frac{1}{2} V_k^\dagger V_k \hat{A}(t) \right), \quad (3.8)$$

$\forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$, con $\hat{H} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ el Hamiltoniano del sistema, $\{V_k\}_{k=1}^{N^2-1} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ los operadores de Kraus y $\{\gamma_k\}_{k=1}^{N^2-1}$ parámetros reales no negativos. Alternativamente, en representación de Schrödinger, se tiene, $\forall \hat{\rho}_H \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$

$$\frac{d}{dt}(\hat{\rho}_H(t)) = -i[\hat{H}, \hat{\rho}_H(t)] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left(V_k \hat{\rho}_H(t) V_k^\dagger - \frac{1}{2} V_k^\dagger V_k \hat{\rho}_H(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_H(t) V_k^\dagger V_k \right) \quad (3.9)$$

Nótese que previamente se utilizaba \mathcal{L} para el superoperador actuando sobre operadores y \mathcal{L}^\dagger para el correspondiente a matrices densidad, pero se ha cambiado la notación para adecuarla a la utilizada para describir la dinámica Lindbladiana en la *Sección 2.2*.

La ventaja de considerar este tipo de dinámicas en lugar de otras más generales es que, como ya se ha visto, preservan el conjunto de matrices densidad. Además, la entropía es no decreciente en el tiempo, siendo constante si la evolución es unitaria y estrictamente creciente si es no unitaria. Esto se demuestra en [7] y es consecuencia de la irreversibilidad de los procesos en sistemas abiertos en los que hay interacción con el entorno. Por tanto, para que la dinámica esté bien definida, basta imponer únicamente la condición de cierre del álgebra de operadores.

En este trabajo se va a suponer que la parte clásica de los operadores de Kraus es lineal en $\{\hat{\Pi}_{q^i}\}$ y $\{\hat{\Pi}_{p_i}\}$, y, por lo tanto, tendrán la forma siguiente.

$$V_k = \left[d_k(\hat{Q}^i, \hat{P}_i) + \sum_{s=1}^n \left(e_{kqs}(\hat{Q}^i, \hat{P}_i) \hat{\Pi}_{q^s} + e_{kps}(\hat{Q}^i, \hat{P}_i) \hat{\Pi}_{p_s} \right) \right] \otimes a_k \quad (3.10)$$

con $d_k, e_{kps}, e_{kqs} \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$ y $a_k \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$, $\forall k = 1, \dots, N^2 - 1$, $\forall s = 1, \dots, n$

Supongamos que el Hamiltoniano cumple las condiciones enunciadas para el Hamiltoniano de la dinámica unitaria (\hat{H}_C lineal en $\hat{\Pi}_{Q^i}, \hat{\Pi}_{P_i} \forall i$; $\hat{H}_Q \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$; $\hat{H}_{CQ} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$). Entonces, la dinámica que rige la ecuación (3.8) con operadores de Kraus de la forma (3.10) satisface la restricción de invariancia del álgebra de operadores si se verifica la siguiente condición: el operador $a_k \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$ pertenece al centro del álgebra para cualquier k tal que V_k no sea independiente de $\{\hat{\Pi}_{q^s}\}$ y $\{\hat{\Pi}_{p_s}\}$.

La demostración de que se preserva el álgebra de operadores se muestra en el *Apéndice D*. Nótese que las condiciones enunciadas y suposiciones no son necesarias, sino suficientes. Esto significa que es posible que existan dinámicas Lindbladianas con dependencia de mayor orden en coordenadas y momentos conjugados y que sí satisfagan la condición de cierre del álgebra. Obsérvese, además, que el conjunto de operadores dependientes de \hat{Q} , \hat{P} , $\hat{\Pi}_q$ y $\hat{\Pi}_p$ no conforma $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ completo, sino solo un subconjunto de operadores autoadjuntos de éste. Esto implica que es posible que existan también dinámicas con operadores de Kraus dependientes de elementos fuera del conjunto de operadores lineales autoadjuntos y que, sin embargo, preserven la hermiticidad. Una posible línea de trabajo futuro es, precisamente, el estudio de estas dinámicas Lindbladianas más generales.

No obstante, restringiendo la dinámica a la supuesta en este trabajo, existe total libertad en la elección de los operadores $d_k, e_{kqs}, e_{kps} \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$ y de los parámetros $\gamma_k \in \mathbb{R}_{\geq 0}$, pudiendo adaptarlos al sistema físico que se pretende modelar.

Al igual que se ha visto en el caso unitario, se puede comprobar si la nueva dinámica presenta *back-reaction* analizando si un operador puramente clásico deja de serlo con el tiempo o no. En este caso, sea $\hat{A} \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$, tal que $\hat{A} = \pi_C(f)$, $f \in \mathcal{A}_C$, se tiene

$$\frac{d}{dt}(\hat{A} \otimes \mathbb{I}_Q) = i[\hat{H}_C, \hat{A}] \otimes \mathbb{I}_Q + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \sum_{s,r=1}^n \sum_{i,j=q,p} [\hat{\Pi}_{jr}, e_{kjr} e_{kis} \pi_C(i \partial_{is} f)] \otimes a_k^2 \quad (3.11)$$

En general, si existe dependencia de los operadores de Kraus con alguna coordenada o momento conjugado, esto es, existe alguna $e_{kis} \neq 0$, el segundo término no tiene por qué ser nulo, de forma que un operador puramente clásico puede evolucionar a uno que no lo sea, lo cual es indicio de que hay *back-reaction*.

Por ejemplo, si se toma el operador $\hat{Q}_i \otimes \mathbb{I}_Q \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$,

$$\frac{d}{dt}(\hat{Q}_i \otimes \mathbb{I}_Q) = i[\hat{H}_C, \hat{Q}_i] \otimes \mathbb{I}_Q + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \sum_{s,r=1}^n \sum_{i,j=q,p} i[\hat{\Pi}_{jr}, e_{kjr} e_{kqi}] \otimes a_k^2 \quad (3.12)$$

Si se tomase $e_{kis} = \mathbb{I}_C \forall k, i, s$, no existiría tal *back-reaction*. Sin embargo, tan solo tomando $e_{kqi} = \hat{Q}_i$ para algún $k \in \{1, \dots, N^2 - 1\}$,

$$\frac{d}{dt}(\hat{Q}_i \otimes \mathbb{I}_Q) = i[\hat{H}_C, \hat{Q}_i] \otimes \mathbb{I}_Q + \frac{1}{2} \gamma_k i[\hat{\Pi}_{qi}, \hat{Q}_i^2] \otimes a_k^2 = i[\hat{H}_C, \hat{Q}_i] \otimes \mathbb{I}_Q + \gamma_k \hat{Q}_i \otimes a_k^2 \quad (3.13)$$

Lo anterior indica que la velocidad con la que un operador puramente clásico deja de serlo es proporcional al valor de los parámetros γ_k . Esto lleva a pensar que el sentido físico de estos parámetros está relacionado con el acople entre los grados de libertad clásicos y cuánticos, lo que permite ajustarlos en función del sistema físico a describir.

CAPÍTULO 4

Implementación numérica

En este capítulo se va a implementar numéricamente una serie de ejemplos de dinámicas en sistemas híbridos, analizando propiedades de éstas y verificando las conclusiones a las que se ha llegado previamente en los desarrollos teóricos. Se realizará una comparación entre la dinámica unitaria y Lindbladiana que permitirá ilustrar la presencia de *back-reaction* en el último caso. Para la implementación numérica se utilizará la librería [QuTip](#) de Python. El código utilizado se puede encontrar en [GitHub](#).

4.1. Descripción del sistema

El sistema híbrido a modelizar va a consistir en un oscilador armónico clásico unidimensional acoplado a dos QuBits o QuTrits. Veamos la forma que tiene el espacio de Hilbert híbrido de este sistema, $\mathcal{H}_H = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$.

Por un lado, el espacio de estados cuánticos \mathcal{H}_Q es el producto tensorial del correspondiente a un QuBit (\mathbb{C}^2) o QuTrit (\mathbb{C}^3) por si mismo. En el caso del QuBit, $\dim(\mathbb{C}^2) = 2$ y los elementos de la base se corresponden con los estados de spin up y spin down $\{| \downarrow \rangle, | \uparrow \rangle\}$ ($m_z = \pm \frac{1}{2}$). Así para un sistema cuántico consistente en dos QuBits acoplados, se tendrá $\mathcal{H}_Q = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$. Por lo tanto $\dim(\mathcal{H}_Q) = 4$, siendo los elementos de la base $\{| \downarrow\downarrow \rangle, | \downarrow\uparrow \rangle, | \uparrow\downarrow \rangle, | \uparrow\uparrow \rangle\}$.

En el caso del QuTrit, $\dim(\mathbb{C}^3) = 3$, siendo los elementos de la base los correspondientes a $m_z = -1, 0, 1$, $\{| \bar{1} \rangle, | 0 \rangle, | 1 \rangle\}$. Por tanto, si el sistema cuántico consiste en 2 QuTrits acoplados, el espacio de Hilbert de estados cuánticos es $\mathcal{H}_Q = \mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^3$, de dimensión 9 y base $\{| \bar{1}\bar{1} \rangle, | \bar{1}0 \rangle, | \bar{1}1 \rangle, | 0\bar{1} \rangle, | 00 \rangle, | 01 \rangle, | 1\bar{1} \rangle, | 10 \rangle, | 11 \rangle\}$.

Por otro lado, veamos qué ocurre con el sistema clásico. Un oscilador armónico unidimensional viene descrito usualmente en el espacio de fases \mathbb{R} de posiciones clásicas. Así al aplicar el formalismo de Koopman, se obtiene que los estados que describen este oscilador están en el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Vamos a suponer que el espacio de Hilbert clásico total es el producto tensorial de dos espacios como el anterior, uno que describe un oscilador armónico para la posición y el otro para el momento: $\mathcal{H}_C = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

Los estados propios del oscilador armónico son

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right), \quad n \geq 0 \quad (4.1)$$

con ω la frecuencia del oscilador armónico, m la masa de la partícula y $H_n(x)$ el polinomio de Hermite de orden n evaluado en x . Para simplificar, las simulaciones se realizarán en unidades naturales, de forma que $\hbar = 1$ y, además, se tomará $m = \omega = 1$ en estas unidades. De aquí en adelante, no se especificarán las unidades de las magnitudes, todas ellas serán unidades naturales.

El conjunto $\{\varphi_n\}_{n \geq 0}$ forma una base de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, por lo que el conjunto $\{\varphi_n \otimes \varphi_m\}_{n,m \geq 0}$ es base de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Al contrario de lo que ocurría en el caso cuántico, este sistema es de dimensión infinita, lo cual imposibilita la implementación numérica de dinámicas que recorran todo el espacio de fases clásico. Sin embargo, si el estado inicial es combinación lineal de un número finito de elementos de la base, se puede asegurar que en un tiempo finito la dinámica no va a salir de un subespacio del espacio de Hilbert total, formado por las combinaciones lineales de un número finito de funciones de la base. Así, es posible restringirse a un subespacio, cuya base es $\{\varphi_n \otimes \varphi_m\}_{n,m \in \{0, \dots, N\}}$, con $N \in \mathbb{N}$. En el *Apéndice E* se discute la elección de este valor de N y del tiempo de simulación al que se puede llegar como consecuencia de esta elección en cada uno de los ejemplos que se verán a continuación.

En todos los casos, el Hamiltoniano será de la forma descrita en teoría (3.5): suma de un término puramente clásico, un término puramente cuántico y un término de interacción. El Hamiltoniano clásico \hat{H}_C se obtendrá mediante la aplicación del formalismo de Koopman sobre el Hamiltoniano correspondiente a un oscilador armónico ($H_c = \frac{q^2}{2} + \frac{p^2}{2}$), considerando $m = 1$, $k = m\omega^2 = 1$. Además, se desarrollará en función de los operadores escalera correspondientes al oscilador de posiciones y al oscilador de momentos: a_q , a_q^\dagger , a_p y a_p^\dagger . Los operadores posición momento y sus conjugados se pueden escribir en función de estos como

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_q + a_q^\dagger) \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_p + a_p^\dagger) \quad \hat{\Pi}_q = \frac{-i}{\sqrt{2}}(a_q - a_q^\dagger) \quad \hat{\Pi}_p = \frac{-i}{\sqrt{2}}(a_p - a_p^\dagger) \quad (4.2)$$

Así, utilizando la expresión (2.4) con H_C el Hamiltoniano del oscilador armónico clásico usual, se puede calcular el operador de Koopman, que se corresponde con el Hamiltoniano \hat{H}_C

$$\hat{H}_C = \hat{Q}\hat{\Pi}_p - \hat{P}\hat{\Pi}_q = \frac{-i}{2} \left[(a_q + a_q^\dagger)(a_p - a_p^\dagger) - (a_p + a_p^\dagger)(a_q - a_q^\dagger) \right] \quad (4.3)$$

que depende linealmente de $\hat{\Pi}_q$ y $\hat{\Pi}_p$, como se ha visto en teoría que se requiere para que la evolución, tanto unitaria como Lindbladiana, esté bien definida y sea no trivial sobre la parte clásica.

Los términos puramente cuántico \hat{H}_Q y de interacción \hat{H}_{CQ} dependerán del ejemplo concreto a implementar. Por otro lado, como parte cuántica de los operadores de Kraus (3.10), se tomará el operador S^2 (siendo $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ el operador espín), que pertenece al centro del álgebra de operadores cuánticos. En general, el estado inicial clásico se tomará como $\varphi_0 \otimes \varphi_1$, mientras que el estado inicial cuántico variará según el ejemplo.

4.2. Ejemplo 1

Para el primer ejemplo se considerará el sistema formado por el oscilador clásico acoplado a dos QuBits y dinámica unitaria sobre él. La finalidad de esto es analizar el comportamiento del subsistema clásico para verificar que es análoga a la de un oscilador armónico clásico usual. Como se verá posteriormente, la unitariedad preserva la pureza de las matrices densidad clásicas. Por tanto, en cada instante, el estado clásico, resultante de realizar la traza parcial de la matriz densidad sobre el subespacio cuántico, se corresponde con un elemento del espacio de Hilbert \mathcal{H}_C . Así, teniendo en cuenta que los elementos de la base clásica son de la forma (4.1), se puede hallar de forma sencilla la evolución de la densidad de probabilidad de posiciones y momentos $\rho(q, p)$. A continuación se representa dicha densidad de probabilidad para el estado inicial y tras un tiempo $t = 1$. La simulación se ha realizado tomando $N = 5$ elementos de la base clásica.

Evolución unitaria del sistema clásico

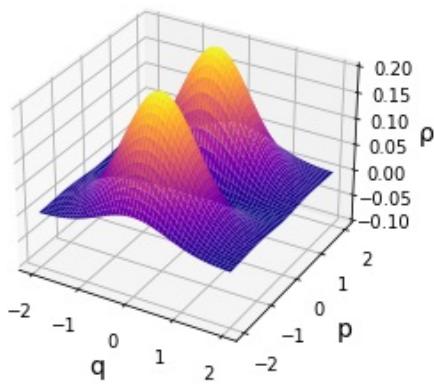


Figura 4.1: Estado inicial del subsistema clásico.

Evolución unitaria del sistema clásico

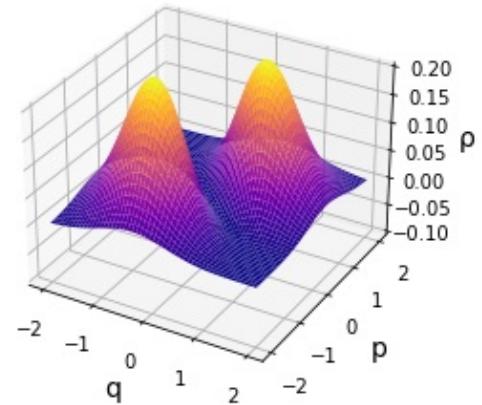


Figura 4.2: Estado del subsistema clásico en $t = 1$.

Si se representa lo anterior para cada instante temporal, se puede observar cómo las densidades de probabilidad de posición y momento oscilan armónicamente entre el estado fundamental (φ_0) y el primer excitado (φ_1) y en contrafase. Este es precisamente el comportamiento usual de un oscilador armónico clásico, lo que evidencia que la construcción de Koopman refleja la dinámica real de los sistemas clásicos a través de una formulación alternativa.

4.3. Ejemplo 2

En este caso se va a tomar el sistema formado por el oscilador clásico acoplado a dos QuTrits, con el objetivo de comprobar la presencia de *back-reaction* cuando la dinámica es Lindbladiana en contraposición a la falta de este efecto cuando la dinámica es unitaria. Según la ecuación (3.11), el término de interacción en la evolución de un operador puramente clásico depende de la parte cuántica de los operadores de Kraus; en este caso, de S^2 . Este operador actúa sobre sus autoestados

como $S^2\psi = S(S + 1)\psi$ y, en un sistema de dos QuTrits, se puede tener $S = 0, 1, 2$ según el estado sea singlete, triplete o quintuplete. En el caso del estado singlete, este término se anula, de forma que es de esperar que se tenga una dinámica idéntica a la unitaria. En cambio, cuando el estado sobre el que se mide sea triplete o quintuplete, la evolución de un operador puramente clásico debería ser diferente, tanto entre ellas como al caso unitario.

Se tomará un único operador de Kraus, pues es suficiente para comprobar las propiedades a estudiar y reduce el coste computacional en gran medida, permitiendo tomar un mayor número de elementos de la base clásica ($N = 13$, restringiendo así los tiempos de simulación a 0,05).

$$V_1 = (\hat{Q} + \hat{\Pi}_q - \hat{\Pi}_p) \otimes S^2 \quad (4.4)$$

con $\gamma_1 = 1$. Tomar únicamente un operador de Kraus es equivalente a tomar $\gamma_k = 0 \forall k > 1$. El Hamiltoniano se va a tomar puramente clásico, esto es, $\hat{H}_Q = \hat{H}_{CQ} = 0$.

En las *Figuras 4.3 y 4.4* se muestra la evolución Lindbladiana del valor medio de los operadores $\hat{Q}^2 \otimes \mathbb{I}_Q$ (idéntica a la de $\hat{P}^2 \otimes \mathbb{I}_Q$), y $\hat{Q}\hat{P} \otimes \mathbb{I}_Q$ según el estado cuántico inicial sea singlete, triplete o quintuplete. Asimismo, se muestra la evolución de los operadores clásicos \hat{Q}^2 y $\hat{Q}\hat{P}$, con evolución Lindbladiana puramente clásica definida por el operador de Kraus que conforma la parte clásica de V_1 . La evolución unitaria híbrida se muestra junto a la Lindbladiana del singlete porque es coincidente con ésta e independiente del estado cuántico. El hecho de mostrar operadores cuadráticos, proviene de que el valor medio de \hat{Q} y \hat{P} es nulo en todo tiempo, tanto para la evolución Lindbladiana (con este operador de Kraus), como unitaria.

Las simulaciones se han realizado sobre la evolución de las matrices densidad, en representación de Schrödinger. Sin embargo, se ha comprobado que, si se atribuye la dinámica a los operadores, se cumple $Tr(\hat{A}(t)\hat{\rho}) = Tr(\hat{A}\hat{\rho}(t))$, lo cual indica que la dinámica está bien definida sobre los operadores y estados.

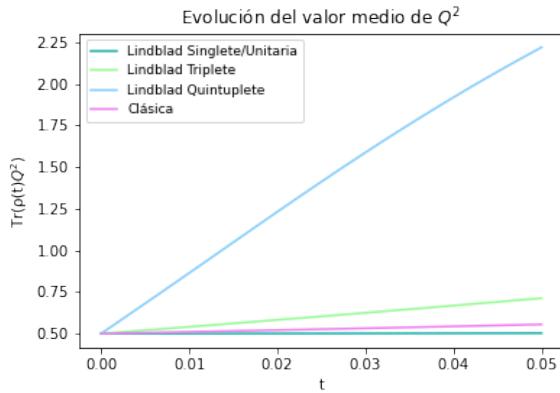


Figura 4.3: Comparación de la evolución Lindbladiana y unitaria de $\langle \hat{Q}^2 \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$.

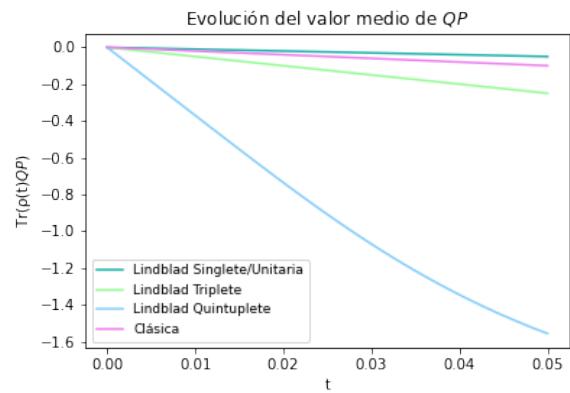


Figura 4.4: Comparación de la evolución Lindbladiana y unitaria de $\langle \hat{Q}\hat{P} \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$.

El resultado obtenido es el esperado por teoría: la evolución Lindbladiana introduce una dependencia con el estado cuántico de los operadores puramente clásicos, lo cual evidencia la presencia de *back-reaction*. Conforme mayor es el valor de S^2 , mayor es la diferencia con respecto al caso unitario. La tendencia de esta diferencia viene introducida por la parte clásica del Lindbladiano, como muestra la evolución puramente clásica. Sin embargo, el hecho de que la parte cuántica de este Lindbladiano tome diferentes valores según el estado, afecta al operador clásico, provocando que la evolución de éste varíe según el estado cuántico.

A continuación, se representa la evolución de la entropía de von Neumann del subsistema clásico, así como la pureza del estado del mismo.

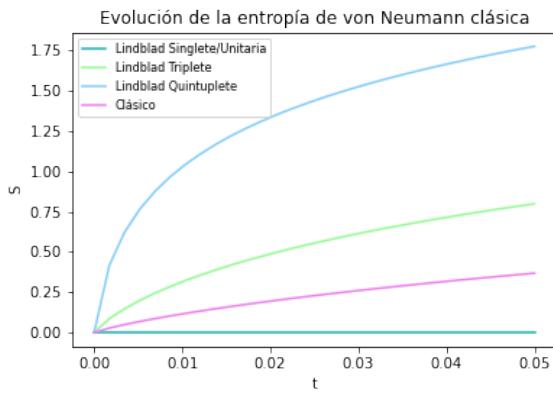


Figura 4.5: Comparación de la evolución Lindbladiana y unitaria de la entropía clásica.

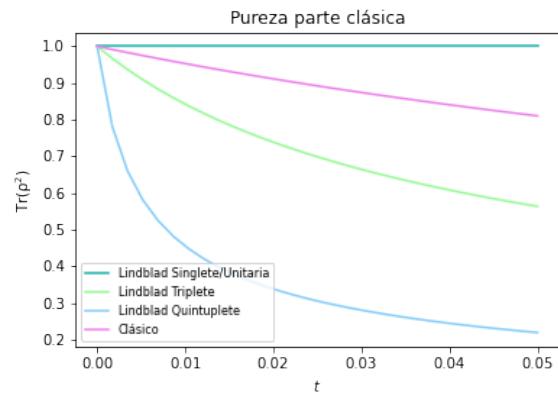


Figura 4.6: Comparación de la evolución Lindbladiana y unitaria de la pureza del estado clásico.

Se observa que la evolución Lindbladiana del singlete y la evolución unitaria mantienen constante la entropía y la pureza del sistema clásico: se trata de un sistema cerrado que no interacciona ni con la parte cuántica ni con el exterior. En cambio, de la evolución puramente clásica se obtiene lo esperado de una evolución Lindbladiana: la entropía aumenta y la pureza disminuye, lo cual es característico de los sistemas abiertos para los cuales se define la dinámica Lindbladiana. En los casos de evolución Lindbladiana para el triplete y quintuplete, se observa esta misma tendencia. El sistema clásico interacciona con el exterior y este grado de interacción depende del estado cuántico, lo cual parece implicar que existe interacción con el subsistema cuántico.

La definición de *back-reaction* es, no obstante, sutil. De hecho, no es posible asegurar que la pérdida de pureza clásica implique que este fenómeno esté sucediendo. Esto se ilustrará en el siguiente ejemplo.

4.4. Ejemplo 3

Para este ejemplo se considerarán los mismos parámetros que el anterior, pero cambiando el operador de Kraus a

$$V_2 = (\hat{Q} + \hat{P}) \otimes S^2 \quad (4.5)$$

Según (3.11), no debería existir *back-reaction*, pues con operadores de Kraus no dependientes de $\hat{\Pi}_q$ y $\hat{\Pi}_p$ se anula el término de interacción en la evolución de operadores puramente clásicos. Lo anterior puede verse en las siguientes representaciones:

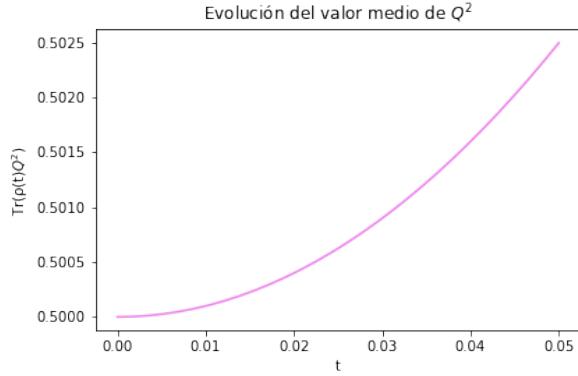


Figura 4.7: Evolución Lindbladiana y unitaria de $\langle \hat{Q}^2 \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ para cualquier estado cuántico inicial.

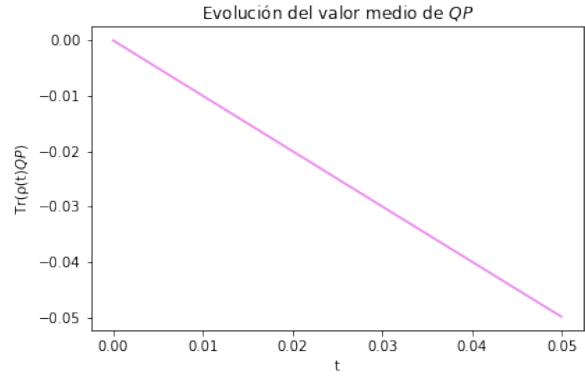


Figura 4.8: Evolución Lindbladiana y unitaria de $\langle \hat{Q}\hat{P} \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$. para cualquier estado cuántico inicial

donde la única trayectoria presentada se corresponde con la dinámica tanto unitaria como Lindbladiana y para estado cuántico singlete, triplete y quintuplete. Si bien se muestran solo para \hat{Q}^2 y $\hat{Q}\hat{P}$, lo mismo ocurre para cualquier otro operador que se trate de representar.

Sin embargo, si ahora se representan la entropía y la pureza del subsistema clásico, cabría esperar no encontrar la dependencia con el estado cuántico del ejemplo anterior.

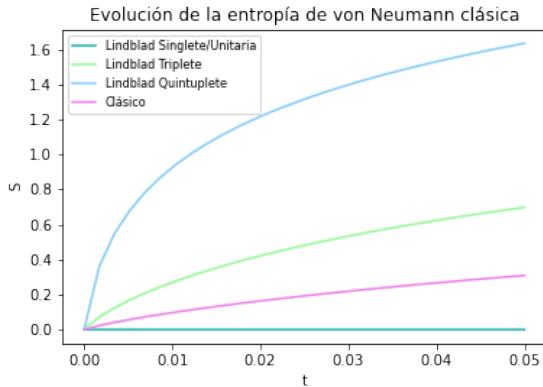


Figura 4.9: Comparación de la evolución Lindbladiana y unitaria de la entropía clásica.

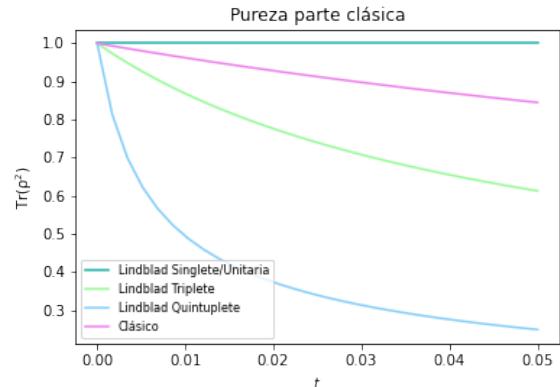


Figura 4.10: Comparación de la evolución Lindbladiana y unitaria de la pureza del estado clásico.

Las *Figuras 4.9 y 4.10* reflejan, no obstante, que sí existe esta dependencia. De hecho, no hay diferencia cualitativa con las representaciones de las *Figuras 4.5 y 4.6*. Además, si se analizan las matrices densidad clásicas, se nota que la evolución de las mismas depende del estado cuántico. Sin embargo, estas diferentes trayectorias de los estados no son vistas por los observables clásicos, pues las medidas sobre ellos son iguales independientemente del estado cuántico. Esto parece indicar que el conjunto de estados clásicos no se corresponde con el conjunto de las matrices densidad completo, sino con un subconjunto de éste, de forma que diferentes trayectorias en el conjunto de matrices densidad se deben corresponder con una misma trayectoria en el conjunto de estados y, por tanto, iguales medidas de cualquier observable. Esto se ilustra en la siguiente imagen.

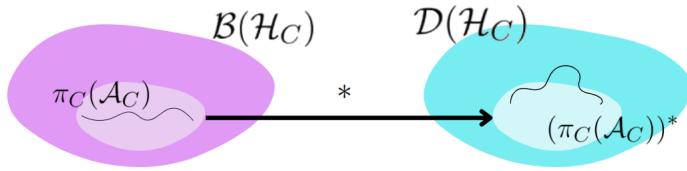


Figura 4.11: *Esquema de la representación de los espacios de estados y observables.*

Así, con la caracterización actual que se tiene del conjunto de estados, no es posible atribuir *back-reaction* a una dependencia de los estados clásicos con los cuánticos, a no ser que ésta implique una dependencia explícita de los operadores clásicos con dichos estados. Dado que la entropía y la pureza dependen únicamente de los estados, la variación de su evolución según el estado cuántico sea singlete, triplete o quintuplete; no implica que exista *back-reaction*. Sería conveniente en trabajos futuros realizar una caracterización más precisa del conjunto de estados clásicos.

Con esto se ha llegado a que la dependencia del subsistema clásico con el cuántico, si bien existe, se reduce al valor que un operador cuántico en el centro del álgebra toma sobre los estados. En sistemas finitos, este número de valores es finito, por lo que, aunque se ve que existe *back-reaction*, éste es parcial.

4.5. Ejemplo 4

A continuación, se empleará el sistema cuya parte cuántica consiste en dos QuBits. Esto permite, con el mismo coste computacional, realizar simulaciones de mayor duración o con operadores de Kraus más complejos. Se va a comparar la dinámica del subsistema cuántico, tanto Lindbladiana como unitaria, con un Hamiltoniano sin término de interacción ($H = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I}_Q + \mathbb{I}_C \otimes \hat{H}_Q$) y con él ($H = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I}_Q + \mathbb{I}_C \otimes \hat{H}_Q + \hat{H}_{CQ}$). Se tomarán $\hat{H}_Q = S_x$ y $\hat{H}_{CQ} = \hat{Q} \otimes S_z$. Los operadores de Kraus utilizados serán $V_1 = (\hat{Q} + \hat{\Pi}_q - \hat{\Pi}_p) \otimes S^2$, $V_2 = (\hat{Q} + \hat{P}) \otimes S^2$ y $V_3 = \hat{Q} \hat{\Pi}_q \otimes S^2$ y el estado inicial en triplete (en este caso las únicas posibilidades son singlete o triplete). Además, la base clásica estará formada por $N = 13$ elementos y se medirá durante un tiempo $t = 2$.

En la *Figura 4.12* se muestra la evolución del estado de uno de los dos QuBits en una esfera de Bloch en diferentes situaciones y con los parámetros indicados.

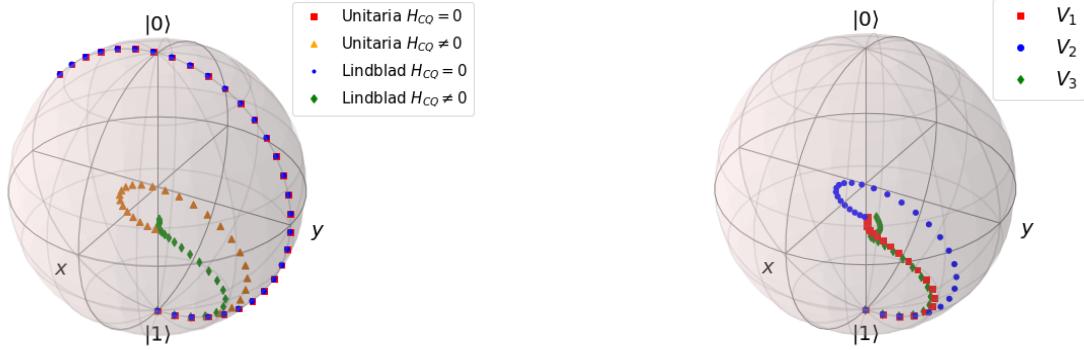


Figura 4.12: Evolución unitaria y Lindbladiana del estado de un QuBit.

Figura 4.13: Evolución Lindbladiana del estado de un QuBit para diferentes operadores de Kraus.

Se puede observar que, sin el Hamiltoniano de interacción, la evolución Lindbladiana del QuBit es idéntica a la unitaria, de forma que la variación de los operadores de Kraus no afecta a dicha dinámica. Esto cambia, al introducir el Hamiltoniano de interacción, de forma que al variar la parte clásica de los operadores de Kraus, la dinámica Limbladiana sí varía. En la *Figura 4.13* vienen representadas varias trayectorias Lindbladianas con Hamiltoniano de interacción y con diferentes operadores de Kraus, lo cual permite visualizar mejor esta variación. Para el operador de Kraus correspondiente, se tiene $\gamma_k = 1$, mientras que para los restantes k dicho coeficiente es nulo.

Por otro lado, en las *Figuras 4.14* y *4.15* se representa lo análogo a la *Figura 4.12* pero con $\hat{H}_C = 0$ y cambiando la condición inicial clásica respectivamente.

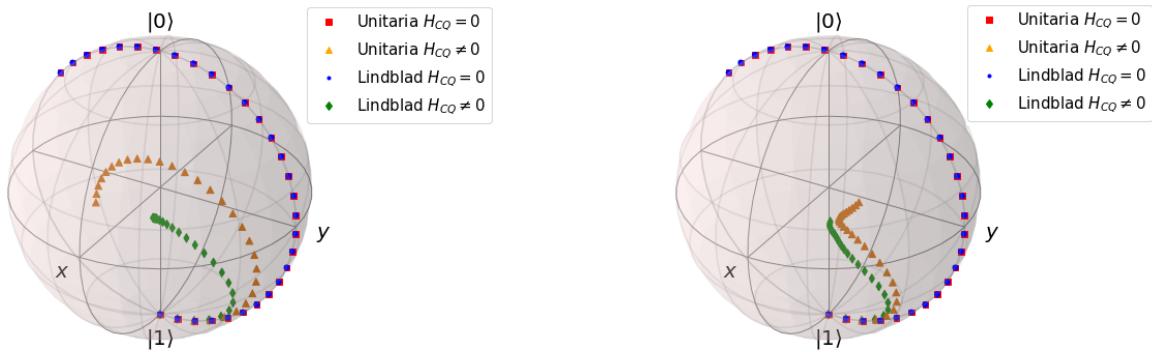


Figura 4.14: Evolución unitaria y Lindbladiana del estado de un QuBit con $\hat{H}_C = 0$.

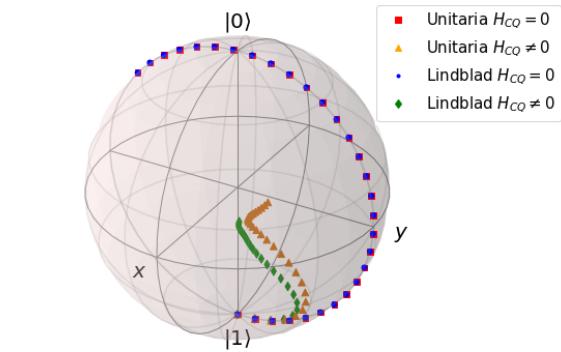


Figura 4.15: Evolución Lindbladiana del estado de un QuBit con condición inicial clásica $\varphi_1 \otimes \varphi_0$.

Al contrario de lo que ocurre con los estados clásicos, estas representaciones evidencian que el Hamiltoniano de interacción provoca una dependencia de la evolución del estado cuántico con el estado clásico.

CAPÍTULO 5

Conclusiones

A lo largo de este trabajo se han resumido las ideas principales del formalismo de Koopman, que permite obtener una formulación de la mecánica clásica análoga a la usual en mecánica cuántica. Además, se ha generalizado esta construcción a sistemas híbridos clásico-cuánticos, construyendo así espacios de observables y estados híbridos. Se han establecido, asimismo, las características que debe satisfacer una dinámica híbrida sobre estos espacios y se ha comprobado que, la dinámica unitaria que las cumple, carece de una característica clave de los sistemas híbridos: los grados de libertad cuánticos no influyen sobre los clásicos, no presenta *back reaction*. Por otro lado, se ha introducido una dinámica markoviana no unitaria, la dinámica Lindbladiana, y se ha sintetizado la obtención de sus características a partir de la suposición de un sistema abierto en contacto con un baño térmico.

Finalmente, la principal aportación de este trabajo ha sido la clasificación de un rango de posibles dinámicas Lindbladianas bien definidas para sistemas híbridos y para las cuales sí existe esta influencia del subsistema cuántico sobre el clásico. Se ha expuesto, además, la principal limitación de estas dinámicas: la dependencia de los grados de libertad clásicos con los cuánticos es parcial, solo influye el valor que determinados operadores cuánticos toman sobre los estados. Por otro lado, se ha determinado que existe una falta de caracterización del conjunto de estados híbridos como elementos del espacio de matrices densidad que deriva en la obtención de resultados aparentemente contradictorios.

Las limitaciones presentadas dejan varias posibles líneas de trabajo futuro: por un lado, la caracterización del conjunto previamente mencionado con el fin de llegar a una mayor comprensión del espacio tratado; y, por otra parte, la búsqueda de otras dinámicas híbridas para las cuales exista un mayor grado de *back-reaction*, obteniendo mejores aproximaciones de los sistemas físicos reales a modelizar. Alternativamente, se abre una línea de investigación consistente en la verificación de que el *ensemble* canónico híbrido es punto fijo estable de alguna de las posibles dinámicas Lindbladianas presentadas en este trabajo, ya que solo así es posible estudiar termodinámica del sistema híbrido.

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. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 44(39):395004, September 2011.
- [2] J. L. Alonso, C. Bouthelier, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, and J. A. Jover-Galtier. Entropy and canonical ensemble of hybrid quantum classical systems. *Phys. Rev. E*, 102(4):042118, October 2020.
- [3] B. O. Koopman. Hamiltonian Systems and Transformation in Hilbert Space. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 17(5):315–318, May 1931.
- [4] C. Bouthelier-Madre, J. Clemente-Gallardo, L. González-Bravo, and D. Martínez-Crespo. Hybrid Koopman C^* -formalism and the hybrid quantum–classical master equation*. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 56(37):374001, August 2023.
- [5] Dariusz Chruściński. Koopman’s approach to dissipation. *Reports on Mathematical Physics*, 3(57):319–332, 2006.
- [6] I. E. Segal. Irreducible representations of operator algebras. *Bull. A.M.S.*, 53(2):73–88, 1947.
- [7] Heinz-Peter Breuer and Francesco Petruccione. *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford University Press, 2002.
- [8] Vittorio Gorini, Andrzej Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan. Completely positive dynamical semigroups of N-level systems. *Journal of Mathematical Physics*, 17(5):821–825, May 1976.
- [9] Jorge Alberto Jover Galtier. *Sistemas cuánticos abiertos: descripción geométrica, dinámica y control*. <http://purl.org/dc/dcmitype/Text>, Universidad de Zaragoza, 2017.
- [10] G. Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Commun. Math. Phys.*, 48(2):119–130, June 1976.
- [11] Paul Rosa Ruiz, Jesús Clemente Gallardo, and David Martínez Crespo. *Formalismo de Koopman para sistemas híbridos*. Universidad de Zaragoza, Zaragoza, 2023.
- [12] F. Strocchi. *An Introduction to the Mathematical Structure of Quantum Mechanics: A Short Course for Mathematicians*. World Scientific, 2008.
- [13] Ralph Abraham and Jerrold E. Marsden. *Foundations of Mechanics*. A.M.S., 2008.
- [14] Takasi Turumaru. On the Direct-Product of Operator Algebras II. *Tohoku Mathematical Journal, Second Series*, 5(1):1–7, 1953.

APÉNDICE A

Formalismo geométrico de la mecánica clásica

A continuación se presentan una serie de nociones básicas de la mecánica clásica descrita en variedades diferenciables siguiendo [13]. En el *Apéndice F* se presentan algunas definiciones auxiliares de utilidad relativas a geometría diferencial.

A.1. Fibrados cotangentes

Consideremos un sistema cuyo espacio de coordenadas $\{q^i\}$ es una variedad diferenciable M y los momentos $\{p_i\}$ se corresponden con coordenadas en las fibras de su fibrado cotangente T^*M . Se trata de una generalización del caso en el que el espacio de coordenadas es \mathbb{R}^n , ya que son localmente equivalentes.

Definición A.1.1. *Se denomina forma de Liouville a la 1-forma θ que en el conjunto natural de coordenadas toma la expresión*

$$\theta = p_idq^i \quad (\text{A.1})$$

Intrínsecamente, se puede definir como la 1-forma $\theta \in \Lambda^1(T^*M)$ que, dado $\alpha \in T^*M$, satisface

$$\theta(\alpha)(V) = \alpha(\pi_{*\alpha}V) \quad \forall V \in T_\alpha T^*M \quad (\text{A.2})$$

con π la proyección natural del fibrado cotangente y $T_\alpha T^*M$ el conjunto de vectores de T^*M tangentes a α .

Definición A.1.2. *Sea M una variedad diferenciable y $\omega \in \Lambda^2(M)$ una 2-forma. Diremos que ω es una forma simplectica si y solo si*

- *es cerrada, esto es $d\omega = 0$*
- *es no degenerada, es decir, dado un campo vectorial $X \in \mathcal{X}(M)$, la relación*

$$\omega(X, Y) = 0 \quad \forall Y \in \mathcal{X}(M)$$

implica que $X = 0$

Proposición A.1.3. *Sea M una variedad diferenciable, $\omega \in \Lambda^2(M)$ es no degenerada si y solo si la forma*

$$\Omega = \overbrace{\omega \wedge \dots \wedge \omega}^{n \text{ veces}} \quad (\text{A.3})$$

es una forma de volumen.

En un fibrado cotangente T^*M , la 2-forma $\omega \in \Lambda^2(T^*M)$ dada por $\omega = -d\theta$ es simpléctica, y se denomina forma simpléctica canónica. Al tomar una carta y coordenadas $\{q^i, p_i\}$, la expresión de esta 2-forma es $\omega = \sum_i dq^i \wedge dp_i$.

Consideremos la aplicación $\hat{\omega}$ dada por

$$\begin{aligned} \hat{\omega} : T(T^*M) &\longrightarrow T^*T^*M \\ X &\longmapsto \hat{\omega}(X) = \omega(X, \cdot) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Entonces, la aplicación $\hat{\omega} : \mathcal{X}(T^*M) \rightarrow \Lambda^1(T^*M)$ es un isomorfismo.

Definición A.1.4. *Sea $f \in C^\infty(T^*M)$, se define el **campo vectorial Hamiltoniano** asociado a f como el campo vectorial*

$$X_f = \hat{\omega}^{-1}(df)$$

Proposición A.1.5. *Sea $H \in C^\infty(T^*M)$, decimos que una curva $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow T^*M$ es solución de la dinámica Hamiltoniana definida por la función H si y solo si es la curva integral del campo vectorial Hamiltoniano X_H definido como*

$$\hat{\omega}(X_H) = i_{X_H}\omega = dH \quad (\text{A.5})$$

Esto ha permitido definir una mecánica hamiltoniana. Se puede comprobar además que, considerando el conjunto de coordenadas $\{q^i, p_i\}$, el campo vectorial Hamiltoniano es de la forma

$$X_H = \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial H}{\partial q^i} \frac{\partial}{\partial p_i} \quad (\text{A.6})$$

y sus curvas integrales se corresponden con las soluciones de las ecuaciones de Hamilton, recuperando la formulación habitual de la mecánica clásica en \mathbb{R}^n .

A.2. Variedades simplécticas

La descripción anterior de la mecánica clásica puede ser generalizada a variedades diferenciables más generales: variedades simplécticas.

Definición A.2.1. *Un par (M, ω) representa una **variedad simpléctica** si y solo si M es una variedad diferenciable y $\omega \in \Lambda^2(M)$ es una forma simpléctica definida en ella.*

Es preciso encontrar un atlas adecuado para la formulación de la mecánica Hamiltoniana de forma análoga al caso anterior.

Teorema A.2.2. (*de Darboux*) *Sea M una variedad diferenciable de dimensión par $2n$ y $\omega \in \Lambda^2(M)$ una 2-forma no degenerada. Entonces ω es cerrada si y solo si existe una carta (U, ϕ) para cada punto $p \in M$ de forma que $\phi(p) = 0$ y la expresión de la 2-forma en coordenadas locales $\{q^i, p_i\}_{i=1, \dots, n}$ es*

$$(\phi^{-1})^* \omega|_U = \sum_{i=1}^n dq^i \wedge dp_i \quad (\text{A.7})$$

Esta carta se denomina carta de Darboux.

Definición A.2.3. *Se define el **atlas de Darboux** como el atlas formado por las cartas de Darboux.*

Esto permite definir la aplicación $\hat{\omega}$ a partir de ω de forma análoga a fibrados cotangentes, definiendo asimismo el campo vectorial Hamiltoniano asociado a una función $f \in C^\infty(M)$ como

$$X_f = \hat{\omega}^{-1}(df)$$

Se denomina **sistema Hamiltoniano** al conjunto (M, ω, H) , de forma que un sistema dinámico está definido en M a través de las curvas integrales del campo vectorial Hamiltoniano X_H . En el atlas de Darboux, las curvas integrales de X_H son soluciones de las ecuaciones de Hamilton:

$$\begin{cases} \frac{dq^i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q^i} \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Basándose en la idea de que la dinámica viene directamente generada por el Hamiltoniano del sistema, $H \in C^\infty(M)$, y las soluciones son las curvas integrales en M de la forma $\{q(t), p(t)\}$, se trata de buscar una estructura definida directamente en el espacio de funciones que defina las curvas $\{q(t), p(t)\}$. Esta estructura es el paréntesis de Poisson.

Definición A.2.4. *Sean (M, ω) una variedad simplectica, $f, g \in C^\infty(M)$ dos funciones en M y $X_f, X_g \in \mathcal{X}(M)$ sus correspondientes campos vectoriales Hamiltonianos. Se define el **paréntesis de Poisson** de f y g como la función*

$$\{f, g\} = \omega(X_f, X_g) \quad (\text{A.9})$$

Dado que la correspondencia entre funciones y campos vectoriales está bien definida, se puede definir una operación en el conjunto de las funciones:

$$\begin{aligned}\{\cdot, \cdot\} : C^\infty(M) \times C^\infty(M) &\longrightarrow C^\infty(M) \\ (f, g) &\longmapsto \{f, g\}\end{aligned}\tag{A.10}$$

Definición A.2.5. *El conjunto $C^\infty(M)$ dotado de la operación $\{\cdot, \cdot\}$ es un álgebra anticomutativa que satisface*

- *La regla de Leibniz*

$$\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\} \quad \forall f, g, h \in C^\infty(M)\tag{A.11}$$

- *La identidad de Jacobi*

$$\{f, \{g, h\}\} + \{h, \{f, g\}\} + \{g, \{h, f\}\} = 0 \quad \forall f, g, h \in C^\infty(M)\tag{A.12}$$

*El conjunto $(C^\infty(M), \{\cdot, \cdot\})$ se conoce como el **álgebra de Poisson** de una variedad simpléctica.*

Con esta definición, la mecánica hamiltoniana puede ser formulada en el álgebra de Poisson:

$$\begin{cases} \frac{dq(t)}{dt} = \{q(t), H\} \\ \frac{dp(t)}{dt} = \{p(t), H\} \end{cases}\tag{A.13}$$

La formulación anterior permite generalizar el formalismo a otras variedades diferenciables no simplécticas: variedades de Poisson.

APÉNDICE B

C^* -álgebras y construcción GNS

La construcción Gelfand-Naimark-Segal[6] es lo que permite, dadas las C^* -álgebras clásica y cuántica, encontrar las representaciones sobre el conjunto de operadores lineales acotados que actúan sobre los espacios de Hilbert clásico y cuántico, respectivamente. A lo largo de la sección se seguirá el razonamiento de [4] para definir las C^* -álgebras clásica, cuántica e híbrida y sus representaciones. También en el *Apéndice F* se exponen algunas definiciones y resultados auxiliares sobre teoría de C^* -álgebras y representaciones.

Esta construcción asegura que, dada una C^* -álgebra \mathcal{A} y un estado sobre ella, siempre se puede construir una representación de \mathcal{A} en el conjunto de los operadores lineales acotados sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} , de forma que el estado está asociado a un vector cíclico en el espacio de Hilbert cuya órbita bajo la representación de \mathcal{A} es densa en \mathcal{H} .

B.1. C^* -álgebra clásica

La formulación habitual de la mecánica clásica describe los estados como elementos de la variedad diferenciable \mathcal{M}_C , que constituye el espacio de fases clásico, de forma que los observables son las funciones complejas sobre esta variedad. Se puede considerar que el conjunto de las funciones complejas de soporte compacto contiene todos los observables clásicos. Veamos, además, que se puede dotar a este conjunto, que denotaremos \mathcal{A}_C de una estructura de C^* -álgebra, a través de

- El producto punto a punto \cdot_C
- La conjugación compleja como involución $f^* = \bar{f}$
- La definición de la norma en \mathcal{A}_C como $\|f\|_{\mathcal{A}_C} = \sup\{|f(x)|, x \in \mathcal{M}_C\}$, $\forall f \in \mathcal{A}_C$

Con estas operaciones, se puede comprobar que el conjunto \mathcal{A}_C es un espacio de Banach y un álgebra involutiva, verificando la propiedad F.5. Por tanto, es una C^* -álgebra que, además, contiene a los observables clásicos. Realmente la compacidad del soporte de las funciones consideradas restringe los observables a aquellos acotados, pero esto no supone una limitación real física, puesto que este conjunto es denso en el espacio de funciones integrables respecto a la medida de la densidad clásica, que contiene a los observables con valor esperado bien definido y, por tanto, con sentido físico.

El teorema de representación de Reisz-Markov(F.3.6), asegura que el conjunto de estados se corresponde con las medidas de Radon sobre el espacio de fases clásico \mathcal{M}_C . Además, cada una de éstas puede relacionarse con la medida simpléctica μ mediante la derivada de Radon-Nikodyn(F.3.3), de forma que para cada $\omega \in \mathcal{A}_C^*$ existe una función densidad de probabilidad $F_C : \mathcal{M}_C \rightarrow \mathbb{R}^+$ que cumple

$$\omega(f) = \int_{\mathcal{M}_C} f F_C d\mu, \quad \forall f \in \mathcal{A}_C \quad (\text{B.1})$$

En [4] se demuestra cómo, cada uno de estos estados está asociado a una matriz densidad sobre el espacio de Hilbert clásico, dada por

$$\hat{\rho}_C = \int_{\mathcal{M}_C} d\mu(\xi) \int_{\mathcal{M}_C} d\mu(\xi') \sqrt{F_C(\xi) F_C(\xi')} |\xi\rangle\langle\xi'| \quad (\text{B.2})$$

B.2. Representación de la C^* -álgebra cuántica

La formulación habitual de la mecánica cuántica describe los estados cuánticos como elementos de un espacio de Hilbert \mathcal{H}_Q , de forma que los observables se corresponden con los operadores autoadjuntos sobre este espacio de Hilbert. Si consideramos el conjunto de todos los operadores acotados sobre este espacio de Hilbert, $\mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$, se tiene que este conjunto es una C^* -álgebra \mathcal{A}_Q con la involución definida como el adjunto ($A^* = A^\dagger, \forall A \in \mathcal{A}_Q$) y la norma definida como

$$\|A\| = \sup\{\|A\psi\|, \psi \in \mathcal{H}, \|\psi\| = 1\}, \forall A \in \mathcal{A}_Q$$

Además, el conjunto de los observables cuánticos $\mathcal{O} = \{A \in \mathcal{A}_Q | A = A^\dagger\}$ está contenido en \mathcal{A}_Q , con lo que la representación $\pi_Q : \mathcal{A}_Q \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$ es la identidad.

Por otro lado, el teorema de Gleason (F.4.2) permite asegurar que los estados cuánticos se corresponden uno a uno con matrices densidad sobre el espacio de Hilbert cuántico, esto es, elementos de

$$\mathcal{D}(\mathcal{H}_Q) = \{\rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q) | \rho = \rho^+, \rho \geq 0, \text{Tr}\rho = 1\} \quad (\text{B.3})$$

B.3. C^* -álgebra híbrida

La definición natural de la C^* -álgebra híbrida, es como el producto tensorial de las C^* -álgebras clásica y cuántica, dado que el sistema híbrido es un límite parcial clásico de un sistema cuántico, donde la C^* -álgebra total sería el producto tensorial de las correspondientes a sus subsistemas. Los elementos del espacio $\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$ serán de la forma

$$f = \sum_k \gamma_k a_k \otimes A_k, \quad a_k \in \mathcal{A}_C, A_k \in \mathcal{A}_Q, \gamma_k \in \mathbb{C}, \forall k \quad (\text{B.4})$$

Este espacio está dotado de estructura de C^* -álgebra con las operaciones:

- Producto híbrido:

$$(a \otimes A) \cdot_H (b \otimes B) = (a \cdot_C b) \otimes (A \cdot_Q B), \quad \forall a, b \in \mathcal{A}_C, A, B \in \mathcal{A}_Q \quad (\text{B.5})$$

- La involución:

$$f^* = \sum_k \bar{\gamma}_k a_k^* \otimes A_k^\dagger \quad (\text{B.6})$$

- La norma espacial en $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ con la inclusión de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q) \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ y la definición de la representación $\pi_H = \pi_C \otimes \pi_Q$

$$\|f\| = \|\pi_H(f)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)} \quad (\text{B.7})$$

Para la definición de norma existen diferentes posibilidades, pero se toma ésta, introducida en [14], por ser invariante bajo la representación GNS.

En cuanto a los estados sobre la C^* -álgebra \mathcal{A}_H , se tiene que estos serán operadores cuánticos parametrizados por variables reales $\hat{\rho}(\xi)$ tales que $\int_{\mathcal{M}_C} d\mu(\xi) \text{Tr}(\hat{\rho}(\xi)) = 1$. Por el teorema de Gleason, estos estados se corresponden con elementos del conjunto de matrices densidad híbridas $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q)$. En [4] se prueba esta correspondencia viene dada por

$$\hat{\rho}_H = \sum_{m,m'} \int_{\mathcal{M}_C} \int_{\mathcal{M}_C} d\mu(\xi) d\mu(\xi') \rho_{mm'}(\xi, \xi') |\xi, m\rangle \langle \xi', m'| \quad (\text{B.8})$$

donde $\rho_{mm'}(\xi, \xi') = \sqrt{\langle m | \hat{\rho}(\xi) | m' \rangle \langle m | \hat{\rho}(\xi') | m' \rangle}$, $\{|m\rangle\}$ es una base del espacio de Hilbert cuántico y $\{|\xi\rangle\}$ una base del espacio de Hilbert clásico. Además, también se demuestra que la entropía híbrida está bien definida como la entropía de von Neumann sobre las matrices densidad $\hat{\rho}_H$:

$$S_{vN}[\hat{\rho}_H] = -\text{Tr}(\hat{\rho}_H \log \hat{\rho}_H) = - \int_{\mathcal{M}_C} d\mu(\xi) \text{Tr}(\hat{\rho}(\xi) \log \hat{\rho}(\xi)) = S_H[\hat{\rho}(\xi)] \quad (\text{B.9})$$

APÉNDICE C

Ecuación maestra de Lindblad

C.1. Aproximaciones

A lo largo del desarrollo descrito en la *Sección 2.2*, se han mencionado diferentes aproximaciones y suposiciones que permiten llegar a la forma general de la ecuación de Lindblad. Veamos en detalle cómo estas aproximaciones permiten obtener el resultado y sus implicaciones sobre el sistema.

Se parte de un sistema reducido S y el reservorio B acoplados, de forma que el Hamiltoniano es suma de tres términos, $H = H_S + H_B + H_I$ donde H_S y H_B actúan únicamente sobre grados de libertad de los sistemas S y B respectivamente, mientras que H_I es un Hamiltoniano de interacción.

En la modelización de un sistema cuántico cerrado existe una perspectiva intermedia entre la representación de Schrödinger y la de Heisenberg, denominada representación de interacción [7], en la cual tanto operadores como estados evolucionan. La dinámica de los operadores está regida por el Hamiltoniano libre, mientras que la de los estados lo está por el Hamiltoniano de interacción. En esta representación, los estados evolucionan según la ecuación de von Neumann con el Hamiltoniano H_I , la cual se puede escribir tanto en forma diferencial como integral, como

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H_I(t), \rho(t)] \quad \longleftrightarrow \quad \rho(t) = \rho(0) - i \int_0^t ds [H_I(s), \rho(s)] \quad (\text{C.1})$$

La primera de las aproximaciones, denominada aproximación de Born, proviene de suponer que el acoplamiento entre los dos subsistemas es débil. Esto permite asumir la siguiente igualdad

$$\text{Tr}_B[H_I(t), \rho(0)] = 0 \quad (\text{C.2})$$

Lo anterior traduce la ecuación de von Neumann para los estados (diferencial e integral combinadas) en

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = - \int_0^t ds \text{Tr}_B[H_I(t), [H_I(s), \rho(s)]] \quad (\text{C.3})$$

La condición de acople débil conduce a la asunción de que la influencia del sistema reducido sobre el reservorio es baja, de forma que las excitaciones producidas en éste decaen muy rápidamente y el estado del sistema se puede escribir como

$$\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B \quad (\text{C.4})$$

con ρ_B el estado estacionario de equilibrio térmico del reservorio.

La segunda aproximación se denomina aproximación de Markov. Se puede tomar bajo la suposición de que las funciones de correlación del reservorio tienen tiempos característicos de decaimiento τ_B de escala mucho más pequeña que la escala de tiempo de relajación del sistema τ_R . Para que esto ocurra, el reservorio debe tener tamaño infinitamente grande y un espectro continuo de frecuencias.

Esta aproximación permite sustituir en (C.3) $\rho(s)$ por $\rho(t)$ en la integral, de forma que el estado en un tiempo t depende únicamente del estado en ese tiempo, despreciando efectos de memoria. Realizando un cambio de variable s por $t - s$ se puede, además, extender el límite de la integral al infinito, ya que la suposición implica que el integrando se anula para valores de s superiores a τ_B . Así, se obtiene la ecuación maestra Markoviana.

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = - \int_0^\infty ds Tr_B[H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_B]] \quad (\text{C.5})$$

La tercera aproximación, denominada aproximación secular, consiste en realizar un promedio sobre los términos que oscilan a alta frecuencia, lo cual se puede suponer cuando la escala característica de tiempos de evolución del sistema reducido τ_S es mucho mayor que la relativa al tiempo de relajación τ_R . Para realizar la aproximación, es conveniente escribir el Hamiltoniano de interacción H_I , como suma de operadores propios de H_S . Partiendo de $H_I = \sum_\alpha A_\alpha \otimes B_\alpha$, se definen los operadores

$$A_\alpha(\omega) \equiv \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \Pi(\varepsilon) A_\alpha \Pi(\varepsilon') \quad (\text{C.6})$$

$$B_\alpha(t) \equiv e^{iH_B t} B_\alpha e^{-iH_B t} \quad (\text{C.7})$$

con $\varepsilon, \varepsilon'$ sumando en los autovalores de H_S , $\Pi(\varepsilon)$ siendo el proyector sobre el subespacio propio de autovalor ε y ω una diferencia de energías fija. En [7] se expone cómo estas definiciones transforman (C.5) en

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) = & \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) [A_\beta(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega') A_\beta(\omega) \rho_S(t)] + \\ & + \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{-i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega) [A_\alpha(\omega') \rho_S(t) A_\beta^\dagger(\omega) - \rho_S(t) A_\beta^\dagger(\omega) A_\alpha(\omega')] \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

con $\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \equiv \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle$. Los términos $\langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle$ son funciones de correlación del reservorio.

De esta forma, si se asume precisamente que $\tau_S \gg \tau_R$, se pueden despreciar los términos en los cuales $\omega \neq \omega'$, al oscilar muy rápido en comparación con la evolución del estado ρ_S . Esto conduce, tras una serie de cálculos, a la ecuación maestra de Lindblad en su forma más general (2.14). En ella, los parámetros γ_k provienen de la diagonalización de la matriz cuyos elementos son

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta\alpha}^* = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha(S) B_\beta(0) \rangle \quad (\text{C.9})$$

de forma que, en efecto, son positivos y están relacionados con las funciones de correlación del reservorio. Además, los operadores de Kraus se corresponden con los operadores $A_\alpha(\omega)$ en la base en la que la anterior matriz es diagonal y, por tanto, tienen relación con el Hamiltoniano de interacción del sistema.

C.2. Forma general de la ecuación de Lindblad

En esta sección se va a ver cómo, partiendo de la definición de la aplicación dinámica $V(t)$, se obtiene la forma general de la ecuación de Lindblad para la evolución de sistemas cuánticos abiertos. Esta deducción se sigue de [7], pero se puede encontrar un desarrollo matemático más riguroso en [8] o [10].

Se ha descrito el sistema abierto (S) como parte de un sistema mayor cerrado, $S + B$, donde B es el denominado reservorio y de forma que S y B están acoplados. La dinámica de los estados del sistema reducido, S , viene dada por

$$\rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) = \text{Tr}_B\{U(t,0)[\rho_S(0) \otimes \rho_B]U^\dagger(t,0)\} \quad (\text{C.10})$$

con $U(t,0)$ un operador unitario, ρ_B el estado de equilibrio térmico del sistema B y $V(t)$ la aplicación dinámica.

Escogiendo una base de \mathcal{H}_B , $(|\varphi_\alpha\rangle)_{\alpha=1,\dots,\text{dim}(\mathcal{H}_B)}$, se obtiene la descomposición espectral de ρ_B en dicha base.

$$\rho_B = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |\varphi_{\alpha}\rangle \langle \varphi_{\alpha}| \quad (\text{C.11})$$

Los parámetros λ_{α} son no negativos y satisfacen $\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} = 1$. Con esto, se definen los operadores $W_{\alpha\beta}$ en cada $t \geq 0$ como

$$W_{\alpha\beta}(t) = \sqrt{\lambda_{\beta}} \langle \varphi_{\alpha} | U(t,0) | \varphi_{\beta} \rangle \quad (\text{C.12})$$

Esta definición conduce directamente a la representación de la dinámica en función de los operadores $W_{\alpha\beta}$:

$$\begin{aligned}
\rho_S(t) &= Tr_B\{U(t,0)[\rho_S(0) \otimes \sum_{\beta} \lambda_{\beta} |\varphi_{\beta}\rangle\langle\varphi_{\beta}|]U^{\dagger}(t,0)\} = \\
&= \sum_{\alpha,\beta} \langle\varphi_{\alpha}|U(t,0)[\rho_S(0) \otimes \lambda_{\beta} |\varphi_{\beta}\rangle\langle\varphi_{\beta}|]U^{\dagger}(t,0)|\varphi_{\alpha}\rangle \implies \\
&\implies \rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) = \sum_{\alpha,\beta} W_{\alpha\beta}(t)\rho_S(0)W_{\alpha\beta}^{\dagger}(t) \quad \forall t \geq 0
\end{aligned} \tag{C.13}$$

El hecho de que $U(t,0)$ sea unitario, junto con la condición de que la suma de los parámetros λ_{α} sea la unidad, garantizan que la aplicación dinámica sea completamente positiva y conserve la traza.

Se ha visto, además, que imponiendo la propiedad de semigrupo la dinámica generada es Markoviana, dada por la ecuación

$$\dot{\rho}_S(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) \tag{C.14}$$

con \mathcal{L} el generador del semigrupo dinámico cuántico o Lindbladiano.

Veamos la construcción de la forma más general de esta ecuación, dada por (2.14). Para ello, se considera que el espacio de Hilbert del sistema reducido tiene dimensión finita N y se toma una base ortonormal del espacio de matrices densidad, $(F_i)_{i=1,\dots,N^2}$. Concretamente, se toma la base tal que un elemento sea proporcional a la identidad $(F_{N^2} = \frac{1}{\sqrt{N}}\mathbb{I}_S)$ y los restantes tengan traza nula. En esta base, los operadores $W_{\alpha\beta}(t)$ se pueden escribir como

$$W_{\alpha\beta}(t) = \sum_{i=1}^{N^2} F_i (F_i, W_{\alpha\beta}(t)) \quad \forall t \geq 0, \alpha, \beta = 1, \dots, \dim(\mathcal{H}_B) \tag{C.15}$$

Esto conduce a una expresión de la dinámica de los estados en función de los elementos de la base:

$$\rho_S(t) = V(t)\rho_S(0) = \sum_{i,j=1}^{N^2} c_{ij}(t) F_i \rho_S(0) F_j^{\dagger} \tag{C.16}$$

donde los coeficientes c_{ij} toman la expresión

$$c_{ij}(t) = \sum_{\alpha,\beta} (F_j, W_{\alpha\beta}(t)) (F_j, W_{\alpha\beta}(t))^* \tag{C.17}$$

Se puede comprobar que la matriz formada por los coeficientes (c_{ij}) es hermítica y positiva. Así, dado que $V(t) = \exp(\mathcal{L}t) \forall t \geq 0$, y $\{V(t)|t \geq 0\}$ satisface la propiedad de semigrupo, se tiene

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\rho_S(t) = \dot{\rho}_S(t) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{V(t + \varepsilon)\rho_S(0) - V(t)\rho_S(0)}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{V(\varepsilon)\rho_S(t) - \rho_S(t)}{\varepsilon} = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{N} \frac{c_{N^2N^2}(\varepsilon) - N}{\varepsilon} \rho_S(t) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} \left(\frac{c_{iN^2}(\varepsilon)}{\varepsilon} F_i \rho_S(t) + \frac{c_{N^2i}(\varepsilon)}{\varepsilon} \rho_S(t) F_j^\dagger \right) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} \frac{c_{ij}(\varepsilon)}{\varepsilon} F_i \rho_S(t) F_j^\dagger \right] = -i[H, \rho_S(t)] + \{G, \rho_S(t)\} + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_i \rho_S(t) F_j^\dagger \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

donde se han definido los siguientes coeficientes

$$a_{N^2N^2} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{c_{N^2N^2}(\varepsilon) - N}{\varepsilon}, \quad a_{ij} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{c_{ij}(\varepsilon)}{\varepsilon} \quad (i \neq N^2 \vee j \neq N^2) \quad (\text{C.19})$$

y los siguientes operadores

$$F = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N^2-1} a_{iN^2} F_i, \quad G = \frac{1}{2N} a_{N^2N^2} \mathbb{I}_S + \frac{1}{2} (F^\dagger + F), \quad H = \frac{1}{2i} (F^\dagger - F) \quad (\text{C.20})$$

La propiedad de conservación de la traza de la aplicación \mathcal{L} permite establecer la relación

$$G = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} F_j^\dagger F_i \quad (\text{C.21})$$

lo que conduce directamente a la ecuación

$$\dot{\rho}_S(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) = -i[H, \rho_S(t)] + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left(F_i \rho_S(t) F_j^\dagger - \frac{1}{2} \{F_j^\dagger F_i, \rho_S(t)\} \right) \quad (\text{C.22})$$

Finalmente, la matriz de coeficientes $a = (a_{ij})$ (denominada matriz de decoherencia por su significado físico) es positiva, lo que garantiza la existencia de una transformación unitaria a una matriz diagonal, es decir, existe u unitaria de forma que

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i,j=1}^{N^2-1} u_{ki} a_{ij} u_{lj}^* = \gamma_k \delta_{kl} \\ F_i = \sum_{i=1}^{N^2-1} u_{ki} A_k \end{array} \right. \quad (\text{C.23})$$

con $\{\gamma_k\}_{k=1,\dots,N^2-1}$ un conjunto de $N^2 - 1$ parámetros no negativos y $\{A_k\}_{k=1,\dots,N^2-1}$ una nueva familia de operadores (operadores de Kraus). La diagonalización de la matriz de decoherencia es lo que permite obtener finalmente la ecuación maestra de Lindblad en su forma habitual.

$$\dot{\rho}_S(t) = \mathcal{L}\rho_S(t) = -i[H, \rho_S(t)] + \sum_k^{N^2-1} \gamma_k \left(A_k \rho_S(t) A_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ A_k^\dagger A_k, \rho_S(t) \} \right) \quad (\text{C.24})$$

APÉNDICE D

Cierre del álgebra en la dinámica Lindbladiana

Se pretende encontrar las condiciones bajo las cuales la dinámica dada por (3.8) con operadores de Kraus de la forma (3.10) preserva el álgebra de operadores, esto es,

$$\mathcal{L}^\dagger(\pi_H(\mathcal{A}_H)) \subset \pi_H(\mathcal{A}_H) \quad (\text{D.1})$$

Para ello, basta ver que $\forall \hat{A}_C \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$ y $\forall \hat{A}_Q \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$ se tiene

$$\mathcal{L}^\dagger(\hat{A}_C \otimes \hat{A}_Q) \in \pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q) = \pi_H(\mathcal{A}_H) \quad (\text{D.2})$$

ya que cualquier elemento de $\pi_H(\mathcal{A}_H)$ se puede escribir como combinación lineal de elementos de la forma $\hat{A}_C \otimes \hat{A}_Q$ y el operador \mathcal{L}^\dagger es lineal. Así, sean $\hat{A}_C \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$ y $\forall \hat{A}_Q \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^\dagger(\hat{A}_C \otimes \hat{A}_Q) = & -i[\hat{H}, \hat{A}_C \otimes \hat{A}_Q] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left\{ \left[d_k^\dagger \hat{A}_C d_k + \sum_{s=1}^n \sum_{i=q,p} \left(d_k^\dagger \hat{A}_C e_{kis} \hat{\Pi}_{is} + \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C d_k \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{s,r=1}^n \sum_{i,j=q,p} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} \right] \otimes (a_k^\dagger \hat{A}_Q a_k) \right\} - \\ & -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left\{ \left[\hat{A}_C d_k^\dagger d_k + \sum_{s=1}^n \sum_{i=q,p} \left(\hat{A}_C d_k^\dagger e_{kis} \hat{\Pi}_{is} + \hat{A}_C \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger d_k \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{s,r=1}^n \sum_{i,j=q,p} \hat{A}_C \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} \right] \otimes (\hat{A}_Q a_k^\dagger a_k) \right\} - \\ & -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left\{ \left[d_k^\dagger d_k \hat{A}_C + \sum_{s=1}^n \sum_{i=q,p} \left(d_k^\dagger e_{kis} \hat{\Pi}_{is} \hat{A}_C + \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger d_k \hat{A}_C \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{s,r=1}^n \sum_{i,j=q,p} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} \hat{A}_C \right] \otimes (a_k^\dagger a_k \hat{A}_Q) \right\} \end{aligned}$$

Se tiene,

- $-i[\hat{H}, \hat{A}_C \otimes \hat{A}_Q] \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$ dado que el Hamiltoniano es de la forma descrita en el caso unitario, de forma que las condiciones impuestas sobre éste garantizan que este elemento pertenezca al álgebra de operadores.
- $d_k^\dagger \hat{A}_C d_k \otimes a_k^\dagger \hat{A}_Q a_k \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$, $\hat{A}_C d_k^\dagger d_k \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$ y $d_k^\dagger d_k \hat{A}_C \otimes a_k^\dagger a_k \hat{A}_Q \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$, $\forall k = 1, \dots, N^2 - 1$ ya que $d_k, d_k^\dagger \in \pi_C(\mathcal{A}_C) \forall k = 1, \dots, N^2 - 1$. Cuando se tome a_k en el centro del álgebra de operadores cuánticos, estos términos se anularán entre ellos, ya que serán los tres idénticos.

Así, si se tuviese $e_{kis} = 0 \forall k = 1, \dots, N^2 - 1, \forall s = 1, \dots, n \forall i = q, p$ se tendría necesariamente $\mathcal{L}^\dagger(\hat{A}_C \otimes \hat{A}_Q) \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$.

Ahora bien, si existe $k \in \{1, \dots, N^2 - 1\}$ tal que $e_{kqs} \neq 0$ o $e_{kps} \neq 0$ para algún $s \in \{1, \dots, n\}$, entonces, suponiendo que a_k es un elemento del álgebra cuántica, se cumple

- Por un lado, $\hat{A}_C, d_k^\dagger, e_{kis}$ commutan $\forall i, s$ por ser elementos del álgebra clásica de operadores y \hat{A}_Q commuta con a_k y a_k^\dagger por ser a_k un elemento del Centro del álgebra. Así,

$$\begin{aligned} & \sum_{s=1}^n \sum_{i=q,p} \left[d_k^\dagger \hat{A}_C e_{kis} \hat{\Pi}_{is} \otimes a_k^\dagger \hat{A}_Q a_k - \frac{1}{2} \hat{A}_C d_k^\dagger e_{kis} \hat{\Pi}_{is} \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k - \frac{1}{2} d_k^\dagger e_{kis} \hat{\Pi}_{is} \hat{A}_C \otimes a_k^\dagger a_k \hat{A}_Q \right] = \\ & = \sum_{s=1}^n \sum_{i=q,p} \left(d_k^\dagger \hat{A}_C e_{kis} \hat{\Pi}_{is} - \frac{1}{2} \hat{A}_C d_k^\dagger e_{kis} \hat{\Pi}_{is} - \frac{1}{2} d_k^\dagger e_{kis} \hat{\Pi}_{is} \hat{A}_C \right) \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k = \\ & = \sum_{s=1}^n \sum_{i=q,p} \frac{1}{2} d_k^\dagger e_{kis} [\hat{A}_C, \hat{\Pi}_{is}] \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k \end{aligned}$$

y $d_k^\dagger e_{kis} [\hat{A}_C, \hat{\Pi}_{is}] \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k \in \pi_H(\mathcal{A}_H) \forall i, s$, ya que el commutador de un elemento del álgebra de operadores clásicos con una coordenada o momento conjugado es un elemento del álgebra clásica ($[\pi_C(\Pi_{q^i}), \pi_C(f)] = \pi_C(-i \frac{\partial f}{\partial q^i})$ en unidades naturales).

- Por otro lado, de forma análoga, se tiene

$$\begin{aligned} & \sum_{s=1}^n \sum_{i=q,p} \left[\hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C d_k \otimes a_k^\dagger \hat{A}_Q a_k - \frac{1}{2} \hat{A}_C \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger d_k \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k - \frac{1}{2} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger d_k \hat{A}_C \otimes a_k^\dagger a_k \hat{A}_Q \right] = \\ & = \sum_{s=1}^n \sum_{i=q,p} \left(\hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C d_k - \frac{1}{2} \hat{A}_C \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger d_k - \frac{1}{2} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger d_k \hat{A}_C \right) \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k = \\ & = \sum_{s=1}^n \sum_{i=q,p} \frac{1}{2} [\hat{\Pi}_{is}^\dagger, \hat{A}_C] e_{kis}^\dagger d_k \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k \in \pi_H(\mathcal{A}_H) \end{aligned}$$

Si se tiene en cuenta que los operadores e_{kis} , d_k y $\hat{\Pi}_{is}$ son autoadjuntos, se observa que los dos términos previamente calculados se anularán entre sí.

- Finalmente

$$\begin{aligned} & \sum_{s,r=1}^n \sum_{i,j=q,p} \left[\hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} \otimes a_k^\dagger \hat{A}_Q a_k - \frac{1}{2} \hat{A}_C \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k - \right. \\ & - \frac{1}{2} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} \hat{A}_C \otimes a_k^\dagger a_k \hat{A}_Q \Big] = \sum_{s,r=1}^n \sum_{i=q,p} \left(\hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} - \frac{1}{2} \hat{A}_C \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} \hat{A}_C \right) \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k \end{aligned}$$

Ahora bien, como $\hat{A}_C \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$, existe $f \in \mathcal{A}_C$ tal que $\hat{A}_C = \pi_C(f)$. Teniendo en cuenta las siguientes igualdades,

$$[\hat{A}_C, \hat{\Pi}_{qs}^\dagger] = \pi_C \left(i \frac{\partial f}{\partial q^s} \right) = \hat{A}_C \hat{\Pi}_{qs}^\dagger - \hat{\Pi}_{qs}^\dagger \hat{A}_C \implies \hat{A}_C \hat{\Pi}_{qs}^\dagger = \pi_C \left(i \frac{\partial f}{\partial q^s} \right) + \hat{\Pi}_{qs}^\dagger \hat{A}_C$$

$$[\hat{\Pi}_{qs}, \hat{A}_C] = -\pi_C \left(i \frac{\partial f}{\partial q^s} \right) = \hat{\Pi}_{qs} \hat{A}_C - \hat{A}_C \hat{\Pi}_{qs} \implies \hat{\Pi}_{qs} \hat{A}_C = -\pi_C \left(i \frac{\partial f}{\partial q^s} \right) + \hat{A}_C \hat{\Pi}_{qs}$$

y sus análogas para momentos p_s , el término a analizar equivale a

$$\begin{aligned} & \sum_{s,r=1}^n \sum_{i=q,p} \left(\hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} - \frac{1}{2} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} - \frac{1}{2} \pi_C(i\partial_{is}f) e_{kis}^\dagger e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} - \right. \\ & - \frac{1}{2} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} - \frac{1}{2} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger \hat{A}_C e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} + \frac{1}{2} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjr} \pi_C(i\partial_{jr}f) \Big) \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k = \\ & = \sum_{s,r=1}^n \sum_{i=q,p} \left(\frac{1}{2} \hat{\Pi}_{is}^\dagger e_{kis}^\dagger e_{kjr} \pi_C(i\partial_{jr}f) - \frac{1}{2} \pi_C(i\partial_{is}f) e_{kis}^\dagger e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} \right) \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k \end{aligned}$$

donde se ha denotado $\frac{\partial f}{\partial q^s} \equiv \partial_{qs}f$ y $\frac{\partial f}{\partial p_s} \equiv \partial_{ps}f$. Realizando un cambio de índices sobre el primer sumando y teniendo en cuenta que $\hat{\Pi}_{is}$ y e_{kis} son autoadjuntos $\forall k, i, s$, lo anterior equivale a

$$\begin{aligned} & \sum_{s,r=1}^n \sum_{i=q,p} \left(\frac{1}{2} \hat{\Pi}_{jr} e_{kjr} e_{kis} \pi_C(i\partial_{is}f) - \frac{1}{2} \pi_C(i\partial_{is}f) e_{kis} e_{kjr} \hat{\Pi}_{jr} \right) \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{s,r=1}^n \sum_{i=q,p} [\hat{\Pi}_{jr}, e_{kjr} e_{kis} \pi_C(i\partial_{is}f)] \otimes \hat{A}_Q a_k^\dagger a_k \end{aligned}$$

y de nuevo cada sumando está en $\pi_h(\mathcal{A}_H)$, ya que la parte clásica es el conmutador de un elemento del álgebra de operadores y un momento conjugado, lo cual pertenece al álgebra de operadores.

Con todo esto se ha probado que todos los términos pertenecen al álgebra, exigiendo tan solo que a_k sea centro del álgebra de operadores cuánticos para aquellos k tales que exista algún e_{kis} no nulo.

APÉNDICE E

Aproximación finita del espacio de Hilbert clásico

La elección de la base del espacio de Hilbert clásico como $\{\varphi_n \otimes \varphi_m\}_{n,m \in \{0, \dots, N\}}$ necesariamente implica que la dinámica obtenida permanece dentro del subespacio que forma la base durante un tiempo finito, por encima del cuál la dinámica obtenida a través de las simulaciones difiere de la real. Por tanto, es preciso establecer el tiempo máximo de simulación posible según el valor de N escogido. Este tiempo dependerá de las características de la dinámica concretas, por lo que se establecerá para cada uno de los ejemplos que se tratan.

Esto se hará representando la magnitud a medir para distintos valores de N , de forma que el momento a partir del cuál dos valores de N consecutivos difieran, será aquel a partir del cual la aproximación no es válida para el menor de ellos. Por ejemplo, en la siguiente figura se muestra la evolución Lindbladiana del valor medio del operador $\hat{P}^2 \otimes \mathbb{I}_Q$ para diferentes valores de número de elementos de la base clásica considerados. La simulación se ha realizado para el sistema formado por el oscilador acoplado a dos QuBits.

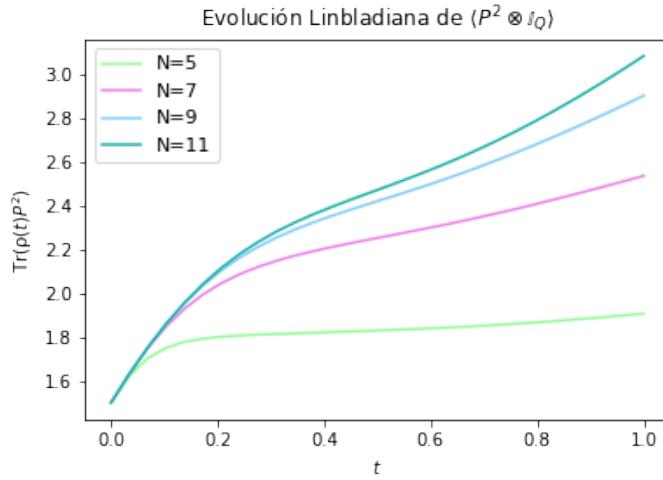


Figura E.1: Evolución Lindbladiana de $\langle \hat{P}^2 \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ con operador de Kraus $V_1 = (\hat{Q} + \hat{\Pi}_q - \hat{\Pi}_p) \otimes S^2$, $\gamma_1 = 1$ y estado cuántico inicial en triplete

Se observa que las cuatro trayectorias son iguales a tiempos muy bajos. Sin embargo, conforme aumenta el tiempo, las trayectorias correspondientes a N más bajo se van desviando una a una. Son precisamente estos tiempos en los que se produce la separación a partir de los cuales la aproximación no es válida para la trayectoria desviada. Es posible que existan otras magnitudes para las cuales el tiempo límite sea menor. Es por ello que este proceso se realizará para todas las magnitudes a medir, de forma que se pueda asegurar que los resultados presentados son válidos.

E.1. Ejemplo 1

Inicialmente se pretende analizar la trayectoria clásica para una evolución unitaria. Dado que es complicado realizar una representación análoga a la mostrada en la *Figura E.1*, se comparará la evolución de los valores medios de operadores clásicos, asumiendo que cuando la aproximación es válida para el análisis de estos también lo es para el estudio de la evolución de los estados. Así, a continuación se muestra la representación la evolución del valor medio de los operadores $\hat{Q}^2 \otimes \mathbb{I}_Q$ y $\hat{Q}\hat{P} \otimes \mathbb{I}_Q$ para diferentes valores de N posibles. El hecho de tomar estos operadores se debe a que el promedio de \hat{Q} y \hat{P} es nulo en todo momento, de forma que se han considerado los más sencillos no lineales.

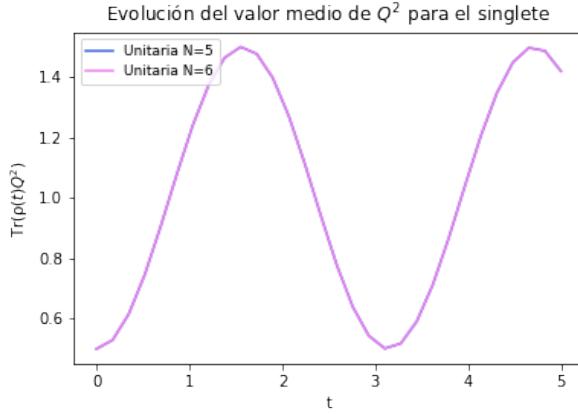


Figura E.2: Evolución unitaria de $\langle \hat{Q}^2 \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ para estado cuántico inicial en singlete.

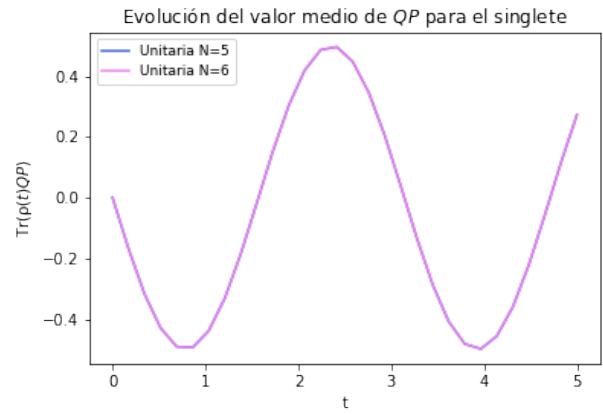


Figura E.3: Evolución unitaria de $\langle \hat{Q}\hat{P} \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ para estado cuántico inicial en singlete

No existe diferencia visible entre los dos casos mostrados, por lo que se tomará como válida la aproximación de $N = 5$ elementos de la base clásica y tiempo de simulación $t = 5$.

E.2. Ejemplo 2

En este ejemplo se pretende medir la evolución del valor medio de operadores para el sistema del oscilador acoplado a dos QuTrits. El tiempo para el que la aproximación deja de ser válida para un N fijo es muy superior en el caso de estado singlete con respecto al triplete y, a su vez, éste último está por encima del relativo al quintuplete. Además, el tiempo correspondiente a dinámica unitaria es también muy superior al respectivo a dinámica Lindbladiana. Esto quiere decir que hay que fijar el momento en el que la dinámica Lindbladiana con estado inicial en quintuplete sale fuera del subespacio generado por N elementos de la base clásica. A continuación se muestra representada la evolución del valor medio de \hat{Q}^2 y de $\hat{Q}\hat{P}$ con esta dinámica.

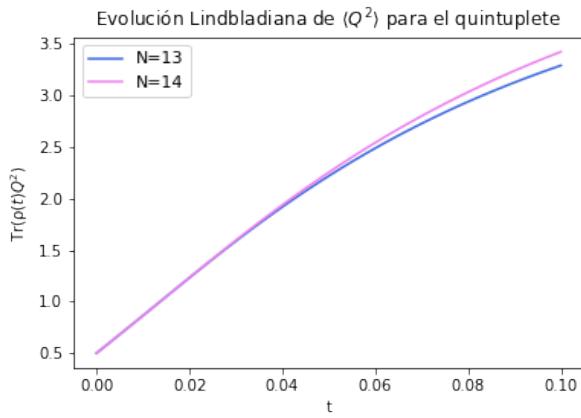


Figura E.4: Evolución Lindbladiana de $\langle \hat{Q}^2 \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ para estado cuántico inicial en quintuplete.

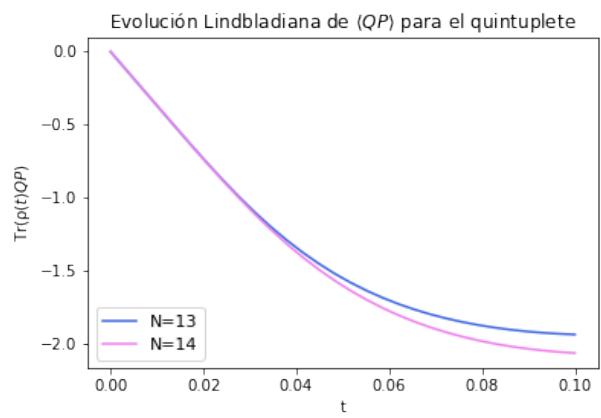


Figura E.5: Evolución Lindbladiana de $\langle \hat{Q}\hat{P} \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ para estado cuántico inicial en quintuplete

A partir de las gráficas se puede estimar que, para $N = 13$, realizar las simulaciones hasta tiempos de 0,05 puede ser una aproximación aceptable. Como es evidente, los resultados no serán completamente precisos, pero se puede estimar cuantitativamente la imprecisión cometida al realizar la aproximación como la diferencia entre las dos curvas representadas en cada gráfica en el tiempo máximo de simulación. En este caso, para el operador $\langle \hat{Q}^2 \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$, esta imprecisión es de 0.0638; para el operador $\langle \hat{Q}\hat{P} \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$, de 0,0021; y para $\langle \hat{P}^2 \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$, de 0,1142. Todo lo anterior está medido en unidades naturales de posiciones y momentos. Esto se puede tener en cuenta a la hora de realizar un análisis cuantitativo de los resultados. Sin embargo, en este caso, solo interesa realizar un análisis cualitativo; por lo que se aceptará la aproximación siempre teniendo en cuenta que para tiempos próximos al límite los resultados son más imprecisos.

Si se representa la entropía de von Neumann del sistema clásico y la pureza del mismo se obtienen las *Figuras E.6 y E.7*.

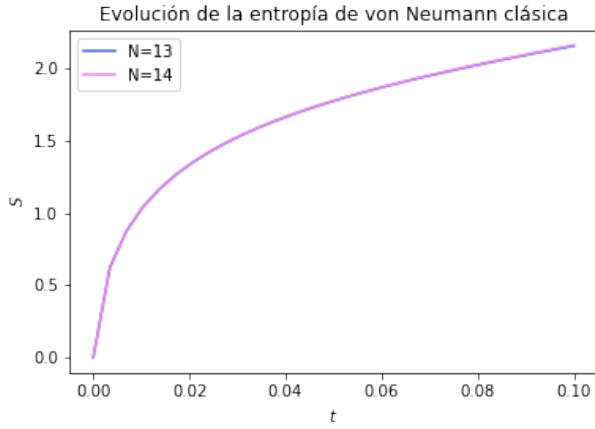


Figura E.6: Evolución Lindbladiana de la entropía clásica para estado cuántico inicial en quintuplete.

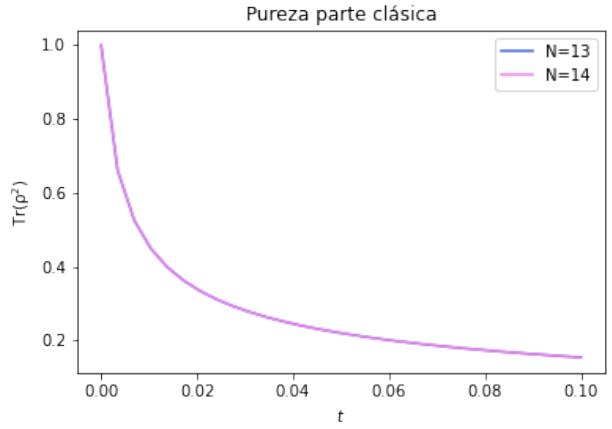


Figura E.7: Evolución Lindbladiana de la pureza clásica para estado cuántico inicial en quintuplete

Se puede observar que, en este caso, no existe la divergencia anterior, por lo que la aproximación afecta en menor medida a la entropía y pureza del subsistema clásico.

Con todo esto, se considerarán $N = 13$ elementos en la base clásica y se medirá durante un tiempo $t = 0,05$. Evidentemente tomando más elementos de la base, se conseguiría un tiempo de simulación superior, pero el ordenador con el que se realizan las simulaciones no tiene capacidad mayor y, además, este tiempo es suficiente para extraer conclusiones sobre los resultados.

E.3. Ejemplo 3

El caso de este ejemplo es idéntico al anterior salvo la sustitución del operador de Kraus $V_1 = (\hat{Q} + \hat{\Pi}_q - \hat{\Pi}_p) \otimes S^2$ por el operador $V_2 = (\hat{Q} + \hat{P}) \otimes S^2$. La evolución Lindbladiana de $\langle \hat{Q}^2 \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ y $\langle \hat{Q}\hat{P} \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ se muestra en las *Figuras E.8* y *E.9*, mientras que la entropía y pureza clásicas vienen representadas en las *Figuras E.10* y *E.11*.

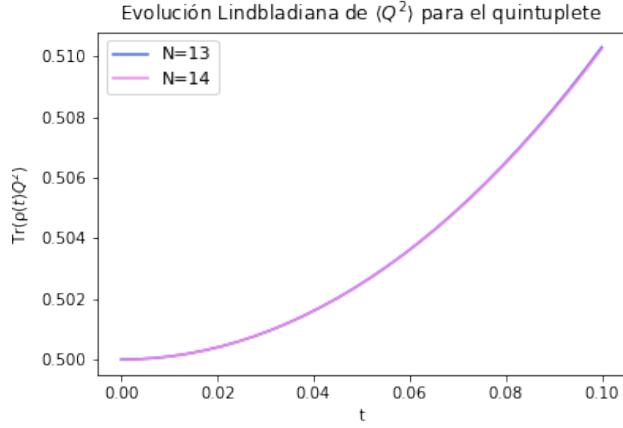


Figura E.8: *Evolución Lindbladiana de $\langle \hat{Q}^2 \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ para estado cuántico inicial en quintuplete.*

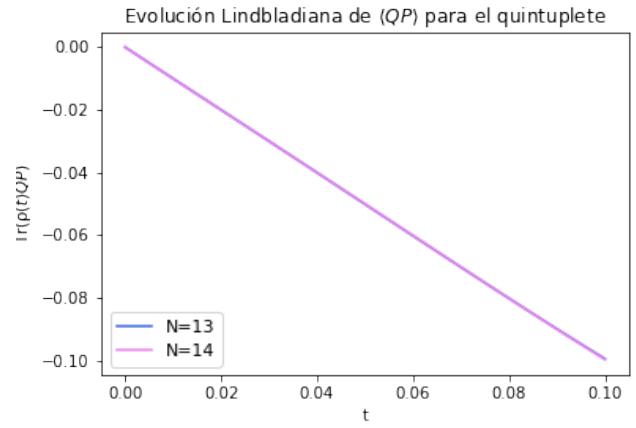


Figura E.9: *Evolución Lindbladiana de $\langle \hat{Q}\hat{P} \otimes \mathbb{I}_Q \rangle$ para estado cuántico inicial en quintuplete*

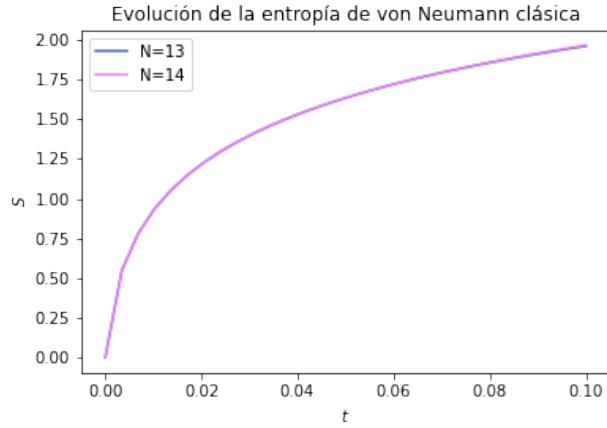


Figura E.10: *Evolución Lindbladiana de la entropía clásica para estado cuántico inicial en quintuplete.*

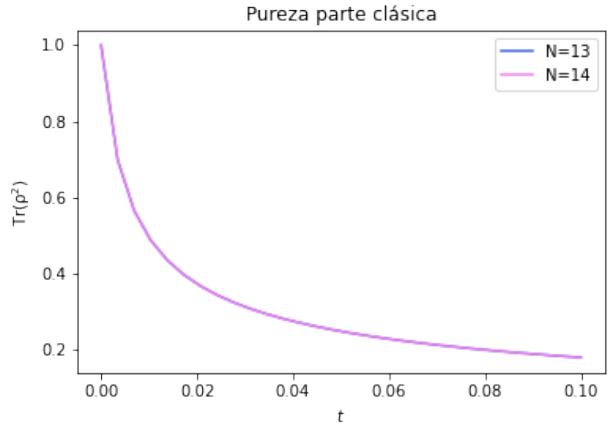


Figura E.11: *Evolución Lindbladiana de la pureza clásica para estado cuántico inicial en quintuplete*

Se tiene que, para el mismo intervalo temporal y mismo tamaño de la base clásica, la divergencia es menor. Esto quiere decir que, en este caso, el tiempo de simulación podría ser superior a 0,05 o el número de elementos de la base considerados menor a 13. Sin embargo, dado que el objetivo de este ejemplo es comparar con el anterior, se tomarán los mismos parámetros, para los cuales se observa que la aproximación es válida.

E.4. Ejemplo 4

En este caso, el objeto de estudio es la evolución del estado de uno de los QuBits, de forma que se comprobará si esta evolución varía para dos valores de N consecutivos.

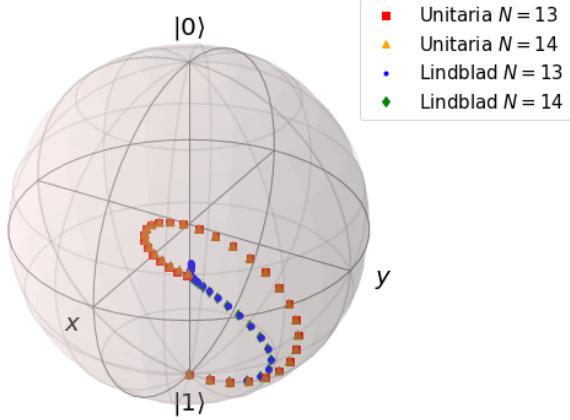


Figura E.12: Evolución unitaria y Lindbladiana (con V_1) del estado cuántico de un QuBit.

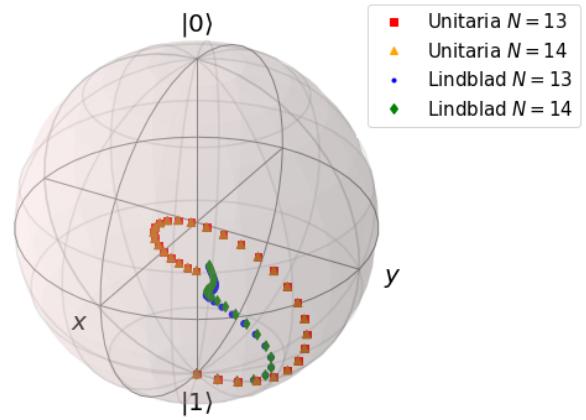


Figura E.13: Evolución unitaria y Lindbladiana (con V_3) del estado cuántico de un QuBit.

Se puede observar que las trayectorias son prácticamente indistinguibles en el primer caso y difieren en mayor medida en la evolución Lindbladiana del segundo. Sin embargo, dado que el interés de estas trayectorias es la diferencia cualitativa entre varias y que la diferencia no es visualmente remarcable, se aceptará esta aproximación como válida y se medirá durante un tiempo $t = 2$ con $N = 13$. Esto se hará siempre teniendo en cuenta que, para el operador de Kraus $\hat{Q}\hat{\Pi}_q$, no es completamente exacta la trayectoria mostrada.

APÉNDICE F

Definiciones y resultados matemáticos auxiliares

F.1. Geometría diferencial

Definición F.1.1. *Sea M una variedad diferenciable y $p \in M$. Se denomina **vector tangente** en el punto p a cualquier aplicación lineal $X_p : C^\infty(p) \rightarrow C^\infty(p)$ que satisface la regla de Leibniz:*

$$[X_p(f \cdot g)](p) = X_p(f)(p)g(p) + f(p)X_p(g)(p) \quad (\text{F.1})$$

*El conjunto de todos los vectores tangentes a un punto p se denomina **espacio tangente** y se denota $T_p M$.*

Definición F.1.2. *Sea M una variedad diferenciable, $p \in M$ un punto y $T_p M$ el espacio tangente al punto p . Se denomina **espacio cotangente** en el punto p al espacio vectorial dual al espacio tangente, $(T_p M)^* \equiv T_p^* M$. Los elementos de este espacio se denominan **covectores**.*

Definición F.1.3. *Sean M, N variedades diferenciables y $F : M \rightarrow N$ una aplicación diferenciable entre ellas. Se denomina **diferencial** de la aplicación F en el punto p , denotada como F_{*p} , a la aplicación lineal $F_{*p} : T_p M \rightarrow T_{F(p)} N$ definida como*

$$[F_{*p}(X_p)](f) = X_p(f \circ F) \quad \forall f \in C^\infty(N) \quad (\text{F.2})$$

Definición F.1.4. *Sea M una variedad diferenciable y $TM = \bigcup_{p \in M} T_p M$ la unión de los espacios tangentes a todos los puntos de la variedad. Un **campo vectorial** es una aplicación*

$$\begin{aligned} X : M &\longrightarrow TM \\ p &\longmapsto X(p) = X_p \in T_p M \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

Definición F.1.5. *Sea M una variedad diferenciable. Se denomina **p -forma diferenciable** a cualquier tensor $(0, p)$ completamente antisimétrico. El conjunto de las p -formas de M se denota como $\Lambda^p(M)$.*

Definición F.1.6. *Sea M una variedad diferenciable. Se define el operador **diferencial exterior** como la aplicación*

$$\begin{aligned} d : C^\infty(M) &\longrightarrow \Lambda^1(M) \\ df(X) &\longmapsto X(f) \end{aligned} \tag{F.4}$$

Definición F.1.7. *Sea (M, ω) una variedad simpléctica y $f : M \rightarrow M$ un difeomorfismo. Entonces f es un **simplectomorfismo** si $f^*\omega = \omega$.*

F.2. C^* -álgebras y representaciones

Definición F.2.1. *Un **espacio de Banach** es un espacio vectorial normado y completo en la métrica definida por su norma.*

Definición F.2.2. *Un **álgebra de Banach** \mathcal{A} es un álgebra asociativa sobre \mathbb{R} o \mathbb{C} tal que es al mismo tiempo un espacio de Banach y la norma asociada satisface $\|xy\| \leq \|x\| \cdot \|y\|$, $\forall x, y \in \mathcal{A}$.*

Definición F.2.3. *Una $*$ -álgebra \mathcal{A} es un álgebra en la cual está definida una aplicación $* : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$, denominada *involución*, tal que*

- $(x^*)^* = x$, $\forall x \in \mathcal{A}$
- $(x + y)^* = x^* + y^*$, $\forall x, y \in \mathcal{A}$
- $(xy)^* = x^*y^*$, $\forall x, y \in \mathcal{A}$
- $(\lambda x)^* = \bar{\lambda}x^*$, $\forall x \in \mathcal{A}, \lambda \in \mathbb{C}$

Una $*$ -álgebra se denomina también **álgebra involutiva**.

Definición F.2.4. *Una C^* -álgebra \mathcal{A} es un álgebra de Banach involutiva que satisface*

$$\|x^*x\| = \|x\|^2 \tag{F.5}$$

Definición F.2.5. *Dada una C^* -álgebra \mathcal{A} y su espacio dual \mathcal{A}^* , se puede definir una norma $\|\cdot\|$ en \mathcal{A}^* a partir de la norma en \mathcal{A} como*

$$\|\omega\|_{\mathcal{A}^*} = \sup\{|\omega(a)|, \|a\|_{\mathcal{A}} = 1\}, \quad \forall \omega \in \mathcal{A}^* \tag{F.6}$$

Definición F.2.6. *Sea \mathcal{A} una C^* -álgebra y \mathcal{A}^* su espacio dual, se dice que $\omega \in \mathcal{A}^*$ está definido positivo si satisface $\omega(a^*a) \geq 0$, $\forall a \in \mathcal{A}$.*

Definición F.2.7. *Un **estado** sobre una C^* -álgebra \mathcal{A} es un funcional lineal positivo sobre \mathcal{A} tal que su norma es igual a la unidad.*

Definición F.2.8. Un **-homomorfismo* entre dos **-álgebras* \mathcal{A}_1 y \mathcal{A}_2 es una aplicación $\pi : \mathcal{A}_1 \rightarrow \mathcal{A}_2$ que preserva todas las relaciones algebraicas, esto es,

- *Es lineal:*

$$\pi(\lambda A_1 + \mu A_2) = \lambda\pi(A_1) + \mu\pi(A_2), \quad \forall A_1 \in \mathcal{A}_1, A_2 \in \mathcal{A}_1, \lambda, \mu \in \mathbb{C}$$

- *Preserva la operación involutiva:*

$$\pi(A_1^*) = (\pi(A_1))^* \quad \forall A_1 \in \mathcal{A}_1$$

- *Preserva la operación multiplicativa:*

$$\pi(A_1 A_2) = \pi(A_1)\pi(A_2) \quad \forall A_1 \in \mathcal{A}_1, A_2 \in \mathcal{A}_2 \quad \wedge \quad \pi(\mathbb{1}_{\mathcal{A}_1}) = \mathbb{1}_{\mathcal{A}_2}$$

Definición F.2.9. Una *representación* π de una C^* -álgebra \mathcal{A} en un espacio de Hilbert \mathcal{H} es un **-homomorfismo* de \mathcal{A} a la C^* -álgebra $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ de operadores lineales acotados sobre \mathcal{H} . Se dice que la representación es *irreducible* si $\{0\}$ y \mathcal{H} son los únicos subespacios cerrados invariantes bajo $\pi(\mathcal{A})$.

Teorema F.2.10. (Gelfand-Naimark) Una C^* -álgebra \mathcal{A} es isomorfa a un álgebra de operadores acotados sobre un espacio de Hilbert.

Teorema F.2.11. (GNS): Dada una C^* -álgebra \mathcal{A} y un estado ω sobre ella, entonces existe un espacio de Hilbert \mathcal{H}_ω y una representación $\pi_\omega : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_\omega)$ tales que

1. \mathcal{H}_ω contiene un vector cíclico ψ_ω
2. $\omega(A) = (\psi_\omega, \pi_\omega(A)\psi_\omega)$, $\forall A \in \mathcal{A}$
3. Cualquier otra representación π en un espacio de Hilbert \mathcal{H}_π con un vector cíclico ψ tal que

$$\omega(A) = (\psi, \pi(A)\psi), \quad \forall A \in \mathcal{A} \tag{F.7}$$

es equivalente a π_ω a través de una isometría unitaria, esto es, existe una isometría $U : \mathcal{H}_\pi \rightarrow \mathcal{H}_\omega$ de forma que

$$U\pi(A)U^{-1} = \pi_\omega(A), \quad \forall A \in \mathcal{A} \quad \wedge \quad U\psi = \psi_\omega \tag{F.8}$$

F.3. Teoría de la medida

Definición F.3.1. Sea (Ω, \mathcal{F}) un espacio medible y μ una medida de probabilidad definida sobre \mathcal{F} . Si $\mu(\Omega) < \infty$ se dice que la medida es finita. Si el conjunto Ω se puede descomponer como la unión numerable de subconjuntos de medida finita, se dice que la medida es σ -finita.

Definición F.3.2. Sea $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$ un espacio de medida y ν una medida definida en este espacio. Se dice que ν es **absolutamente continua** respecto de μ si

$$\nu(M) = 0 \quad \forall M \in \mathcal{F} \text{ tal que } \mu(M) = 0 \quad (\text{F.9})$$

Teorema F.3.3. (Radon-Nicodym). Sea $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$ un espacio de medida σ -finito, ν una medida definida en el espacio medible (Ω, \mathcal{F}) y absolutamente continua respecto de μ . Existe una función integrable $f \in \mathcal{L}^1(\mu, \mathbb{C})$ que cumple

$$\nu(A) = \int_A f d\mu, \quad \forall A \text{ medible} \quad (\text{F.10})$$

Se dice que f es la **derivada de Radon-Nicodym** de ν respecto de μ .

Definición F.3.4. Una medida μ es **regular exterior** sobre un conjunto medible Borel E si

$$\mu(E) = \inf\{\mu(U) | U \supset E, U \text{ abierto}\} \quad (\text{F.11})$$

y es **regular interior** sobre un conjunto medible Borel E si

$$\mu(E) = \sup\{\mu(K) | K \subset E, K \text{ compacto}\} \quad (\text{F.12})$$

Se dice que μ es una medida de Borel **regular** si es regular exterior e interior sobre todos los conjuntos de Borel.

Definición F.3.5. Una **medida de Radon** es una medida de Borel que es finita en conjuntos compactos, regular exterior sobre todos los conjuntos de Borel y regular interior sobre todos los abiertos.

Teorema F.3.6. (Riesz-Markov). Sea Ω un espacio localmente Hausdorff y ω un funcional lineal positivo sobre $C_C(\Omega)$ (siendo $C_C(\Omega)$ el conjunto de las funciones continuas de soporte compacto). Entonces existe una única medida de Borel regular μ sobre Ω tal que

$$\omega(f) = \int_{\Omega} f d\mu, \quad \forall f \in C_C(\Omega) \quad (\text{F.13})$$

F.4. Otros resultados

Definición F.4.1. Se define el **centro** de un álgebra \mathcal{A} como el conjunto

$$Z(\mathcal{A}) = \{x \in \mathcal{A} | ax = xa \forall a \in \mathcal{A}\} \quad (\text{F.14})$$

Teorema F.4.2. (de Gleason). Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert de al menos dimensión 3 y sea μ una medida definida en los subespacios cerrados de \mathcal{H} . Entonces, existe un operador autoadjunto semidefinido positivo $\hat{\rho}$ de clase traza que satisface que, para cualquier subespacio cerrado A de \mathcal{H} ,

$$\mu(A) = \text{Tr}(\hat{\rho}P_A) \quad (\text{F.15})$$

donde P_A es la proyección ortogonal de \mathcal{H} sobre A .

Teorema F.4.3. (Stone). Sea $\{U(t)|t \in \mathbb{R}\}$ una familia de transformaciones unitarias cumpliendo las propiedades (I) y (II):

$$(I) \quad U(t_1 + t_2) = U(t_1)U(t_2), \quad \forall t_1, t_2 \in \mathbb{R} \quad (\text{propiedad de grupo})$$

$$(II) \quad U(t_1) \xrightarrow{t_1 \rightarrow t_2} U(t_2) \quad (\text{propiedad de continuidad})$$

entonces existe una única transformación autoadjunta H (denominada generador infinitesimal del grupo) tal que

$$U(t) \equiv e^{itH} \quad (\text{F.16})$$