

Universidad de Zaragoza
Grado en Matemáticas

CURSO 2024/2025

TRABAJO DE FIN DE GRADO

El espacio de estados en el formalismo de Koopman híbrido clásico-cuántico

Autora

María del Carmen García Muñoz

Tutor

Jesús Clemente Gallardo



Universidad
Zaragoza

Índice general

1. Introducción	1
2. Marco teórico	4
2.1. Formalismo de la mecánica cuántica	4
2.2. Formalismo geométrico de la mecánica clásica	5
2.3. El formalismo de Koopman en la mecánica clásica	7
2.4. C^* -álgebras de observables clásicos y cuánticos	9
2.5. Dinámica del sistema híbrido	12
3. Espacio de estados	15
3.1. Espacio de matrices densidad	15
3.2. Funciones de Wigner	20
4. Conclusiones	24
A. Mecánica clásica en variedades simplécticas	26
B. C^*-álgebras y representación GNS	29
B.1. C^* -álgebra cuántica	29
B.2. C^* -álgebra clásica	30
B.3. C^* -álgebra híbrida	31
C. Las funciones de Wigner	33
D. Demostraciones auxiliares	35
E. Definiciones y resultados auxiliares	37

CAPÍTULO 1

Introducción

Los principios fundamentales de la física clásica son la base de toda la física conocida hasta el siglo XIX y permiten la descripción de sistemas físicos a bajas energías, generalmente aquellos de masas elevadas y bajas velocidades. Su base se encuentra en las conocidas Leyes de Newton para la mecánica clásica, complementadas por las Leyes de Maxwell para la descripción de la electrodinámica clásica. Se caracteriza por ser una teoría determinista, esto es, el estado físico de un sistema clásico determina unívocamente su estado en todo tiempo posterior. La modelización matemática de un sistema físico requiere la descripción de los estados, observables, y la dinámica del mismo, siendo los observables estructuras matemáticas asociadas a magnitudes físicas reales, de manera que, actuando sobre los estados, permiten realizar medidas sobre el sistema. En mecánica clásica, los estados se representan usualmente como puntos de un espacio de fases, esto es, un espacio euclídeo abstracto de dimensión el número de variables de estado del sistema, de forma que la dinámica de los estados se corresponde con una trayectoria en dicho espacio de fases. El tratamiento matemático más general de la mecánica clásica está escrito en términos de geometría diferencial: el espacio de fases es una variedad de Poisson, los observables son funciones reales sobre dicho espacio de fases y la dinámica viene descrita por las ecuaciones de Hamilton. Asimismo, en mecánica estadística clásica, los estados se corresponden con medidas sobre el espacio de fases y su evolución viene dada por la denominada ecuación de Liouville.

La física cuántica surge a principios del siglo XX por la necesidad de describir fenómenos físicos microscópicos no explicables mediante la física clásica, tales como la naturaleza dual onda-partícula de la luz y de los electrones o la existencia de magnitudes físicas que toman únicamente valores discretos (es decir, están cuantizadas). Sus principios fundamentales difieren por completo de los relativos a la física clásica, con un enfoque probabilístico que se opone al determinismo clásico. Los principios clásicos se obtienen tomando un límite de los cuánticos. Al modelizar matemáticamente los sistemas cuánticos, los estados son usualmente representados por funciones de onda pertenecientes a un espacio de Hilbert, mientras que los observables son operadores autoadjuntos sobre dicho espacio, siendo éstos elementos de una C^* -álgebra. Asimismo, los estados también se pueden representar como elementos del espacio dual a la C^* -álgebra de observables, correspondiéndose con el conjunto de operadores lineales semidefinidos positivos y de traza unidad, es decir, matrices densidad. Para la modelización de la dinámica surgen dos perspectivas equivalentes. En la imagen de Schrödinger, los estados evolucionan temporalmente, mientras que los observables son constantes, de manera que la dinámica unitaria la rige la ecuación de Schrödinger sobre funciones de onda o la ecuación de von Neumann sobre matrices densidad, según la representación. En cambio, en la imagen de Heisenberg,

los estados se mantienen constantes en el tiempo mientras que los observables evolucionan siguiendo, cuando la dinámica es unitaria, la ecuación de Heisenberg.

Un sistema físico híbrido clásico-cuántico es aquel consistente en dos subsistemas, uno clásico y uno cuántico, acoplados. Se trata de un límite parcial clásico de un sistema puramente cuántico en el que existen dos escalas de masa y velocidad diferenciadas, siendo así posible aproximar los grados de libertad más lentos y pesados por variables clásicas. La utilidad de este límite radica en disminuir la complejidad de sistemas cuánticos con un número de grados de libertad elevado, cuyas simulaciones numéricas requieren un coste computacional elevado, en muchos casos no alcanzable con ordenadores actuales. Sin embargo, para poder modelizar los sistemas híbridos, es preciso poder describir los subsistemas clásico y cuántico a través de un mismo formalismo matemático.

Si bien existen diversas vías para solucionar esta incompatibilidad entre formalismos, este trabajo se va a basar en una cuya idea principal consiste en tratar el subsistema clásico a través de la formulación característica de la mecánica cuántica. Esta construcción tiene su base en el formalismo de Koopman, el cual es introducido por Bernard Koopman en 1931 y constituye una herramienta que permite definir los estados de un sistema estadístico clásico como elementos de un espacio de Hilbert y trasladar la mecánica regida por la ecuación de Liouville a una ecuación análoga a la de Schrödinger sobre el espacio de Hilbert de estados clásicos, $\mathcal{H}_C$. Lo anterior deriva en que los observables clásicos, que están contenidos en una C^* -álgebra conmutativa que se denotará $\mathcal{A}_C$, se puedan representar como operadores lineales sobre el espacio de Hilbert. Esta representación, cuya existencia se justificará posteriormente, es una aplicación $\pi_C : \mathcal{A}_C \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ cuya imagen, $\pi_C(\mathcal{A}_C)$, es un subconjunto del espacio de operadores lineales acotados sobre el espacio de Hilbert clásico y contiene a los observables clásicos.

De forma similar a la formulación usual de la mecánica cuántica, es posible asociar a cada estado clásico un elemento del espacio dual a $\pi_C(\mathcal{A}_C)$, más específicamente una matriz densidad sobre el espacio de Hilbert, esto es, un elemento de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$. Sin embargo, mientras que en el caso cuántico la correspondencia entre estados y matrices densidad es una biyección y el conjunto de matrices densidad sobre el espacio de Hilbert cuántico representa uno a uno los estados cuánticos; en el caso clásico esto no es así. A lo largo de este trabajo se justificará precisamente el hecho de que los estados físicos clásicos no se correspondan uno a uno con el espacio de matrices densidad, sino que matrices densidad diferentes representan el mismo estado, y se tratará de dar una mejor caracterización del espacio de estados físicos clásicos.

Las construcciones descritas anteriormente permiten la descripción de los sistemas híbridos a través de un espacio de Hilbert de estados híbridos $\mathcal{H}_H = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$, con $\mathcal{H}_Q$ el espacio de Hilbert cuántico habitual, definiendo así una C^* -álgebra de observables híbridos como el producto tensorial de las C^* -álgebras clásica y cuántica $\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$ y una representación sobre el espacio de operadores lineales acotados sobre el espacio de Hilbert híbrido como producto cartesiano de las representaciones clásica y cuántica $\pi_H = \pi_C \times \pi_Q : \mathcal{A}_H \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$. Asimismo, los estados híbridos se pueden representar como elementos del espacio dual a $\pi_H(\mathcal{A}_H) = \pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$, que es un subconjunto del espacio de matrices densidad sobre $\mathcal{H}_H$.

Sobre estos estados y observables se pueden estudiar diferentes dinámicas. En [1], se caracterizan las condiciones que debe cumplir el generador de una dinámica híbrida unitaria; y en [2] se realiza el mismo estudio con un caso particular de dinámica lineal que generaliza el caso unitario, la dinámica lindbladiana. Estas dinámicas describen, en imagen de Schrödinger, la evolución de una matriz densidad cualquiera de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$.

El principal objetivo de este trabajo es la caracterización del espacio de estados híbridos representados como matrices densidad híbridas, pasando previamente por el estudio análogo de los estados puramente clásicos; y la verificación de que las dinámicas unitaria y, más generalmente, lindbladiana, definidas sobre $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$, están correctamente definidas sobre el nuevo espacio de estados.

Asimismo, se abordará una perspectiva alternativa para caracterizar el espacio de estados, basada en la denominada función de Wigner. Esta función permite trasladar la formulación de un sistema cuántico en términos de operadores y matrices densidad a una formulación similar a la de la mecánica estadística clásica, donde los estados se corresponden con medidas de probabilidad.

En el *Capítulo 2* se dará una descripción formal de la construcción de Koopman, su generalización a sistemas híbridos y se darán las ideas básicas de la caracterización de las dinámicas unitaria y lindbladiana. En el *Capítulo 3* se planteará el problema que supone considerar los estados clásicos e híbridos como el espacio completo de matrices densidad y se tratará de caracterizar mejor el espacio de estados a través de las dos formulaciones: en términos de matrices densidad y en términos de funciones de Wigner.

CAPÍTULO 2

Marco teórico

La construcción de las representaciones de estados y observables híbridos requiere una comprensión previa de los formalismos matemáticos fundamentales que describen los estados y observables clásicos y cuánticos, así como de la aplicación del formalismo de Koopman a un sistema clásico para construir una representación alternativa. En este capítulo se pretende dar unas nociones básicas de estos formalismos a través de la definición de sus elementos básicos y la presentación de los principales resultados que permiten la descripción completa de los sistemas.

2.1. Formalismo de la mecánica cuántica

En la formulación habitual de la mecánica cuántica, los estados de un sistema son elementos de un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$. Para su tratamiento, se introduce la notación de Dirac.

Notación 2.1.1. *A un elemento φ del espacio $\mathcal{H}$ se le denomina ket y se denota por $|\varphi\rangle$. El teorema de representación de Riesz asegura que cada elemento del espacio dual $\varphi^* \in \mathcal{H}^*$, al que se denomina bra, tiene asociado un único ket $|\varphi\rangle$ tal que la evaluación de φ^* sobre un estado cualquiera $\psi \in \mathcal{H}$ es $\varphi^*\psi = |\varphi\rangle \cdot |\psi\rangle$, con $\cdot$ el producto escalar en $\mathcal{H}$. Así, el bra φ^* se denota $\langle\varphi|$, de manera que $\varphi^*\psi = |\varphi\rangle \cdot |\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle, \forall \psi \in \mathcal{H}$.*

Los principios fundamentales de la mecánica cuántica con esta formulación se resumen en cinco postulados.

- **Postulado 1:** El estado del sistema se representa por un ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, denominado función de onda. En una representación alternativa, cada estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ se representa por el correspondiente proyector sobre el subespacio vectorial de $\mathcal{H}$ de dimensión 1 de base $|\psi\rangle$, $\rho = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}$.

$$\begin{aligned} \rho : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathcal{H} \\ |\varphi\rangle &\longmapsto \frac{\langle\psi|\varphi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} |\psi\rangle \end{aligned} \tag{2.1}$$

A estos proyectores se les denomina matrices densidad y el espacio de matrices densidad se denota $\mathcal{D}(\mathcal{H})$. Usualmente se toman funciones de onda normalizadas, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, de forma que la matriz densidad correspondiente a $|\psi\rangle$ es $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. El conjunto de matrices densidad

contiene, además de a los proyectores asociados a un elemento del espacio de Hilbert, que es lo que se denominan estados puros, a todos los proyectores $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ sobre subespacios de dimensión uno, esto es, a todos los operadores lineales semidefinidos positivos y de traza unidad: $\rho = \sum_{i \in I} \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, con $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}, \lambda_i \in [0, 1], \forall i \in I, I \subset \mathbb{N}$ y tal que $\sum_{i \in I} \lambda_i = 1$. Todos los proyectores no asociados a estados puros se denominan estados mezcla.

- **Postulado 2:** El espacio de observables $\mathcal{O}$ es el conjunto de operadores lineales autoadjuntos sobre el espacio de Hilbert.
- **Postulado 3:** El resultado de la medida de un observable sobre el sistema es siempre uno de los autovalores del operador correspondiente a dicho observable.
- **Postulado 4:** Si el estado del sistema es una función de onda $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ normalizada ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$), la probabilidad de que el resultado de la medida de un observable $A \in \mathcal{O}$ sea su autovalor $a_n \in \mathbb{R}$, de vector propio (normalizado) $|\varphi_n\rangle \in \mathcal{H}$ se corresponde con $P(a_n) = |\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2$. Al realizar una medida y obtener el resultado a_n , se produce colapso de la función de onda y el estado pasa a ser $|\varphi_n\rangle$. El valor esperado del observable A para el estado $|\psi\rangle$ o $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ es

$$\langle A \rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \text{Tr}(A\rho) \quad (2.2)$$

- **Postulado 5:** En imagen de Shrödinger, la evolución temporal de los estados viene dada por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\psi(t)\rangle \quad \forall t \in I \subset \mathbb{R}, \forall |\psi(t)\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.3)$$

con $H(t)$ el operador Hamiltoniano en el tiempo t , que es el observable asociado a la energía del sistema. Alternativamente, la evolución de las matrices densidad viene dada por la ecuación de von Neumann

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)] \quad \forall t \in I \subset \mathbb{R}, \forall \rho(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{H}) \quad (2.4)$$

En imagen de Heisenberg, la evolución de los operadores sigue la ecuación de Heisenberg

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)] \quad \forall t \in I \subset \mathbb{R}, \forall A(t) \in \mathcal{O} \quad (2.5)$$

2.2. Formalismo geométrico de la mecánica clásica

La modelización matemática de un sistema físico clásico a través de variedades simplécticas consiste en una generalización de las ecuaciones de Hamilton, que a su vez derivan de las leyes de Newton. A continuación se van a resumir los principales conceptos de esta formulación siguiendo [3] (ver *Apéndice A* para un desarrollo más detallado). Se parte de un sistema cuyo estado viene descrito por un punto $\{q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n\} = \{\vec{q}, \vec{p}\} \in \mathbb{R}^{2n}$, con n la dimensión del sistema físico, y

donde $\vec{q}$ son las coordenadas generalizadas del sistema y $\vec{p}$ los momentos generalizados. La dinámica viene descrita por las ecuaciones de Hamilton (2.6).

$$\begin{cases} \frac{dq^i}{dt} = \frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p})}{\partial p_i} & \forall i \in \{1, \dots, n\} \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p})}{\partial q^i} & \forall i \in \{1, \dots, n\} \end{cases} \quad (2.6)$$

donde $H(\vec{q}, \vec{p})$ es el Hamiltoniano del sistema. Así, el espacio de fases es la variedad diferenciable $\mathbb{R}^{2n}$, mientras que los observables físicos son las funciones de $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{2n})$.

Una primera generalización de este formalismo consiste en considerar una variedad diferenciable cualquiera $\mathcal{M}$, de dimensión n formando el conjunto de posiciones del sistema (de coordenadas $\{q^i\}_{i \in \{1, \dots, n\}}$). En este caso los momentos $\{p_i\}_{i \in \{1, \dots, n\}}$ son coordenadas sobre las fibras del fibrado cotangente de la variedad, $T^*\mathcal{M}$. Las propiedades geométricas de las variedades diferenciables permiten asegurar que esta formulación es localmente equivalente a la dada en $\mathbb{R}^{2n}$ (ya que $T^*\mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{2n}$). Esta descripción se puede extender, asimismo, de un fibrado cotangente a variedades diferenciables más generales, las denominadas variedades simplécticas (A.0.1).

El teorema de Darboux A.0.4 permite establecer así un conjunto de coordenadas generalizadas $\{q^i, p_i\}_{i \in \{1, \dots, n\}}$ de forma que una variedad simpléctica general $\mathcal{M}$ es localmente equivalente a $\mathbb{R}^{2n}$. Esto, a su vez, permite modelizar los estados de un sistema físico como puntos del espacio de fases $\mathcal{M}$, siendo los observables las funciones de $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M}; \mathbb{R})$. Es posible comprobar que un fibrado cotangente es una variedad simpléctica, de forma simpléctica $\omega = -d\theta$, donde $\theta = \sum_{i=1}^n p_i dq^i$ es la llamada 1-forma de Liouville. Veamos a continuación que es posible obtener una expresión equivalente a las ecuaciones de Hamilton sobre $\mathbb{R}^{2n}$ para el caso de una variedad simpléctica general $\mathcal{M}$, que describa trayectorias sobre el espacio de fases que representen la evolución. Para ello se considera la aplicación dada por

$$\begin{aligned} \hat{\omega} : T(\mathcal{M}) &\longrightarrow T^*\mathcal{M} \\ X &\longmapsto \hat{\omega}(X) = \omega(X, \cdot) \end{aligned} \quad (2.7)$$

la cual, restringida a $\mathcal{X}(\mathcal{M})$, $\hat{\omega} : \mathcal{X}(\mathcal{M}) \longrightarrow \Lambda^1(\mathcal{M})$ es un isomorfismo.

Proposición 2.2.1. *Sea $H \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$, decimos que una curva $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{M}$ 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 $X_H = \hat{\omega}^{-1}(dH)$, esto es, tal que $\hat{\omega}(X_H) = dH$.*

Esto ha permitido definir una mecánica hamiltoniana. Se puede comprobar además que el campo vectorial Hamiltoniano en coordenadas de Darboux es de la forma $X_H = \sum_{i=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial H}{\partial q^i} \frac{\partial}{\partial p_i}$ y sus curvas integrales $\{\vec{q}(t), \vec{p}(t)\}$ se corresponden con las soluciones de las ecuaciones de Hamilton, recuperando la formulación habitual de la mecánica clásica en $\mathbb{R}^{2n}$. Asimismo, la definición del denominado paréntesis de Poisson permite escribir estas curvas hamiltonianas en el espacio de fases como curvas en el espacio $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$ (ver *Apéndice A*).

2.3. El formalismo de Koopman en la mecánica clásica

El formalismo de Koopman [4] es el mecanismo que va a permitir trasladar la mecánica clásica de una variedad simpléctica a un espacio de Hilbert, estableciendo así un formalismo común para la descripción de los sistemas clásico y cuántico. La descripción del formalismo se dará siguiendo [5].

Se parte, así, de una variedad simpléctica $(\mathcal{M}_C, \omega)$ de dimensión $2n$ y con coordenadas de Darboux $\{\vec{q}, \vec{p}\}$ (de forma que $\omega = \sum_{i=1}^n dq^i \wedge dp_i$).

Definición 2.3.1. *Se define la **medida de Liouville** como*

$$d\mu = \overbrace{\omega \wedge \dots \wedge \omega}^{n \text{ veces}} \quad (2.8)$$

La *Proposición A.0.3* garantiza la correcta definición de la medida. Se tiene que el conjunto de observables es $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M}_C; \mathbb{R}) \subset \mathcal{C}(\mathcal{M}_C; \mathbb{C})$. Además, el subconjunto de funciones continuas de soporte compacto, $\mathcal{C}_C(\mathcal{M}_C; \mathbb{C})$, es denso en $L^1(\mathcal{M}_C, \mu; \mathbb{C})$ y es precisamente el conjunto de funciones integrables (con respecto a la medida de Liouville) el que contiene a todos los observables que tienen valor esperado bien definido y, por tanto, sentido físico. Es por ello que es posible restringirse únicamente a observables de $\mathcal{C}_C(\mathcal{M}_C; \mathbb{C})$ para describir correctamente un sistema físico y es este el espacio que se considerará en este trabajo que contiene los observables físicos del sistema clásico.

De esta forma, el espacio de estados se corresponde con el conjunto de funcionales lineales positivos de norma unidad (con la norma de operador inducida por la norma supremo en $\mathcal{C}_C(\mathcal{M}; \mathbb{C})$) sobre $\mathcal{C}_C(\mathcal{M}; \mathbb{C})$. Dado que las variedades simplécticas en las que tiene sentido definir mecánica clásica son localmente Hausdorff, el teorema de la representación de Riesz-Markov E.0.19 garantiza que cada funcional lineal positivo sobre $\mathcal{C}_C(\mathcal{M}_C, \mathbb{C})$, $\omega \in \mathcal{C}_C(\mathcal{M}_C, \mathbb{C})^*$ tiene asociada una única medida de Radon $\tilde{\mu}$ verificando $\forall f \in \mathcal{A}_C$, $\omega(f) = \int_{\mathcal{M}_C} f d\tilde{\mu}$. Por lo tanto, el espacio de estados se corresponde con el conjunto de medidas de Radon sobre $\mathcal{M}_C$. Asimismo, el subconjunto de las medidas de Radon absolutamente continuas con respecto a la medida de Liouville es denso en el espacio total de medidas de Radon, por lo que es posible considerar como espacio de estados el conjunto de las medidas de Radon absolutamente continuas respecto a μ . A su vez, cada elemento de este último espacio tiene asociada a través de la derivada de Radon-Nikodym una función densidad de probabilidad, única salvo conjuntos de medida nula. Por lo tanto, el espacio de estados se corresponde con el conjunto de funciones densidad de probabilidad de $L^1(\mathcal{M}_C, \mu; \mathbb{C})$, $\mathcal{P}(\mathcal{M}_C, \mu)$. Éstas evolucionan según la ecuación de Liouville: $\dot{\rho} = X_H(\rho)$, $\forall \rho \in \mathcal{P}(\mathcal{M}_C, \mu)$. Es precisamente a partir de los estados representados como funciones densidad de probabilidad que Koopman construye el espacio de Hilbert que constituirá el nuevo espacio de estados del sistema clásico.

Definición 2.3.2. *Se define el **espacio de Hilbert de estados clásicos del sistema** como el espacio de las funciones complejas definidas sobre $\mathcal{M}_C$ de cuadrado integrable con la medida de Liouville*

$$\mathcal{H}_C = \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_C, d\mu) = \left\{ f : \mathcal{M}_C \rightarrow \mathbb{C} \left| \int_{\mathcal{M}_C} |f|^2 d\mu < +\infty \right. \right\} \quad (2.9)$$

dotado del producto escalar

$$\langle f|g \rangle = \int_{\mathcal{M}_C} \bar{f} g d\mu \quad (2.10)$$

Se puede comprobar que es, en efecto, un espacio de Hilbert y a cada $\psi \in \mathcal{H}$ se le puede asociar una densidad de probabilidad $\rho = \bar{\psi}\psi \in \mathcal{P}$, esto es, un estado. Recíprocamente, para cada $\rho \in \mathcal{P}$ existe un $\psi \in \mathcal{H}$ tal que $\rho = \bar{\psi}\psi$. Nótese que a este ρ se le pueden asociar infinitas funciones de onda diferentes, ya que $\forall \theta \in \mathbb{R}$ $\psi' = e^{i\theta}\psi \in \mathcal{H}$ satisface también $\bar{\psi}'\psi' = \rho$. La elección de la medida de Liouville permite a Koopman demostrar en [4] la siguiente proposición.

Proposición 2.3.3. *Sea $\varphi : \mathcal{M}_C \longrightarrow \mathcal{M}_C$ una transformación que mantiene invariante el paréntesis de Poisson (transformación canónica), entonces existe una isometría unitaria biyectiva*

$$\begin{aligned} U : \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_C, d\mu) &\longrightarrow \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_C, d\mu) \\ f &\longmapsto U(f) = \varphi^* f = f \circ \varphi \end{aligned} \quad (2.11)$$

Consideramos el flujo hamiltoniano del sistema $F_t : \mathcal{M}_C \longrightarrow \mathcal{M}_C$, $(\vec{q}(0), \vec{p}(0)) \longmapsto (\vec{q}(t), \vec{p}(t))$.

Proposición 2.3.4. *Si el flujo Hamiltoniano F_t es completo, esto es, toda curva integral Hamiltoniana está definida para todo $t \in \mathbb{R}$, entonces el conjunto*

$$\{U_t : f \in \mathcal{H}_C \longmapsto f \circ F_t \in \mathcal{H}_C | t \in \mathbb{R}\} \quad (2.12)$$

es un grupo de transformaciones unitarias continuo sobre un único parámetro.

El teorema de Stone(E.0.24) permite asegurar la existencia de un generador infinitesimal de la evolución, un operador autoadjunto L , denominado operador de Koopman, tal que $U_t = e^{-iLt} \forall t \in \mathbb{R}$. Este operador depende del campo vectorial Hamiltoniano como $L = iX_H$, lo cual se traduce localmente en coordenadas de Darboux a

$$L = -i \left(\frac{\partial H}{\partial q^k} \frac{\partial}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial q^k} \right) \quad (2.13)$$

Proposición 2.3.5. *Sea $\psi_\rho \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_C, d\mu)$ un estado tal que $\bar{\psi}_\rho \psi_\rho = \rho \in \mathcal{P}$, con ρ evolucionando según la ecuación de Liouville, entonces ψ_ρ evoluciona según*

$$i\dot{\psi}_\rho = L\psi_\rho \quad (2.14)$$

El formalismo desarrollado por Koopman ha permitido construir un espacio de Hilbert que contiene a los estados de un sistema clásico y describir la dinámica de los mismos a través de una ecuación análoga a la de Schrödinger, pero en la que el generador de la evolución no es el Hamiltoniano clásico del sistema sino un operador dependiente del mismo, el operador de Koopman. A continuación se mostrará que, en esta nueva formulación, los observables se corresponderán con operadores lineales autoadjuntos sobre el espacio de Hilbert. En el modelo clásico usual, los observables se modelizaban como funciones sobre una variedad diferenciable. Estas funciones conmutan

trivialmente entre ellas, y esto tiene una gran implicación sobre el conjunto de operadores que se identifican con observables en el nuevo formalismo: forman un álgebra conmutativa. El conjunto de operadores cuánticos carece de esta propiedad y ésto introducirá posteriormente grandes diferencias entre la formulación de la dinámica de ambos sistemas.

La idea de esta nueva formulación es, ahora que se tienen los estados clásicos y cuánticos representados como elementos de dos espacios de Hilbert distintos, seguir la idea utilizada usualmente en mecánica cuántica y tomar como estados del sistema híbrido, que mezcla grados de libertad clásicos y cuánticos, los elementos de un espacio de Hilbert producto tensorial, $\mathcal{H}_H = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$. Sin embargo, la formulación de una dinámica sobre los elementos de este espacio no es trivial, dada la diferente estructura matemática de los elementos de los dos espacios de Hilbert, lo cual lleva a tratar el sistema desde un formalismo alternativo basado en la generalización de la usual formulación de la mecánica cuántica que representa los observables como elementos de una C^* -álgebra y los estados como elementos del espacio dual.

2.4. C^* -álgebras de observables clásicos y cuánticos

La modelización habitual de la mecánica cuántica sobre el espacio de Hilbert $\mathcal{H}_Q$ representa los observables físicos como el conjunto de operadores lineales acotados autoadjuntos sobre el espacio de Hilbert: $\mathcal{O}_Q = \{A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q) | A^\dagger = A\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$. Denotando $\mathcal{A}_Q = \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$ (conjunto de operadores lineales acotados sobre $\mathcal{H}_Q$) y dotando a este espacio de las operaciones adecuadas, se justifica en el *Apéndice B* que $\mathcal{A}_Q$ es una C^* -álgebra. Además, el teorema de Gleason (E.0.23), asegura que los estados cuánticos, se corresponden uno a uno con los elementos del espacio de matrices densidad sobre el espacio de Hilbert cuántico, que es un subespacio de $\mathcal{A}_Q^*$.

$$\mathcal{D}(\mathcal{H}_Q) = \{\rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q) | \rho = \rho^\dagger, \text{Tr}(\rho) = 1, \rho \geq 0\} \quad (2.15)$$

El objetivo principal de esta sección es generalizar este formalismo, de manera que, a partir del espacio de Hilbert de estados clásicos construido a través de Koopman, se logre una representación de los observables clásicos dentro del espacio de operadores lineales acotados sobre el espacio de Hilbert clásico $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ y de los estados en el espacio de matrices densidad sobre dicho espacio de Hilbert $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$. De esta manera, la forma equivalente de los observables clásicos y cuánticos en las C^* -álgebras, así como de los estados representados como matrices densidad, facilitará la formulación de dinámicas del sistema híbrido.

La herramienta que permitirá reproducir el formalismo sobre el espacio de Hilbert clásico es la construcción GNS [6], caracterizada por el *Teorema B.0.1*. El proceso descrito a continuación se sigue de [7]. Se pretende encontrar un estado sobre la C^* -álgebra $\mathcal{A}_C$ (E.0.10) $\omega \in \mathcal{A}_C^*$ tal que la aplicación del teorema asegure la existencia de una única representación (E.0.12), salvo isometría, de $\mathcal{A}_C$ sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$; es decir, que el espacio de Hilbert cuya existencia asegura el teorema se corresponda con el espacio de Hilbert clásico.

En el caso del subsistema cuántico, dado que se define la C^* -álgebra que contiene a los observables como $\mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$, es evidente que existe una biyección $\pi_Q : \mathcal{A}_Q \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$ que es trivialmente la identidad. En dimensión finita, la identidad es precisamente la representación obtenida al aplicar GNS a la C^* -álgebra $\mathcal{A}_Q$ y un estado $\omega : \mathcal{A}_Q \rightarrow \mathbb{C}$ definido como $\omega(A) = \langle \varphi, A\varphi \rangle$, $\forall A \in \mathcal{A}_Q$ con $\varphi \in \mathcal{H}_Q$ tal que $\{A\varphi | A \in \mathcal{A}_Q\}$ sea denso en $\mathcal{H}_Q$, como por ejemplo puede ser un múltiplo normalizado de la identidad (ver *Apéndice B*). Esto no ocurre generalmente en dimensión infinita, puesto que el espacio de Hilbert no tiene por qué contener un vector cíclico. Dado que el espacio de Hilbert $\mathcal{H}_\omega$ del teorema contiene un vector cíclico, este espacio no puede ser el original si se partía de un espacio de Hilbert en dimensión infinita que no contenga vectores cíclicos. Así, esta formulación a través de la representación GNS es únicamente válida en espacios de dimensión finita o aquellos de dimensión infinita que contienen algún vector cíclico.

Para el subsistema clásico, se ha justificado previamente que se puede considerar que todos los observables están contenidos en $\mathcal{A}_C = \mathcal{C}_C(\mathcal{M}_C, \mathbb{C})$, espacio que, dotado de las operaciones adecuadas, es una C^* -álgebra (ver *Apéndice B*). También se demuestra en el *Apéndice B* que el espacio de Hilbert del teorema de la representación GNS es el espacio de Hilbert clásico definido a través del formalismo de Koopman ($\mathcal{H}_C$) si se aplica el teorema sobre la C^* -álgebra $\mathcal{A}_C$ y un estado $\omega \in \mathcal{A}_C^*$ definido como $\omega(f) = \int_{\mathcal{M}_C} f d\mu$, $\forall f \in \mathcal{A}_C$, con μ la medida de Liouville. Así, existe una representación $\pi_C : \mathcal{A}_C \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$, de forma que $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ es un subálgebra de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ y representa al conjunto de observables clásicos. Es importante remarcar que la conmutatividad de los elementos de $\mathcal{A}_C$ (son funciones escalares) deriva en que el álgebra $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ sea asimismo conmutativa. Esto se debe a que π_C es la aplicación que lleva $f \in \mathcal{A}_C$ al operador sobre $\mathcal{H}_C$ correspondiente a la multiplicación punto a punto por f (ver *Apéndice B*).

Por otro lado, conocida la C^* -álgebra $\mathcal{A}_C$ que representa a los observables físicos, el conjunto de estados debe ser un subespacio de $\mathcal{A}_C^*$, que denotamos $\mathcal{E}_C$, ya que éstos son los funcionales lineales continuos positivos y normalizados. Se ha justificado previamente que se puede considerar que, dada una medida de referencia (en particular tomamos la medida simpléctica), el espacio de las funciones densidad de probabilidad (cocientado por el espacio de las funciones nulas en casi todo punto respecto a dicha medida) contiene a los estados clásicos. En [1] se demuestra la siguiente proposición

Proposición 2.4.1. *Sea $\omega \in \mathcal{E}_C$ un estado sobre $\mathcal{A}_C$ y $F_C \in L^1(\mathcal{M}_C, \mu)$ la función densidad de probabilidad asociada a ω con respecto a la medida simpléctica μ . Sean $|\xi\rangle$ y $|\xi'\rangle$ dos bases generalizadas de $\mathcal{M}_C$. Entonces la matriz densidad sobre el espacio de Hilbert clásico $\hat{\rho}_C \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$ definida por*

$$\hat{\rho}_C = \int_{\mathcal{M}_C} d\mu(\xi) \int_{\mathcal{M}_C} d\mu(\xi') \sqrt{F_C(\xi)F_C(\xi')} |\xi\rangle\langle\xi'| \quad (2.16)$$

satisface la relación

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_C \pi_C(a)) = \omega(a) \quad \forall a \in \mathcal{A}_C \quad (2.17)$$

Nótese que, en la expresión 2.17, el primer término de la igualdad es el valor esperado del observable que representa $\pi_C(a)$ (esto es, el representado por a) para el estado que representa $\hat{\rho}_C$,

mientras que el segundo término es el valor esperado del observable a para el estado ω . Este resultado implica que a cada estado ω se le puede asociar un elemento de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$, $\hat{\rho}_C$, que mantenga el valor esperado de todos los observables clásicos y, por tanto, ω y $\hat{\rho}_C$ representan el mismo estado físico. Esto se debe a que dos estados, aunque tengan estructura matemática diferente, son iguales siempre que todas las magnitudes físicas medibles sobre ellos sean iguales.

Con esto, se ha logrado una identificación entre el espacio de estados clásicos y un conjunto de matrices densidad. Mientras que en el subsistema cuántico los estados están representados uno a uno por el conjunto completo $\mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$, para el caso clásico se ha demostrado únicamente que cada estado tiene asociado al menos un elemento de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$. Sin embargo, en principio, no se ha comprobado que toda matriz densidad sobre $\mathcal{H}_C$ esté asociada a un estado o que no existan más posibilidades de asignaciones que satisfagan la ecuación 2.17. A continuación, se va a ver que esta cuestión deriva en una análoga al tratar de estudiar los estados del sistema híbrido como matrices densidad sobre el espacio de Hilbert híbrido.

Dado que el sistema híbrido es un límite parcial clásico de un sistema puramente cuántico formado por dos subsistemas, en el cual la C^* -álgebra de observables es producto tensorial de las C^* -álgebras correspondientes a sus subsistemas, es natural construir un álgebra de observables híbridos como producto tensorial de las C^* -álgebras clásica y cuántica: $\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$, que, dotada de las operaciones adecuadas, es una C^* -álgebra (ver *Apéndice B*). Se define asimismo la aplicación $\pi_H = \pi_C \times \pi_Q$ de forma que $\pi_H(\mathcal{A}_H) = \pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q) \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q) = \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$. Además, el espacio de Hilbert $\mathcal{H}_H$ se corresponde, en efecto, con el del teorema de la representación GNS aplicado con la elección de un estado producto tensorial de los utilizados para las representaciones clásica y cuántica. Así, se tiene una representación de los observables híbridos en el espacio de operadores lineales acotados sobre el espacio de Hilbert híbrido definido como producto tensorial del clásico y el cuántico. Nótese que el conjunto de operadores de $\pi_H(\mathcal{A}_H)$ que representan observables físicos no es el espacio total, sino el subconjunto del mismo formado por operadores autoadjuntos, que denotaremos $\mathcal{O}_H$.

Por otro lado, el espacio de estados híbridos se corresponde con el subconjunto $\mathcal{E}_H \subset \mathcal{A}_H^*$ de los funcionales lineales sobre $\mathcal{A}_H$ definidos positivos y de norma unidad. Se prueba en [1], que cada estado híbrido $\omega \in \mathcal{E}_H$ tiene asociada una matriz densidad $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ satisfaciendo

$$\text{Tr}(\rho \pi_H(A)) = \omega(A) \quad \forall A \in \mathcal{A}_H \quad (2.18)$$

Por lo tanto, se tiene, de forma análoga al caso puramente clásico, que a cada estado híbrido se le puede asociar al menos una matriz densidad, pero no se ha comprobado si cada elemento de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ tiene asociado un elemento de $\mathcal{E}_H$ o si a cada estado no se le pueden asociar varias matrices densidad diferentes satisfaciendo 2.18. En el *Capítulo 3* se demostrará que, de hecho, existen más posibles asignaciones y, por tanto, matrices densidad diferentes representan el mismo estado físico. Así, no va a bastar con considerar que el espacio de estados se corresponde con el de matrices densidad y, por tanto, al definir dinámicas en este último espacio, va a ser necesario verificar que están bien definidas sobre los estados. Para ello, es precisa una mejor caracterización del espacio de estados

representados como matrices densidad, cuestión que se abordará en el *Capítulo 3*. En la siguiente sección se darán las características básicas para que una dinámica esté bien definida sobre el sistema híbrido sin tener en cuenta la anterior puntualización sobre el espacio de estados, tal y como se hace en [1] y [2], de manera que se busca una dinámica que verifique que, en imagen de Heisenberg, define curvas en $\mathcal{O}_H$ y, en imagen de Schrödinger, define curvas en $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$.

2.5. Dinámica del sistema híbrido

En mecánica cuántica, una vez se tienen representados los estados y observables como matrices densidad y operadores de una C^* -álgebra, la dinámica de un sistema cerrado, que es unitaria, está regida por la ecuación de Heisenberg sobre los operadores de $\mathcal{O}_Q \subset \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$ (2.19) en imagen de Heisenberg y por la ecuación de von Neumann sobre las matrices densidad (2.20) en representación de Schrödinger.

$$\frac{d}{dt}A(t) = i[H, A(t)], \quad \forall A \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q) \quad (2.19)$$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H, \rho(t)], \quad \forall \rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q) \quad (2.20)$$

donde $H \in \mathcal{O}_Q$ es el Hamiltoniano del sistema. Esta dinámica está siempre bien definida ya que $i[H, A] \in \mathcal{O}_Q \forall A \in \mathcal{O}_Q$ y $-i[H, \rho] \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q) \forall \rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$. Más generalmente, si se considera un sistema cuántico arbitrario con dinámica lineal, existe un superoperador, es decir, un operador lineal que actúa sobre el espacio de operadores lineales $\mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$, $\mathcal{L}_Q : \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q) \rightarrow T\mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$, con $T\mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$ el fibrado tangente (E.0.3) y tal que la dinámica viene dada por

$$\frac{dA}{dt}(t) = \mathcal{L}_Q A(t) \forall A \in \pi_Q(\mathcal{A}_Q) \quad \wedge \quad \frac{d\rho}{dt}(t) = \mathcal{L}_Q^\dagger \rho(t) \forall \rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q) \quad (2.21)$$

De esta forma $\mathcal{L}$ debe satisfacer necesariamente $e^{\mathcal{L}t}(\mathcal{O}_Q) \subset \mathcal{O}_Q$ y $e^{\mathcal{L}_Q^\dagger t}(\mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)) \subset \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$, $\forall t \in \mathbb{R}$. La primera de las condiciones se satisface siempre que $e^{\mathcal{L}} \in \mathcal{O}_Q$, mientras que la segunda es más complicado de verificar para una dinámica general y, por tanto, nos restringiremos a casos concretos de dinámica que la verifican.

Para el sistema híbrido, la escritura de los estados y observables en forma de matrices densidad y operadores permite la búsqueda de ecuaciones lineales análogas que reproduzcan la mecánica clásica no lineal definida sobre el espacio de fases $\mathcal{M}_C$ sobre el subsistema clásico y la dinámica anteriormente descrita sobre el subsistema cuántico. Así, se busca qué condiciones debe cumplir un superoperador $\mathcal{L} : \pi_H(\mathcal{A}_H) \rightarrow T\pi_H(\mathcal{A}_H)$ para que la dinámica de los observables y estados venga dada por

$$\frac{d\hat{A}}{dt}(t) = \mathcal{L}\hat{A}(t) \forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H) \quad \wedge \quad \frac{d\hat{\rho}_H}{dt}(t) = \mathcal{L}^\dagger \hat{\rho}_H(t) \forall \hat{\rho}_H \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) \quad (2.22)$$

y esté bien definida, es decir, se verifique

$$1. \quad e^{\mathcal{L}t}(\mathcal{O}_H) \subset \mathcal{O}_H$$

$$2. e^{\mathcal{L}^\dagger t}(\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)) \subset \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$$

con $\mathcal{O}_H \subset \pi_H(\mathcal{A}_H)$ el conjunto de operadores lineales que representan observables híbridos. Nótese que, en realidad, no es seguro que estas condiciones garanticen la correcta definición de la dinámica sobre los estados al no conocer la correspondencia exacta con las matrices densidad; pero nos restringimos por el momento a comprobar que la dinámica esté bien definida sobre el conjunto completo de matrices densidad.

La segunda condición no es sencilla de verificar para una dinámica lineal general, pero se puede comprobar que se satisface para un caso especial, la dinámica lindbladiana [8][9], que es aquella en la que vamos a centrar el estudio sobre el sistema híbrido. Las ecuaciones que rigen este tipo de dinámica se obtienen de la modelización de sistemas físicos abiertos, esto es, sistemas que interactúan con el entorno, que verifican una serie de condiciones particulares. La evolución lindbladiana de operadores y matrices densidad tiene como forma general:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \mathcal{L}(\hat{A}(t)) = i[\hat{H}, \hat{A}(t)] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left(V_k^\dagger \hat{A}(t) V_k - \frac{1}{2} \hat{A}(t) V_k^\dagger V_k - \frac{1}{2} V_k^\dagger V_k \hat{A}(t) \right), \quad (2.23)$$

$$\forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$$

$$\frac{d}{dt}(\hat{\rho}_H(t)) = -i[\hat{H}, \hat{\rho}_H(t)] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left(V_k \hat{\rho}_H(t) V_k^\dagger - \frac{1}{2} V_k^\dagger V_k \hat{\rho}_H(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_H(t) V_k^\dagger V_k \right) \quad (2.24)$$

$\forall \hat{\rho}_H \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$, con $\hat{H} \in \mathcal{O}_H$ el Hamiltoniano del sistema, $\{V_k\}_{k=1}^{N^2-1} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ los denominados operadores de Kraus, $\{\gamma_k\}_{k=1}^{N^2-1}$ parámetros reales no negativos y N la dimensión de $\mathcal{H}_H$. El superoperador $\mathcal{L}$ característico de esta dinámica se denomina lindbladiano. Nótese que en el caso de operadores de Kraus nulos se tiene una dinámica unitaria, por lo que ésta última es un caso particular de dinámica lindbladiana.

En el caso puramente cuántico, la primera condición se satisface siempre para una transformación entre operadores lineales acotados y autoadjuntos. Sin embargo, esto no es así si se considera el caso puramente clásico, ya que $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ es un subconjunto propio del espacio de operadores lineales acotados sobre $\mathcal{H}_C$. En particular, dado que los elementos de $\mathcal{A}_C$ son funciones de coordenadas y momentos generalizados $\{q^i, p_i\}_{i=1,\dots,n}$ y dado que π_C lleva dichas funciones a operadores multiplicativos, éstos últimos se podrán escribir siempre como funciones de los operadores correspondientes a las coordenadas y momentos generalizados, que denotaremos $\{\hat{Q}^i, \hat{P}_i\}_{i=1,\dots,n}$. El subespacio de $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ de observables clásicos, $\mathcal{O}_C$, será el formado por todas las funciones reales de $\{\hat{Q}^i, \hat{P}_i\}_{i=1,\dots,n}$. Por otro lado, las coordenadas y momentos conjugados $\{\Pi_{q^i}, \Pi_{p_i}\}$ no son observables clásicos, pero tienen asociados operadores autoadjuntos $\{\hat{\Pi}_{Q^i}, \hat{\Pi}_{P_i}\}$ que pertenecen a $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ pero no a $\pi_C(\mathcal{A}_C)$.

Si se considera una dinámica puramente unitaria sobre el subsistema clásico, se puede deducir de (2.19) que un Hamiltoniano $\hat{H}$ perteneciente al álgebra de observables derivaría en una dinámica nula, puesto que el Hamiltoniano conmutaría con todos los observables. Así, se tiene que el Hamil-

toniano que rige la dinámica unitaria clásica debe ser un elemento de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ que no pertenezca a $\pi_C(\mathcal{A}_C)$. En particular, si se toma un Hamiltoniano dependiente de $\{\hat{\Pi}_{Q^i}, \hat{\Pi}_{P_i}\}$, éste estará fuera del álgebra de observables y será autoadjunto, manteniendo así la dinámica dentro del espacio de operadores autoadjuntos. Más generalmente, cualquier dinámica lineal sobre el subsistema clásico debe tratarse de un automorfismo externo al álgebra de observables clásicos si se quiere una dinámica no constante interna al espacio de operadores autoadjuntos. Además, es preciso comprobar que esta dinámica se mantenga también dentro del subálgebra conmutativa $\pi_C(\mathcal{A}_C)$.

Lo anterior condiciona a su vez el generador de la evolución híbrida. En [1] se estudian las características que debe cumplir el Hamiltoniano de una dinámica unitaria para regir una evolución bien definida, que se resumen en:

$$\hat{H} = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I}_Q + \mathbb{I}_C \otimes \hat{H}_Q + \hat{H}_{CQ} = \hat{H}_C \otimes \mathbb{I}_Q + \mathbb{I}_C \otimes \hat{H}_Q + \sum_{j,k} c_{jk} h_c^j \otimes h_Q^k \quad (2.25)$$

con $c_{jk} \in \mathbb{R}$ y tales que

- $\hat{H}_C$ sea autoadjunto y lineal en $\{\hat{\Pi}_{Q^i}, \hat{\Pi}_{P_i}\}_i$.
- $\hat{H}_{CQ}$ no dependa de $\hat{\Pi}_{Q^i}$ y $\hat{\Pi}_{P_i}$. Esto implica que $\hat{H}_{CQ} \in \mathcal{O}_H$
- $\hat{H}_Q \in \mathcal{O}_Q$.

Además, para que la dinámica sobre el subsistema clásico sea la equivalente a la ecuación de Liouville sobre $\mathcal{M}_C$ con un Hamiltoniano $H_C(q, p) \in \mathcal{A}_C$ se debe tomar

$$\hat{H}_C = \sum_{k,j} \left[\pi_C \left(\frac{\partial H_C(q, p)}{\partial p_k} \right) \hat{\Pi}_{q^k} - \pi_C \left(\frac{\partial H_C(q, p)}{\partial q^j} \right) \hat{\Pi}_{p_j} \right] \quad (2.26)$$

Por otro lado, en [2], se prueba que una dinámica lindbladiana con operadores de Kraus de la forma (2.27) y Hamiltoniano verificando las condiciones anteriores está bien definida sobre el sistema híbrido.

$$V_k = \left[d_k(\hat{Q}^i, \hat{P}_i) + \sum_{s=1}^n \left(e_{kqs}(\hat{Q}^i, \hat{P}_i) \hat{\Pi}_{q^s} + e_{kps}(\hat{Q}^i, \hat{P}_i) \hat{\Pi}_{p_s} \right) \right] \otimes a_k \quad (2.27)$$

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

El estudio de estas dinámicas híbridas se ha realizado considerando que el conjunto de estados se corresponde con el espacio completo de matrices densidad. En el próximo capítulo se va a realizar un estudio de la estructura del conjunto de matrices densidad que representa a los estados y se tratará de analizar cómo esta nueva estructura afecta a las dinámicas anteriormente definidas.

Espacio de estados

3.1. Espacio de matrices densidad

En la *Sección 2.4* se ha visto como a cada estado del sistema híbrido se le puede asociar al menos un elemento de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ que represente al estado. A continuación, vamos a comprobar que existen distintas posibilidades de asignaciones cumpliendo la ecuación anterior. Para ello, comenzamos probando que toda matriz densidad representa a un único estado.

Proposición 3.1.1. *Sea $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$, existe siempre un único estado $\omega \in \mathcal{E}_H$ tal que*

$$\text{Tr}(\rho \pi_C(a)) = \omega(A) \forall A \in \mathcal{A}_H \quad (3.1)$$

Demostración. Se define la aplicación

$$\begin{aligned} \omega : \mathcal{A}_H &\longrightarrow \mathbb{R} \\ A &\longmapsto \text{Tr}(\rho \pi_H(A)) \end{aligned} \quad (3.2)$$

el cual es un funcional bien definido sobre $\mathcal{A}_H$ que cumple la condición del enunciado y es un estado ya que

- Es lineal ya que tanto $\text{Tr} : \mathcal{B}(\mathcal{H}_H) \rightarrow \mathbb{R}$ como $\pi_H : \mathcal{A}_H \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ son lineales.
- $\omega(A^*A) = \text{Tr}(\rho \pi_H(A^*A)) = \text{Tr}(\rho \pi_H(A)^* \pi_H(A)) \geq 0$ ya que $\pi_H(A)^* \pi_H(A)$ es un operador definido positivo.
- Se tiene $\forall \rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$, que se puede escribir de la forma $\rho = \sum_k \lambda_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$, con $|\psi_k\rangle \in \mathcal{H}_H$ y $\sum_k \lambda_k = 1$, que $\forall A \in \mathcal{A}_H$,

$$\text{Tr}(\rho \pi_H(A)) = \sum_k \lambda_k \langle \psi_k | \pi_H(A) | \psi_k \rangle \leq \|\pi_H(A)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)} \sum_k \lambda_k = \|\pi_H(A)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)}$$

y, por definición de norma en $\mathcal{A}_H$, se tiene $\|A\|_{\mathcal{A}_H} = \|\pi_H(A)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)}$, por lo que

$$\begin{aligned} \|\omega\|_{\mathcal{A}_H^*} &= \sup\{|\omega(A)|; A \in \mathcal{A}_H, \|A\|_{\mathcal{A}_H} = 1\} = \sup\{|\text{Tr}(\rho \pi_H(A))|; A \in \mathcal{A}_H, \|\pi_H(A)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)} = 1\} \leq \\ &\leq \sup\{\|\pi_H(A)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)}; A \in \mathcal{A}_H, \|\pi_H(A)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)} = 1\} = 1 \end{aligned} \quad (3.3)$$

Además, $|\omega(\text{Id}_H)| = \text{Tr}(\rho) = 1$, por lo que $\|\omega\|_{\mathcal{A}_H^*} = 1$. Se tiene que ω es único cumpliendo la condición del enunciado ya que cualquier otro $\tilde{\omega} \in \mathcal{A}_H^*$ que la verifique cumpliría $\tilde{\omega}(A) = \omega(A) \forall A \in \mathcal{A}_H$, y por tanto $\tilde{\omega} = \omega$.

□

Por lo tanto, cada matriz densidad de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ representa bien un estado híbrido. Ahora, la cuestión principal es saber si la aplicación $\phi_H : \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) \longrightarrow \mathcal{E}_H$ que a $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ le asigna el único $\omega \in \mathcal{E}_H$ cumpliendo 2.18 existente por la *Proposición 3.1.1*, es una biyección sobre el subespacio de estados híbridos. Ya se ha visto, por el resultado de [1] que la aplicación es sobreyectiva. Falta comprobar si la aplicación es inyectiva o, por lo contrario, existen distintas matrices densidad que representan el mismo estado físico. En la *Figura 3.1* se esquematiza la construcción anterior.

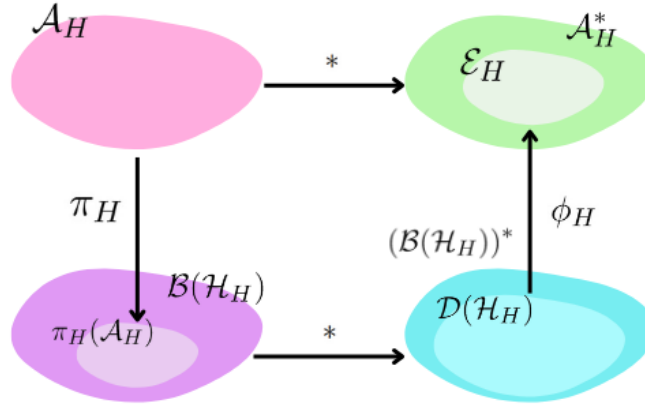


Figura 3.1: Esquema de los espacios de estados y observables híbridos

Proposición 3.1.2. *La aplicación ϕ_H no es inyectiva.*

Demostración. Sea $\omega \in \mathcal{E}_H$ un estado, veamos que existen dos matrices densidad $\rho_1 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ y $\rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ de forma que se verifique $\omega(A) = \text{Tr}(\rho_1 \pi_H(A)) = \text{Tr}(\rho_2 \pi_H(A)) \forall A \in \mathcal{A}_H$ y que, por tanto, $\phi_H(\rho_1) = \phi_H(\rho_2)$ y ϕ_H no es inyectiva. Sabemos que existe al menos una matriz densidad verificando lo anterior (expresión en [1]). Sea $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ esta matriz. Como $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ es un álgebra conmutativa y $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$ es un álgebra no conmutativa, necesariamente $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ es un subespacio propio de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_C)$, y, en consecuencia, $\pi_H(\mathcal{A}_H) = \pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \pi_Q(\mathcal{A}_Q)$ es un subespacio propio de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H) = \mathcal{B}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$. Sean $r_1, r_2 \in \mathbb{R}$ tales que $r_1 \neq r_2$. Definimos $\omega_1 \in (\mathcal{B}(\mathcal{H}_H))^*$ y $\omega_2 \in (\mathcal{B}(\mathcal{H}_H))^*$ como

$$\begin{aligned} \omega_i : \mathcal{B}(\mathcal{H}_H) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ P &\longmapsto \begin{cases} \text{Tr}(\rho P) & \text{si } P \in \pi_H(\mathcal{A}_H) \\ r_i & \text{si } P \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_H) \setminus \pi_H(\mathcal{A}_H) \end{cases} \end{aligned} \quad (3.4)$$

con $i \in \{1, 2\}$. Están bien definidos como funcionales lineales sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ y además son positivos y de norma unidad (demostración análoga a la de la *Proposición 3.1.1*). Por tanto, ω_1 y ω_2 son estados sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$. Además, como $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H) \setminus \pi_H(\mathcal{A}_H) \neq \emptyset$, son distintos estados sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$. Sabemos, por el teorema de Gleason, que los elementos de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ representan uno a uno los estados sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$, por lo tanto, deben existir dos matrices densidad distintas $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$, $\rho_1 \neq \rho_2$ tales que $\omega_1(P) = \text{Tr}(\rho_1 P) \forall P \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ y $\omega_2(P) = \text{Tr}(\rho_2 P) \forall P \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ y que, por tanto, $\forall A \in \mathcal{A}_H$, se tiene

$$\text{Tr}(\rho_1 \pi_H(A)) = \text{Tr}(\rho_2 \pi_H(A)) = \text{Tr}(\rho \pi_H(A)) = \omega(A) \quad (3.5)$$

□

Por lo tanto, se tiene, en efecto, que existen matrices densidad distintas que representan el mismo estado híbrido. Esto tiene gran importancia a la hora de describir la dinámica sobre los estados como curvas en el espacio de matrices densidad. La representación de los estados en forma de matrices densidad sobre el espacio de Hilbert híbrido ha permitido la definición de dinámicas unitaria y, más generalmente, lindbladiana como curvas en el espacio de observables $\mathcal{O}_H \subset \pi_H(\mathcal{A}_H)$ en representación de Heisenberg y como curvas sobre el espacio de matrices densidad $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ en representación de Schrödinger. Sin embargo, el hecho de que existan diferentes matrices densidad representando el mismo estado físico deriva en que una curva bien definida sobre el espacio de matrices densidad puede no estar correctamente definida sobre el espacio de estados. Para que una dinámica de la forma $\dot{\rho}(t) = \mathcal{L}^\dagger \rho(t)$, $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ esté bien definida sobre el espacio de estados, es preciso, por tanto, que si $\rho_1(0) \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ y $\rho_2(0) \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ representan el mismo estado, se tenga que $\rho_1(t)$ y $\rho_2(t)$ representen el mismo estado para cualquier $t \in \mathbb{R}$. En consecuencia, es necesario un análisis de la estructura del espacio de estados representados como matrices densidad para garantizar la correcta definición de las dinámicas estudiadas en el capítulo anterior. Sería razonable tratar de definir una relación de equivalencia sobre $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ de manera que matrices que representen el mismo estado físico sean equivalentes y, así, el espacio cociente tenga como clases de equivalencia los estados. De esta forma, el espacio de estados debe corresponderse con $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)/\mathcal{R}$ con $\mathcal{R}$ la relación de equivalencia generada por

$$\forall \rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) \quad \rho_1 \mathcal{R} \rho_2 \iff \text{Tr}(\rho_1 \pi_H(\hat{A})) = \text{Tr}(\rho_2 \pi_H(\hat{A})), \forall \hat{A} \in \mathcal{A}_H \quad (3.6)$$

Se puede comprobar que se trata, en efecto, de una relación de equivalencia bien definida sobre $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$. Además, las dinámicas unitaria y lindbladiana con las características establecidas en la *Sección 2.5* están bien definidas sobre el espacio de clases, ya que dado $\mathcal{L} : \pi_H(\mathcal{A}_H) \longrightarrow T\pi_H(\mathcal{A}_H)$ verificando $e^{\mathcal{L}t}(\pi_H(\mathcal{A}_H)) \subset \pi_H(\mathcal{A}_H) \forall t$ se tiene $\forall \rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ con $\overline{\rho_1} = \overline{\rho_2}$, $\forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$ y $\forall t$

$$\text{Tr}(e^{\mathcal{L}^\dagger t}(\rho_1) \hat{A}) = \text{Tr}(e^{\mathcal{L}^\dagger t}(\rho_2) \hat{A}) \iff \text{Tr}(\rho_1 e^{\mathcal{L}t}(\hat{A})) = \text{Tr}(\rho_2 e^{\mathcal{L}t}(\hat{A})) \quad (3.7)$$

y la segunda igualdad se cumple porque $e^{\mathcal{L}t}(\pi_H(\hat{A})) \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$ y $\overline{\rho_1} = \overline{\rho_2}$.

Así, hemos podido describir formalmente el espacio de estados representados como matrices densidad y comprobar que las dinámicas estudiadas sobre el espacio completo de matrices densidad

están bien definidas sobre el espacio de clases. Sin embargo, la relación de equivalencia impone una condición sobre todos los observables, lo que dificulta estudiar la estructura analítica de este espacio. Por tanto, sería deseable poder describir la relación de equivalencia en términos de transformaciones entre matrices densidad de forma que, dada una matriz densidad, podamos obtener a través de dichas transformaciones todas las matrices equivalentes a ella.

Así, sea $\mathcal{L} : \pi_H(\mathcal{A}_H) \rightarrow T\pi_H(\mathcal{A}_H)$ tal que $\forall \rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ se tenga $\overline{e^{\mathcal{L}^\dagger} \rho} = \bar{\rho}$, necesariamente cumple $\forall \rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ y $\forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$ que $\text{Tr}(\rho e^{\mathcal{L}} \hat{A}) = \text{Tr}(\rho \hat{A})$. Esto, cumpliéndose para cualquier $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ implica necesariamente que $e^{\mathcal{L}} \hat{A} = \hat{A} \forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$. Así, toda transformación $\mathcal{T} : \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) \rightarrow \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ de la forma $\mathcal{T} = e^{\mathcal{L}}$ con $\mathcal{L} : \pi_H(\mathcal{A}_H) \rightarrow T\pi_H(\mathcal{A}_H)$ que cumpla que deja invariante las clases, necesariamente debe verificar $\mathcal{T} \hat{A} = \hat{A} \forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$.

La pregunta ahora es si, dada una matriz densidad ρ cualquiera, sería posible a través de estas transformaciones alcanzar todos los elementos de la clase de equivalencia de ρ . Asimismo, podríamos preguntarnos si es posible restringirse a un conjunto más pequeño de transformaciones que permitan alcanzar todos los elementos de una clase a partir de uno y cuyas propiedades podamos controlar mejor.

Podemos considerar qué ocurre al restringirnos a transformaciones de la forma $e^{\mathcal{L}} : \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) \rightarrow \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ con $\mathcal{L}$ un lindbladiano. La elección de estas transformaciones permite asegurar $e^{\mathcal{L}} \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) \subset \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$. Si se toma $\mathcal{L}$ de la forma 2.24 y $H, V_k \in \pi_C(\mathcal{A}_C) \forall k \in \{1, \dots, N\}$, se verifica $e^{\mathcal{L}} \hat{A} = \hat{A} \forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$. Se puede tratar de definir una relación de equivalencia que asocie matrices densidad relacionadas a través de una transformación de este tipo y comprobar si el espacio cociente es equivalente al definido previamente. El conjunto de generadores de la evolución lindbladiana

$$L = \left\{ \mathcal{L} : \pi_H(\mathcal{A}_H) \longrightarrow T\pi_H(\mathcal{A}_H) \left| \begin{array}{l} \forall \hat{\rho} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H), \mathcal{L}^\dagger \hat{\rho} = -i[\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k \left(V_k \hat{\rho} V_k^\dagger - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} V_k^\dagger V_k \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} V_k^\dagger V_k \right), \hat{H}, V_k \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_H) \forall k \end{array} \right. \right\} \quad (3.8)$$

es un semigrupo, no un grupo, por lo que el hecho de que dadas $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ exista un lindbladiano $\mathcal{L}_1 \in L$ de forma que $\rho_2 = e^{\mathcal{L}_1} \rho_1$ no implica que exista un lindbladiano $\mathcal{L}_2 \in L$ tal que $\rho_1 = e^{\mathcal{L}_2} \rho_2$. Denotamos $L^{\mathcal{O}_C} = \{\mathcal{L} \in L | H, V_k \in \pi_C(\mathcal{A}_C) \otimes \{\mathbb{I}_Q\} \forall k \in \{1, \dots, N\}\}$. Se puede definir la siguiente relación $\mathcal{R}_{\mathcal{L}} : \forall \rho, \tilde{\rho} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$

$$\rho \mathcal{R}_{\mathcal{L}} \tilde{\rho} \iff \exists \mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \dots, \mathcal{L}_n \in L^{\mathcal{O}}, n \in \mathbb{N} \text{ tales que } \tilde{\rho} = e^{\mathcal{L}_n} \dots e^{\mathcal{L}_2} e^{\mathcal{L}_1} \rho \text{ o } \rho = e^{\mathcal{L}_n} \dots e^{\mathcal{L}_2} e^{\mathcal{L}_1} \tilde{\rho} \quad (3.9)$$

Se trata de una relación de equivalencia bien definida y, por tanto, se podría considerar también el espacio cociente. Sin embargo, esta relación en principio no tendría por qué ser equivalente a la definida por 3.6. Mientras que dados $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ tales que $\rho_1 \mathcal{R}_{\mathcal{L}} \rho_2$ es evidente que $\rho_1 \mathcal{R} \rho_2$, no es sencillo comprobar que dados $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ que representen el mismo estado, exista siempre un conjunto de lindbladianos $\mathcal{L}_1, \dots, \mathcal{L}_n \in L^{\mathcal{O}}$ de forma que $\rho_2 = e^{\mathcal{L}_n} \dots e^{\mathcal{L}_1} \rho_1$ o $\rho_1 = e^{\mathcal{L}_n} \dots e^{\mathcal{L}_1} \rho_2$. Es por ello que vamos a reducir inicialmente el problema a considerar únicamente el espacio de matrices densidad puras y transformaciones unitarias, dado que el grupo de operadores unitarios actúa transitivamente por conjugación sobre este espacio.

Consideremos el subespacio $\mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H) = \{\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H) | \text{Tr}(\rho^2) = 1\}$ de matrices densidad puras. Denotaremos $\mathcal{U} = \{U \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_H) | U^\dagger U = \mathbb{I}\}$ el grupo de operadores unitarios sobre el espacio de Hilbert híbrido y $\mathcal{U}_C = \{U \in \mathcal{U} | [A, U] = 0 \forall A \in \pi_H(\mathcal{A}_H)\}$ el subgrupo de operadores unitarios que conmutan con todo elemento del álgebra de observables híbridos. Los elementos de la forma $U_C \otimes \mathbb{I}_Q$, con $U_C \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$ tal que $U^\dagger U = \mathbb{I}_C$, están en este grupo. Sin embargo, no se ha probado que no existan elementos fuera de $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ que conmuten con todos los elementos de $\pi_C(\mathcal{A}_C)$, ya que la dimensión infinita de este espacio lo dificulta en gran medida, por lo que se consideran en general todos los elementos de $\mathcal{U}$ que conmuten con todos los observables híbridos. Consideremos ahora el espacio cociente $\mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)/\mathcal{U}_C$ con $\mathcal{U}_C$ actuando por conjugación sobre $\mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)$. A continuación, va a tratarse de comparar la relación de equivalencia 3.6 restringida a $\mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)$ con la relación de equivalencia generada por el grupo $\mathcal{U}_C$ actuando por conjugación sobre $\mathcal{D}_{pura}$.

Proposición 3.1.3. *Sean $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)$ y $\bar{\rho}_1, \bar{\rho}_2 \in \mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)/\mathcal{U}_C$ sus clases de equivalencia. Si $\bar{\rho}_1 = \bar{\rho}_2$, entonces ρ_1 y ρ_2 representan el mismo estado físico.*

Demostración. Si $\bar{\rho}_1 = \bar{\rho}_2$, entonces $\exists U \in \mathcal{U}_C$ de forma que $\rho_2 = U\rho_1 U^\dagger$. Así, $\forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$, se tiene $\hat{A} = U^\dagger \hat{A} U$ y

$$\text{Tr}(\rho_2 \hat{A}) = \text{Tr}(U\rho_1 U^\dagger \hat{A}) = \text{Tr}(\rho_1 U^\dagger \hat{A} U) = \text{Tr}(\rho_1 \hat{A}) \quad (3.10)$$

por lo que ρ_1 y ρ_2 representan el mismo estado físico. $\square$

Ahora la pregunta sería si el recíproco es cierto, esto es, si cualesquiera dos matrices que representan el mismo estado físico están relacionadas por una transformación de $\mathcal{U}_C$, de forma que el espacio de clases $\mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)/\mathcal{U}_C$ se corresponda con el espacio de estados híbridos asociados a matrices densidad puras. Sin embargo, vamos a ver que esto, en general, no tiene por qué ser cierto.

Sean $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)$. Denotemos $\mathcal{R}_{pura}$ la restricción de la relación $\mathcal{R}$ a $\mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)$, $\bar{\rho}_1^{\mathcal{R}}, \bar{\rho}_2^{\mathcal{R}} \in \mathcal{D}_{pura}/\mathcal{R}_{pura}$ las clases de ρ_1 y ρ_2 en el espacio cociente $\mathcal{D}_{pura}/\mathcal{R}_{pura}$ y $\bar{\rho}_1^{\mathcal{U}}, \bar{\rho}_2^{\mathcal{U}} \in \mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)/\mathcal{U}_C$ las clases de ρ_1 y ρ_2 en el espacio cociente $\mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)/\mathcal{U}_C$ respectivamente. Supongamos que ρ_1 y ρ_2 representan al mismo estado físico, es decir, $\bar{\rho}_1^{\mathcal{R}} = \bar{\rho}_2^{\mathcal{R}}$. Dado que $\mathcal{U}$ actúa transitivamente sobre $\mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)$, $\exists U \in \mathcal{U}$ tal que $\rho_2 = U\rho_1 U^\dagger$. Así, por 3.7, se tiene necesariamente $\forall \rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ tal que $\bar{\rho}^{\mathcal{R}} = \bar{\rho}_1^{\mathcal{R}}$, que $\overline{U\rho U^\dagger}^{\mathcal{R}} = \bar{\rho}^{\mathcal{R}}$, es decir para cualquier $\rho \in \mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)$ que represente el mismo estado que ρ_1

$$\text{Tr}(\rho \hat{A}) = \text{Tr}(\rho U^\dagger \hat{A} U) \quad \forall \hat{A} \in \pi_H(\mathcal{A}_H) \quad (3.11)$$

Si esto se cumpliera para todo $\rho \in \mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)$, entonces necesariamente se tendría $U^\dagger \hat{A} U = \hat{A}$, de forma que $U \in \mathcal{U}_C$ y por tanto $\bar{\rho}_1^{\mathcal{U}} = \bar{\rho}_1^{\mathcal{U}}$. Sin embargo, esto no tiene por qué ser cierto en general, y puede cumplirse la ecuación 3.11 para todos los ρ que representen el mismo estado que ρ_1 pero no para aquellos que representen a otros estados. Por lo tanto, en general, la acción de $\mathcal{U}_C$ no tiene por qué ser transitiva en cada clase de equivalencia de $\mathcal{D}_{pura}(\mathcal{H}_H)/\mathcal{R}_C$, sino que pueden existir diferentes órbitas. Además, la transformación U anterior actúa de forma que mantiene algunas matrices densidad dentro de su misma clase bajo $\mathcal{R}$ (dejando el estado invariante) y transforma

algunas matrices en otras de diferente clase bajo $\mathcal{R}$ (se trata de una transformación entre estados). Esto imposibilita el tratar de encontrar transformaciones que permitan alcanzar todos los elementos dentro de una clase de equivalencia a partir de uno dado, pues estas transformaciones dependen de la clase concreta. Así, no es posible encontrar un conjunto de transformaciones que permitan escribir la relación de equivalencia $\mathcal{R}$ restringida al subespacio de matrices densidad puras en términos de dichas transformaciones. Dado que el problema para el espacio de matrices densidad completo es más complejo y que, incluso restringiendonos únicamente a matrices densidad puras, no podemos reescribir la relación de equivalencia en términos de un conjunto de transformaciones, vamos, a continuación, a abordar el problema a través de un formalismo alternativo.

3.2. Funciones de Wigner

En la mecánica estadística clásica en su formulación habitual, cada estado físico se corresponde con una medida absolutamente continua respecto a la medida simpléctica. Cuando el espacio de fases es $\mathbb{R}^{2n}$ de coordenadas de posición $x \in \mathbb{R}^n$ y momentos conjugados $\Pi_x \in \mathbb{R}^n$, la medida simpléctica es la medida de Lebesgue (que denotamos $d^n x d^n \Pi_x$), de forma que para un estado dado existe una función densidad de probabilidad $f : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow [0, 1]$ tal que el valor esperado de un observable $a \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^{2n}; \mathbb{R})$ viene dado por $\langle a \rangle = \iint f(x, \Pi_x) a(x, \Pi_x) d^n x d^n \Pi_x$.

Con la idea de construir un formalismo similar para la mecánica cuántica y describirla en un espacio de fases, Eugene Wigner y Jean Ville introducen en 1932 la denominada función de Wigner[10]. Su formulación se basa en la transformada de Weyl, que permite trasladar operadores sobre el espacio de Hilbert cuántico usual de dimensión n a funciones sobre el nuevo espacio de fases $\mathbb{R}^{2n}$. Esta transformada viene dada por

$$\tilde{A}(x, \Pi_x) = \int e^{-\frac{i\Pi_x y}{\hbar}} \left\langle x + \frac{y}{2} \left| A(x, \Pi_x) \right| x - \frac{y}{2} \right\rangle d^n y \quad (3.12)$$

donde $A(x, \Pi_x)$ es el operador sobre el espacio de Hilbert cuántico. Así, si un estado cuántico viene representado por una matriz densidad cuya transformada de Weyl es $\tilde{\rho}(x, \Pi_x)$, la función de Wigner se define como

$$W_\rho(x, \Pi_x) = \frac{\tilde{\rho}(x, \Pi_x)}{(2\pi\hbar)^n} \quad (3.13)$$

Esto permite escribir el valor medio de un operador A como

$$\langle A \rangle = \iint W_\rho(x, \Pi_x) \tilde{A}(x, \Pi_x) d^n x d^n \Pi_x \quad (3.14)$$

al igual que en el caso clásico. Sin embargo, hay una importante diferencia: la función $W(x, \Pi_x)$ no es una densidad de probabilidad, pudiendo, por ejemplo, tomar valores negativos, y no tiene significado físico por sí misma. Es lo que se conoce como distribución de cuasiprobabilidad.

El objetivo de esta sección es el estudio del conjunto de estados híbridos a través del análisis de los estados representados como funciones de Wigner. Así, se parte del espacio de matrices den-

sidad $\mathcal{D}(\mathcal{H}_H) = \mathcal{D}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$, que representan los estados híbridos. Como se ha desarrollado previamente, no existe una biyección entre este espacio y el de estados, sino que sabemos que existen matrices densidad diferentes que representan el mismo estado. Nos restringiremos al estudio de casos en los que la dinámica clásica inicial está definida sobre la variedad $\mathbb{R}^{2n}$, ya que es en este espacio donde se puede definir de manera trivial la función de Wigner.

Comencemos estudiando qué ocurre al transformar las matrices densidad de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$ en funciones de Wigner. Dichas matrices densidad dependen de $4n$ coordenadas: $q = \{q^i\}_{i=1}^n$, $p = \{p_i\}_{i=1}^n$, $\Pi_q = \{\Pi_{q^i}\}_{i=1}^n$, $\Pi_p = \{\Pi_{p_i}\}_{i=1}^n$, donde Π_{q^i} es el conjugado de q^i y Π_{p_i} es el conjugado de p_i . Por tanto, la distribución de Wigner asociada a una matriz $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_H)$ será un espacio de $4n$ dimensiones, representado en $\mathbb{R}^{4n+1}$ como el grafo de la función $W_\rho : \mathbb{R}^{4n} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$W_\rho(q, p, \Pi_q, \Pi_p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2n}} \iint_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-\frac{i\Pi_q \cdot x}{\hbar}} e^{-\frac{i\Pi_p \cdot y}{\hbar}} \left\langle q + \frac{x}{2}, p + \frac{y}{2} \middle| \rho(q, p, \Pi_q, \Pi_p) \middle| q - \frac{x}{2}, p - \frac{y}{2} \right\rangle d^n x d^n y \quad (3.15)$$

Proposición 3.2.1. *La transformada de Weyl de los observables depende únicamente de q y p , siendo independiente de Π_q y Π_p . Además, sea $A \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$, su transformada de Weyl es la función $f_A : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ cuyo operador correspondiente al aplicar el formalismo de Koopman es A .*

Demostración. Los observables clásicos dependen únicamente de q y p por lo que queremos demostrar que

$$\tilde{A}(q, p, \Pi_q, \Pi_p) = \iint_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-\frac{i\Pi_q \cdot x}{\hbar}} e^{-\frac{i\Pi_p \cdot y}{\hbar}} \left\langle q + \frac{x}{2}, p + \frac{y}{2} \middle| A(q, p) \middle| q - \frac{x}{2}, p - \frac{y}{2} \right\rangle d^n x d^n y \quad (3.16)$$

es independiente de Π_q y Π_p para cualquier operador $A \in \Pi_C(\mathcal{A}_C)$. Sea $A \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$. Tenemos $\forall (q, p) \in \mathbb{R}^{2n}$ que el estado $|q, p\rangle$ es un estado propio de $A(q, p)$ y de valor propio real que denotamos $f_A(q, p)$, de forma que induce una aplicación de clase $\mathcal{C}^\infty$,

$$f_A : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R} \quad (q, p) \mapsto f_A(q, p) = \langle q, p | A | q, p \rangle \quad (3.17)$$

Es esta función la que origina el operador A al aplicar el formalismo de Koopman, por lo que se puede suponer que es infinitamente diferenciable y de soporte compacto ($f_A \in \mathcal{C}_C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$). Así, sea $(q, p, \Pi_q, \Pi_p) \in \mathbb{R}^{4n}$ fijo, $\forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2n}$, se tiene

$$\left\langle q + \frac{x}{2}, p + \frac{y}{2} \middle| A(q, p) \middle| q - \frac{x}{2}, p - \frac{y}{2} \right\rangle = f_A \left(q - \frac{x}{2}, p - \frac{y}{2} \right) \left\langle q + \frac{x}{2}, p + \frac{y}{2} \middle| q - \frac{x}{2}, p - \frac{y}{2} \right\rangle \quad (3.18)$$

La ortonormalidad de los estados deriva en que $\forall \varphi \in \mathcal{C}_C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$

$$\iint_{\mathbb{R}^{2n}} \left\langle q + \frac{x}{2}, p + \frac{y}{2} \middle| q - \frac{x}{2}, p - \frac{y}{2} \right\rangle \varphi(x, y) d^n x d^n y = \delta_{(0,0)}[\varphi] = \varphi(0, 0) \quad (3.19)$$

con $\delta_{(0,0)}$ la distribución delta (E.0.21) en el punto $(0, 0) \in \mathbb{R}^{2n}$. Por lo tanto, $\forall (q, p, \Pi_q, \Pi_p) \in \mathbb{R}^{4n}$,

denotando $g_A^{(q,p,\Pi_q,\Pi_p)} : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\forall (x,y) \in \mathbb{R}^{2n}$, $g_A^{(q,p,\Pi_q,\Pi_p)}(x,y) = e^{-\frac{i\Pi_q \cdot x}{\hbar}} e^{-\frac{i\Pi_p \cdot y}{\hbar}} f_A(q,p)$

$$\tilde{A}(q,p,\Pi_q,\Pi_p) = \delta_{\{(0,0)\}} \left[g_A^{(q,p,\Pi_q,\Pi_p)} \right] = f_A(q,p) \quad (3.20)$$

□

Esta independencia de coordenadas y momentos conjugados permite enunciar la proposición siguiente.

Proposición 3.2.2. Sean $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C)$ y sean $W_1, W_2 : \mathbb{R}^{4n} \rightarrow \mathbb{C}$ las funciones de Wigner correspondientes a ρ_1 y ρ_2 respectivamente. Notamos para $i \in \{1, 2\}$ la función $d_i : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$d_i(q,p) = \iint_{\mathbb{R}^{2n}} W_i(q,p,\Pi_q,\Pi_p) d^n \Pi_q d^n \Pi_p \quad \forall (q,p) \in \mathbb{R}^{2n} \quad (3.21)$$

que es la densidad marginal en las variables (q,p) . Entonces ρ_1 y ρ_2 representan el mismo estado físico clásico si y solo si se cumple $\forall (q,p) \in \mathbb{R}^{2n}$ $d_1(q,p) = d_2(q,p)$.

Demostración. Sea $A \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$ un observable cualquiera y $\tilde{A} : \mathbb{R}^{4n} \rightarrow \mathbb{C}$ su transformada de Weyl. Entonces para un sistema físico en el estado correspondiente a ρ_i , con $i \in \{1, 2\}$, el valor esperado del operador A viene dado por

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_i &= \iiint_{\mathbb{R}^{4n}} W_i(q,p,\Pi_q,\Pi_p) \tilde{A}(q,p,\Pi_q,\Pi_p) d^n q d^n p d^n \Pi_q d^n \Pi_p = \\ &= \iint_{\mathbb{R}^{2n}} f_A(q,p) \left(\iint_{\mathbb{R}^{2n}} W_i(q,p,\Pi_q,\Pi_p) d^n \Pi_q d^n \Pi_p \right) d^n q d^n p = \iint_{\mathbb{R}^{2n}} f_A(q,p) d_i(q,p) d^n q d^n p \end{aligned} \quad (3.22)$$

por lo que si se cumple $\forall (q,p) \in \mathbb{R}^{2n}$ $d_1(q,p) = d_2(q,p)$, el valor esperado de todos los observables es igual para ambas matrices densidad, de manera que representan el mismo estado físico.

Recíprocamente, si ambas matrices representan el mismo estado físico, se tendrá $\langle A \rangle_1 = \langle A \rangle_2$ para cualquier operador $A \in \pi_C(\mathcal{A}_C)$. Además, para cualquier función de $\mathcal{C}_C^\infty(\mathbb{R}^{2n}; \mathbb{R})$ existe un operador tal que su transformada de Weyl es dicha función (dado que cada operador se construye a partir de una de estas funciones). Por lo tanto,

$$\iint_{\mathbb{R}^{2n}} f_A(q,p) d_1(q,p) d^n q d^n p = \iint_{\mathbb{R}^{2n}} f_A(q,p) d_2(q,p) d^n q d^n p \quad \forall f_A \in \mathcal{C}_C^\infty(\mathbb{R}^{2n}; \mathbb{R}) \quad (3.23)$$

Esta igualdad para cualquier función $f_A \in \mathcal{C}_C^\infty(\mathbb{R}^{2n}; \mathbb{R})$, que es denso en $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{2n}, \mathbb{R})$, implica necesariamente que $d_1(q,p) = d_2(q,p)$ para casi todo $(q,p) \in \mathbb{R}^{2n}$. Además, por propiedades de las funciones de Wigner (ver Apéndice C), d_1 y d_2 son funciones densidad de probabilidad, por lo que en particular son continuas y necesariamente $d_1 = d_2$. □

Veamos, a continuación, qué ocurre al transformar matrices de $\mathcal{D}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$ en funciones de Wigner. Ahora las mismas dependerán de $4n + 2m$ coordenadas: $(q,p,\Pi_q,\Pi_p) \in \mathbb{R}^{4m}$ correspondien-

tes al subespacio clásico, como se ha denotado hasta el momento; y $(Q, P) \in \mathbb{R}^{2m}$ correspondientes a coordenadas y momentos conjugados del subespacio cuántico. Las siguientes proposiciones, análogas a las anteriores, se demuestran en el *Apéndice D*.

Proposición 3.2.3. *La transformada de Weyl de los observables híbridos depende únicamente de q, p, Q y P , siendo independiente de Π_q y Π_p . Sea $A = \sum_i A_C^i \otimes A_Q^i \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$, se tiene*

$$\tilde{A}(q, p, Q, P) = \sum_i f_{A^i}(q, p) \tilde{A}_Q^i(Q, P) \quad (3.24)$$

con $f_{A^i} : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ la transformada de Weyl de A_C^i , independiente de Π_q y Π_p ; y $\tilde{A}_Q^i$ la transformada de Weyl de A_Q^i .

Proposición 3.2.4. *Sean $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$ y sean $W_1, W_2 : \mathbb{R}^{4n+2m} \rightarrow \mathbb{C}$ las funciones de Wigner correspondientes a ρ_1 y ρ_2 respectivamente. Notamos para $i \in \{1, 2\}$*

$$d_i(q, p, Q, P) = \iint_{\mathbb{R}^{2n}} W_i(q, p, \Pi_q, \Pi_p, Q, P) d^n \Pi_q d^n \Pi_p \quad (3.25)$$

la densidad de cuasiprobabilidad marginal de las variables (q, p, Q, P) . Entonces ρ_1 y ρ_2 representan el mismo estado físico si y solo si se cumple $\forall (q, p, Q, P) \in \mathbb{R}^{2n} \quad d_1(q, p, Q, P) = d_2(q, p, Q, P)$.

Sea $\mathcal{W}$ el conjunto de todas las funciones de Wigner asociadas a matrices densidad sobre $\mathcal{H}_H$ (caracterización de [11] descrita en el *Apéndice C*). Podemos definir la relación de equivalencia sobre $\mathcal{W}$ generada por: $\forall W_1, W_2 \in \mathcal{W}$

$$W_1 \mathcal{R}_W W_2 \iff \iint_{\mathbb{R}^{2n}} W_1(q, p, \Pi_q, \Pi_p, Q, P) d^n \Pi_q d^n \Pi_p = \iint_{\mathbb{R}^{2n}} W_2(q, p, \Pi_q, \Pi_p, Q, P) d^n \Pi_q d^n \Pi_p \quad (3.26)$$

La relación de equivalencia está bien definida y, por tanto, se puede considerar el espacio de clases $\mathcal{W}/\mathcal{R}_W$, en el cual cada clase de equivalencia se corresponde con un único estado físico. Se tiene además $W_1 \mathcal{R}_W W_2$ si y solo si $W = W_1 - W_2$ cumple $\int_{\mathbb{R}^{2n}} W d^n \Pi_q d^n \Pi_p = 0$, por lo que podría pensarse en definir un espacio $\mathcal{G} = \{G \in L^1(\mathbb{R}^{4n+2m}) \mid \iint_{\mathbb{R}^{2n}} W(q, p, \Pi_q, \Pi_p, Q, P) d^n \Pi_q d^n \Pi_p = 0\}$ de forma que se tiene que $(\mathcal{G}, +)$ es un grupo y, si se pudiese probar que su acción sobre $\mathcal{W}$ mediante la suma de funciones está bien definida (es decir si se prueba que $\forall G \in \mathcal{G}, \forall W \in \mathcal{W}$, se tiene $G + W \in \mathcal{W}$), se tendría que la relación de equivalencia $\mathcal{R}_W$ sobre $\mathcal{W}$ es equivalente a la generada por el grupo $\mathcal{G}$ actuando sobre $\mathcal{W}$. Sin embargo, los elementos $\mathcal{W}$ cumplen propiedades de normalización y positividad (*Apéndice C*), siendo esta última la que dificulta garantizar que la acción esté bien definida.

No obstante, a través de esta formulación se ha logrado escribir el espacio de estados como un espacio cociente donde la relación de equivalencia, en lugar de depender de los observables como en el formalismo con matrices densidad, es intrínseca al espacio $\mathcal{W}$, lo que permite analizar de manera más sencilla la relación entre funciones de la misma clase de equivalencia. Si bien esto es una gran ventaja de esta formulación, la complejidad de la estructura del espacio $\mathcal{W}$ y de las dinámicas sobre el mismo supone una dificultad a la hora de modelizar los sistemas con este formalismo.

Conclusiones

En este trabajo se ha resumido cómo la aplicación del formalismo de Koopman a un sistema clásico permite la modelización matemática de los sistemas híbridos clásico-cuánticos a través de la construcción de un espacio de Hilbert que contiene a los estados híbridos. Se ha definido asimismo una C^* -álgebra de observables híbridos y su representación en el espacio de operadores lineales acotados sobre el espacio de Hilbert construido y se ha establecido que cada estado físico se corresponde con al menos una matriz densidad sobre este espacio de Hilbert. Asimismo, se han detallado las condiciones que las dinámicas lindbladiana y, en particular, unitaria, deben satisfacer para estar bien definidas tanto sobre el espacio de observables híbridos como sobre el espacio de matrices densidad.

La principal aportación del trabajo ha sido el estudio del espacio de estados representados como matrices densidad, justificando que el espacio completo de matrices densidad no está en biyección con el espacio de estados, sino que diferentes matrices densidad representan el mismo estado. Así, se ha definido un espacio cociente de manera que cada estado está representado por un único elemento de este espacio y se ha comprobado que las dinámicas anteriormente definidas sobre el espacio completo de matrices densidad están también bien definidas sobre el espacio de estados. Se ha visto que la complejidad de la relación de equivalencia, que supone una condición sobre todos los observables, plantea el problema de la búsqueda de una definición de relación de equivalencia más sencilla que facilite el análisis de la estructura del espacio cociente. Así, finalmente, se ha abordado este problema desde dos perspectivas alternativas: por un lado se ha tratado de dar una mejor caracterización del espacio cociente descrito anteriormente, buscando escribir la relación de equivalencia en términos de transformaciones de matrices densidad y se ha comprobado que esto no es posible; por otro lado, se ha considerado una caracterización alternativa de los estados en términos de funciones de Wigner que ha permitido obtener un espacio cociente que se corresponde con el espacio de estados y donde la relación está definida intrínsecamente sobre el espacio de funciones de Wigner.

Tras el estudio realizado existen varias líneas de trabajo futuro: por una parte continuar el estudio del espacio de estados representados como matrices densidad, analizando las órbitas de las transformaciones definidas dentro de las clases de equivalencia de estados; y por otra parte, profundizar en el formalismo a través de funciones de Wigner mediante un análisis más exhaustivo del espacio de funciones y estableciendo el comportamiento del espacio de estados ante diferentes dinámicas.

Bibliografía

- [1] C. Bouthelie-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, 2023. DOI: 10.1088/1751-8121/acf409
- [2] María del Carmen García Muñoz. *El formalismo de Koopman en la dinámica de sistemas híbridos clásico-cuánticos*. Trabajo de fin de grado, Universidad de Zaragoza, Zaragoza, 2024.
- [3] Ralph Abraham and Jerrold E. Marsden. *Foundations of Mechanics*. American Mathematical Soc., 2008.
- [4] B. O. Koopman. Hamiltonian Systems and Transformation in Hilbert Space. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 17(5):315–318, 1931. DOI: 10.1073/pnas.17.5.315
- [5] Dariusz Chruściński. Koopman’s approach to dissipation. *Reports on Mathematical Physics*, 3(57):319–332, 2006. DOI: 10.1016/S0034-4877(06)80023-6
- [6] I. E. Segal. Irreducible representations of operator algebras. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 53(2):73–88, 1947.
- [7] F. Strocchi. *An Introduction to the Mathematical Structure of Quantum Mechanics: A Short Course for Mathematicians*. World Scientific, 2008.
- [8] G. Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Commun.Math. Phys.*, 48(2):119–130, 1976. DOI: 10.1007/BF01608499
- [9] 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, 1976. DOI: 10.1063/1.522979
- [10] E. Wigner. On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium. *Phys. Rev.*, 40(5):749–759, 1932. DOI: 10.1103/PhysRev.40.749
- [11] Surya Ganguli. *Quantum mechanics on phase space : geometry and motion of the Wigner distribution*. Thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1998.
- [12] Takasi Turumaru. On the Direct-Product of Operator Algebras II. *Tohoku Mathematical Journal, Second Series*, 5(1):1–7, 1953. DOI: 10.2748/tmj/1178245343

APÉNDICE A

Mecánica clásica en variedades simplécticas

Definición A.0.1. Sea $\mathcal{M}$ una variedad diferenciable y $\omega \in \Lambda^2(\mathcal{M})$ una 2-forma. Entonces ω se denomina **simpléctica** si y solo si es cerrada y no degenerada.

Definición A.0.2. Un par $(\mathcal{M}, \omega)$ representa una **variedad simpléctica** si y solo si $\mathcal{M}$ es una variedad diferenciable y $\omega \in \Lambda^2(\mathcal{M})$ es una forma simpléctica definida en ella.

Proposición A.0.3. Sea $\mathcal{M}$ una variedad diferenciable, $\omega \in \Lambda^2(\mathcal{M})$ es no degenerada si y solo si

$$d\mu = \overbrace{\omega \wedge \dots \wedge \omega}^{n \text{ veces}} \quad (\text{A.1})$$

es una forma de volumen. Por lo tanto, toda variedad simpléctica es orientable.

Teorema A.0.4. (de Darboux) Sea $\mathcal{M}$ una variedad diferenciable de dimensión par $2n$ y $\omega \in \Lambda^2(\mathcal{M})$ una 2-forma no degenerada. Entonces ω es cerrada si y solo si existe una carta (U, ϕ) para cada punto $p \in \mathcal{M}$ de forma que $\phi(p) = 0$ y la expresión de la 2-forma en coordenadas locales $\{q^i, p_i\}_{i \in \{1, \dots, n\}}$ es

$$(\phi^{-1})^* \omega|_U = \sum_{i=1}^n dq^i \wedge dp_i \quad (\text{A.2})$$

Esta carta se denomina carta de Darboux.

Definición A.0.5. Se define el **atlas de Darboux** como el atlas formado por las cartas de Darboux.

Proposición A.0.6. Consideremos la aplicación dada por

$$\begin{aligned} \hat{\omega} : T(\mathcal{M}) &\longrightarrow T^*\mathcal{M} \\ X &\longmapsto \hat{\omega}(X) = \omega(X, \cdot) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Entonces la aplicación $\hat{\omega}$ restringida a $\mathcal{X}(\mathcal{M})$, $\hat{\omega} : \mathcal{X}(\mathcal{M}) \longrightarrow \Lambda^1(\mathcal{M})$ es un isomorfismo.

Definición A.0.7. Sea $f \in C^\infty(\mathcal{M})$, se define el **campo vectorial hamiltoniano** asociado a f como el campo vectorial

$$X_f = \hat{\omega}^{-1}(df) \quad (\text{A.4})$$

Proposición A.0.8. Sea $H \in C^\infty(\mathcal{M})$, decimos que una curva $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{M}$ 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 $\{q^i, p_i\}_{i \in \{1, \dots, n\}}$, el campo vectorial Hamiltoniano es de la forma

$$X_H = \sum_{i=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial H}{\partial q^i} \frac{\partial}{\partial p_i} \quad (\text{A.6})$$

de forma que la dinámica viene localmente descrita por

$$\begin{cases} \frac{dq^i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} & \forall i \in \{1, \dots, n\} \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q^i} & \forall i \in \{1, \dots, n\} \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Así, la dinámica, generada por el Hamiltoniano, se escribe como curvas en el espacio de fases $\{\vec{q}(t), \vec{p}(t)\}$. Fijado $t \in \mathbb{R}$, se pueden considerar las funciones $q^i(t), p_i(t) \in C^\infty(\mathcal{M}) \ \forall i \in \{1, \dots, n\}$, que están bien definidas localmente cerca de $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ de forma que a un punto $(\vec{q}_0, \vec{p}_0)$ en el entorno de $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ le asocian $q^i(t)(\vec{q}_0, \vec{p}_0) = q^i(t)$, $p_i(\vec{q}_0, \vec{p}_0) = p_i(t)$. Así, una curva en el espacio de fases $\mathcal{M}$ está directamente asociada a una curva en el espacio de funciones $C^\infty(\mathcal{M})$. Además, se tiene $H \in C^\infty(\mathcal{M})$. Por tanto, es razonable definir una estructura sobre el espacio $C^\infty(\mathcal{M})$ que defina intrínsecamente las curvas, esta estructura es el paréntesis de Poisson.

Definición A.0.9. Sean $(\mathcal{M}, \omega)$ una variedad simpléctica, $f, g \in C^\infty(\mathcal{M})$ dos funciones en $\mathcal{M}$ y $X_f, X_g \in \mathcal{X}(\mathcal{M})$ sus correspondientes campos vectoriales Hamiltonianos. Se define el **paréntesis de Poisson** de f y g como la función

$$\{f, g\} = \omega(X_f, X_g) \quad (\text{A.8})$$

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

$$\begin{aligned} \{\cdot, \cdot\} : C^\infty(\mathcal{M}) \times C^\infty(\mathcal{M}) &\longrightarrow C^\infty(\mathcal{M}) \\ (f, g) &\longmapsto \{f, g\} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Definición A.0.10. El conjunto $C^\infty(\mathcal{M})$ dotado de la operación $\{\cdot, \cdot\}$ es un álgebra anticonmutativa que satisface:

- La regla de Leibniz

$$\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\} \quad \forall f, g, h \in C^\infty(\mathcal{M}) \quad (\text{A.10})$$

- La identidad de Jacobi

$$\{f, \{g, h\}\} + \{h, \{f, g\}\} + \{g, \{h, f\}\} = 0 \quad \forall f, g, h \in C^\infty(\mathcal{M}) \quad (\text{A.11})$$

El conjunto $(C^\infty(\mathcal{M}), \{\cdot, \cdot\})$ es el **álgebra de Poisson** de la variedad simpléctica $\mathcal{M}$.

Con esta definición es posible formular la dinámica Hamiltoniana directamente sobre el álgebra de Poisson, a través de

$$\begin{cases} \frac{dq^i(t)}{dt} = \{q^i(t), H\} & \forall i \in \{1, \dots, n\} \\ \frac{dp_i(t)}{dt} = \{p_i(t), H\} & \forall i \in \{1, \dots, n\} \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

Esto permite generalizar la formulación de variedades simplécticas a variedades más generales, variedades de Poisson, que son aquellas en las que se puede definir una estructura como el paréntesis de Poisson que permita definir la dinámica Hamiltoniana intrínsecamente sobre el espacio de funciones sobre la variedad. Sin embargo, para la aplicación del formalismo de Koopman nos restringimos a considerar dinámicas definidas sobre variedades simplécticas.

APÉNDICE B

C*-álgebras y representación GNS

A continuación, se va a desarrollar el proceso de construcción de las representaciones de las C^* -álgebras clásica, cuántica e híbrida en los espacios de operadores lineales acotados sobre los espacios de Hilbert clásico, cuántico e híbrido respectivamente. Para ello se hace uso del teorema de representación GNS (B.0.1).

Teorema B.0.1. (GNS): Dada una C^* -álgebra $\mathcal{A}$ y un estado ω sobre ella, entonces existe un espacio de Hilbert $\mathcal{H}_\omega$ y una representación $\pi_\omega : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_\omega)$ tales que

1. $\mathcal{H}_\omega$ 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 $\mathcal{H}_\pi$ con un vector cíclico ψ tal que

$$\omega(A) = (\psi, \pi(A)\psi), \forall A \in \mathcal{A} \quad (\text{B.1})$$

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

$$U\pi(A)U^{-1} = \pi_\omega(A), \forall A \in \mathcal{A} \quad \wedge \quad U\psi = \psi_\omega \quad (\text{B.2})$$

B.1. C^* -álgebra cuántica

Se ha definido el álgebra $\mathcal{A}_Q = \mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$ que contiene a los observables físicos de un sistema cuántico. Veamos en primer lugar que en efecto es una C^* -álgebra. Este conjunto es un espacio de Banach dotado de la composición como producto interno (denotado $\cdot_Q$) y la norma de operador definida como

$$\|A\|_Q = \sup\{\|A\psi\|_2, \psi \in \mathcal{H}_Q, \|\psi\| = 1\} \quad (\text{B.3})$$

Es además un álgebra sobre $\mathbb{C}$ y la norma satisface $\|AB\|_Q \leq \|A\|_Q \|B\|_Q, \forall A, B \in \mathcal{A}_Q$, por lo que se trata de un álgebra de Banach. Finalmente, dotado de la involución † (autoadjunto), es un álgebra de Banach involutiva que cumple $\|A^\dagger A\|_Q = \|A^2\|_Q, \forall A \in \mathcal{A}_Q$, por lo que se trata de una C^* -álgebra.

Aunque es evidente la existencia de una biyección entre $\mathcal{A}_Q$ y $\mathcal{B}(\mathcal{H}_Q)$ (la identidad), veamos como el espacio de Hilbert del teorema de la representación GNS $\mathcal{H}_\omega$ es el espacio de Hilbert cuántico y la aplicación π_ω es la identidad si se aplica el teorema sobre $\mathcal{A}_Q$ y un estado $\omega : \mathcal{A}_Q \rightarrow \mathbb{C}$ definido como

$$\omega(A) = \langle \varphi, A\varphi \rangle, \quad \forall A \in \mathcal{A}_Q \quad (\text{B.4})$$

con $\varphi \in \mathcal{H}_Q$ unitario tal que $\{A\varphi | A \in \mathcal{A}_Q\}$ sea denso en $\mathcal{H}_Q$. Para ello supondremos que el espacio de Hilbert cuántico contiene un vector φ con estas características, esto es, cíclico, lo cual está garantizado en espacios de dimensión finita (multiplo normalizado de la identidad) pero no siempre en dimensión infinita. Sean $\varphi \in \mathcal{H}_Q$ y $\omega \in \mathcal{A}_Q^*$ definidos de esta forma. El estado ω es un estado bien definido, dado que $\omega \in \mathcal{A}_Q^*$ y

- $\omega(A^\dagger A) = \langle \varphi, A^\dagger A\varphi \rangle = \langle A\varphi, A\varphi \rangle = \|A\varphi\|_2^2 \geq 0$, esto es $\omega \geq 0$
- Aplicando la desigualdad de Cauchy-Schwartz y la definición de norma en $\mathcal{A}_Q$,

$$\|\omega\|_{\mathcal{A}_Q^*} = \sup\{|\omega(A)|, A \in \mathcal{A}_Q, \|A\|_Q = 1\} \leq \sup\{\|\psi\|_2 \|A\psi\|_2, A \in \mathcal{A}_Q, \|A\|_Q = 1\} \leq 1$$

y $|\omega(\mathbb{I})| = \|\varphi\|_2^2 = 1$, con $\mathbb{I}$ la identidad, por lo que $\|\omega\|_{\mathcal{A}_Q^*} = 1$.

Así, $\mathcal{H}_\omega = \mathcal{H}_Q$, $\psi_\omega = \varphi$ y $\pi_\omega = Id_{\mathcal{A}_Q}$ satisfacen las condiciones 1 y 2 del teorema y cualquier otra representación que las satisfaga es equivalente a la identidad a través de una isometría unitaria.

B.2. C*-álgebra clásica

Para el subsistema clásico, se ha definido el conjunto $\mathcal{A}_C = \mathcal{C}_C(\mathcal{M}_C, \mathbb{C})$ como el álgebra de observables físicos del sistema. Se dota a este espacio de las siguientes operaciones

- Producto interno $\cdot_C$ como el producto punto a punto: $(f \cdot_C g)(x) = f(x)g(x) \forall x \in \mathcal{M}_C$, $\forall f, g \in \mathcal{A}_C$.
- Involución $*$ como la conjugación compleja: $f^* = \bar{f} \forall f \in \mathcal{A}_C$.
- Norma supremo: $\|f\|_C = \sup\{|f(x)|, x \in \mathcal{M}_C\}$, $\forall f \in \mathcal{A}_C$.

El producto interno y la norma le dan estructura de álgebra de Banach y es trivial comprobar que la involución le dota de la estructura de C*-álgebra.

En este caso, no es tan trivial asegurar la existencia de un estado tal que al aplicar la representación GNS el espacio de Hilbert del teorema se corresponda con el espacio de Hilbert clásico construido a través de Koopman. Veamos que esto ocurre si se toma un estado $\omega \in \mathcal{A}_C^*$ definido como

$$\omega(f) = \int_{\mathcal{M}_C} f d\mu, \quad \forall f \in \mathcal{A}_C \quad (\text{B.5})$$

con μ la medida simpléctica. El teorema de representación de Riesz-Markov garantiza que, en efecto, $\omega \in \mathcal{A}_C^*$, ya que $\mathcal{A}_C^*$ se corresponde con el conjunto de las medidas de Radon y la medida de Liouville es un elemento de este conjunto.

Definimos

$$\begin{aligned}\pi_C : \mathcal{A}_C &\longrightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_C) \\ f &\longmapsto f \cdot\end{aligned}\tag{B.6}$$

con $\cdot$ el producto punto a punto de funciones, de manera que $\forall \psi \in \mathcal{H}_C$ y $\forall f \in \mathcal{A}_C$, $\pi_C(f)(\psi) = f \cdot_C \psi \in \mathcal{H}_C$. Esta aplicación está bien definida ya que

$$\int_{\mathcal{M}_C} |f \cdot_C \psi|^2 d\mu = \int_{\mathcal{M}_C} |f|^2 |\psi|^2 d\mu \leq \|f\|_C \int_{\mathcal{M}_C} |\psi|^2 d\mu = \|f\|_C \|\psi\|_{\mathcal{H}_C} < \infty \tag{B.7}$$

por lo que $\forall f \in \mathcal{A}_C$, $\pi_C(f)$ es un operador que envía vectores de $\mathcal{H}_C$ a $\mathcal{H}_C$. Además es claramente lineal por la linealidad del producto punto a punto y acotado por ser f acotada de soporte compacto.

Se tiene que $\mathcal{H}_\omega = \mathcal{H}_C$, $\psi_\omega = 1$ y $\pi_\omega = \pi_C$ satisfacen las condiciones 1 y 2 del teorema de representación GNS y cualquier otra representación que las satisfaga es equivalente a π_C a través de una isometría unitaria.

Observando la aplicación π_C definida, es evidente que el hecho de que $\mathcal{A}_C$ sea un álgebra conmutativa deriva en que $\pi_C(\mathcal{A}_C)$ también lo sea: $\forall \psi \in \mathcal{H}_H$

$$f \cdot_C g = g \cdot_C f \implies (\pi_C(f) \circ \pi_C(g))(\psi) = f \cdot g \cdot \psi = g \cdot f \cdot \psi = (\pi_C(g) \circ \pi_C(f))(\psi) \tag{B.8}$$

B.3. C*-álgebra híbrida

Finalmente, se ha definido el álgebra $\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q$ que contiene a los observables híbridos del sistema y la aplicación $\pi_H = \pi_C \times \pi_Q$. La forma general de un elemento $f \in \mathcal{A}_H$ es

$$f = \sum_k \alpha_k a_k \otimes A_k, \quad a_k \in \mathcal{A}_C, A_k \in \mathcal{A}_Q, \forall k \tag{B.9}$$

Veamos que este espacio es una C*-álgebra con las operaciones siguientes:

- Producto interno $\cdot_H$:

$$f \cdot_H g = \left(\sum_k \alpha_k a_k \otimes A_k \right) \left(\sum_l \beta_l b_l \otimes B_l \right) = \sum_{k,l} \alpha_k \beta_l (a_k \cdot_C b_l) \otimes (A_k \cdot_Q B_l) \quad \forall f, g \in \mathcal{A}_H$$

- Involución $*$:

$$f^* = \left(\sum_k \alpha_k a_k \otimes A_k \right)^* = \sum_k \bar{\alpha}_k a_k^* \otimes A_k^\dagger, \quad \forall f \in \mathcal{A}_H$$

- Norma $\|\cdot\|_H$:

$$\|f\|_H = \|\pi_H(f)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)}$$

El producto interno y la norma le dotan de la estructura de espacio de Banach y las propiedades de la norma en $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ le dan la estructura de álgebra de Banach. Además, la involución está bien definida y es sencillo comprobar que se verifica $\|f * f\|_H = \|f^2\|_H$, por lo que se trata, en efecto, de una C^* -álgebra. La elección de la norma para la que el conjunto es una C^* -álgebra no está fijada; se toma la definida anteriormente, siguiendo [12], porque es invariante bajo representación GNS.

La aplicación π_H está bien definida de $\mathcal{A}_C$ a $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$, y el producto tensorial de los vectores cíclicos de las representaciones GNS clásica y cuántica da un vector cíclico que, junto con π_H y $\mathcal{H}_H$ cumple las condiciones 1 y 2 del teorema de la representación GNS, por lo que, en efecto, π_H es la representación sobre $\mathcal{B}(\mathcal{H}_H)$ del teorema y cualquier otra representación estará relacionada a través de una isometría unitaria.

APÉNDICE C

Las funciones de Wigner

Sea un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ de dimensión n , se ha definido la función de Wigner de una matriz densidad $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$, $W : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{C}$ como

$$W(x, \Pi_x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i\Pi_x \cdot y}{\hbar}} \left\langle x + \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x - \frac{y}{2} \right\rangle d^n y \quad (\text{C.1})$$

Esta definición garantiza que se cumplen ciertas propiedades sobre los estados y observables del sistema físico. Por ejemplo, se verifica que las densidades marginales son

$$\int_{\mathbb{R}^n} W(x, \Pi_x) d^n \Pi_x = \langle x | \rho | x \rangle \quad \wedge \quad \int_{\mathbb{R}^n} W(x, \Pi_x) d^n x = \langle \Pi_x | \rho | \Pi_x \rangle \quad (\text{C.2})$$

que, de hecho, son densidades de probabilidad, o que el valor esperado de los observables es

$$\langle A \rangle = \iint_{\mathbb{R}^{2n}} W(x, \Pi_x) \tilde{A}(x, \Pi_x) d^n x d^n \Pi_x \quad (\text{C.3})$$

para cualquier $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ con $\tilde{A}$ la transformada de Weyl de A .

El espacio de todas las funciones de Wigner, es decir, de todas aquellas funciones $W : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{C}$ tales que existe $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ de manera que W es la función de Wigner asociada a ρ es un conjunto de funciones con propiedades particulares que derivan de las propiedades que satisfacen las matrices densidad. Estas condiciones que debe verificar toda función de $\mathcal{W}$ se detallan a continuación siguiendo [11].

En primer lugar, el hecho de que las matrices densidad sean autoadjuntas deriva en que las funciones de Wigner sean reales, ya que

$$\begin{aligned} \left(\int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i\Pi_x \cdot y}{\hbar}} \left\langle x + \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x - \frac{y}{2} \right\rangle d^n y \right)^* &= \int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{i\Pi_x \cdot y}{\hbar}} \left\langle x + \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x - \frac{y}{2} \right\rangle^* d^n y = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{i\Pi_x \cdot y}{\hbar}} \left\langle x - \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x + \frac{y}{2} \right\rangle d^n y = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i\Pi_x \cdot y}{\hbar}} \left\langle x + \frac{y}{2} \middle| \rho \middle| x - \frac{y}{2} \right\rangle d^n y \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Además, se debe tener $W \in L^1(\mathbb{R}^{2n}, d^n x d^n \Pi_x; \mathbb{R})$ (denotando $d^n x d^n \Pi_x$ la medida de Lebesgue en

$\mathbb{R}^{2n}$) y la propiedad de traza unidad de las matrices densidad deriva en que se deba verificar

$$\iint_{\mathbb{R}^{2n}} W(x, \Pi_x) d^n x d^n \Pi_x = 1 \quad (\text{C.5})$$

Las matrices densidad están asimismo semidefinidas positivas, de manera que $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ se verifica $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$. Esto sobre las funciones de Wigner se traduce en que, si W_ψ es la función de Wigner asociada al estado $|\psi\rangle$, entonces toda función de Wigner $W \in \mathcal{W}$ debe cumplir

$$\iint_{\mathbb{R}^{2n}} W(x, \Pi_x) W_\psi(x, \Pi_x) d^n x d^n \Pi_x \geq 0 \quad (\text{C.6})$$

Las condiciones anteriores son necesarias y suficientes para que una función $W : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{C}$ cumpla $W \in \mathcal{W}$. Por tanto, el espacio $\mathcal{W}$ es el formado por todas aquellas $W \in L^1(\mathbb{R}^{2n}, d^n x d^n \Pi_x; \mathbb{R})$ tales que

1.

$$\iint_{\mathbb{R}^{2n}} W(x, \Pi_x) d^n x d^n \Pi_x = 1$$

2. Para cualquier $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ cuya función de Wigner es $W_\psi \in \mathcal{W}$, se cumple

$$\iint_{\mathbb{R}^{2n}} W(x, \Pi_x) W_\psi(x, \Pi_x) d^n x d^n \Pi_x \geq 0$$

Mientras que la primera de las condiciones es sencilla de verificar, la segunda resulta más complicada, lo que dificulta la caracterización del espacio $\mathcal{W}$.

APÉNDICE D

Demostraciones auxiliares

Proposición D.0.1. *La transformada de Weyl de los observables híbridos depende únicamente de q, p, Q y P , siendo independiente de Π_q y Π_p . Sea $A = \sum_i A_C^i \otimes A_Q^i \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$, se tiene*

$$\tilde{A}(q, p, Q, P) = \sum_i f_{A^i}(q, p) \tilde{A}_Q^i(Q, P) \quad (\text{D.1})$$

con $f_{A^i} : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ la transformada de Weyl de A_C^i , independiente de Π_q y Π_p ; y $\tilde{A}_Q^i$ la transformada de Weyl de A_Q^i .

Demostración. (de la Proposición 3.2.3). Sea $A = \sum_i A_C^i \otimes A_Q^i \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$. Se tiene $\forall i$ y $\forall (q, p) \in \mathbb{R}^{2n}, \forall Q \in \mathbb{R}^m$ que $|q, p, Q\rangle$ es autoestado de $A_C^i \otimes A_Q^i$ y

$$(A_C^i \otimes A_Q^i)|q, p, Q\rangle = A_C^i|q, p\rangle \otimes A_Q^i|Q\rangle \quad (\text{D.2})$$

de forma que por linealidad de la integral

$$\begin{aligned} \tilde{A}(q, p, \Pi_q, \Pi_p, Q, P) &= \\ &= \sum_i \iiint_{\mathbb{R}^{2n+m}} e^{-\frac{i\Pi_q \cdot x}{\hbar}} e^{-\frac{i\Pi_p \cdot y}{\hbar}} e^{-\frac{iP \cdot z}{\hbar}} \left\langle q + \frac{x}{2}, p + \frac{y}{2}, Q + \frac{z}{2} \left| A \right| q - \frac{x}{2}, p - \frac{y}{2}, Q - \frac{z}{2} \right\rangle d^n x d^m y d^m z = \\ &= \sum_i \iint_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-\frac{i\Pi_q \cdot x}{\hbar}} e^{-\frac{i\Pi_p \cdot y}{\hbar}} \left\langle q + \frac{x}{2}, p + \frac{y}{2} \left| A_C^i \right| q - \frac{x}{2}, p - \frac{y}{2} \right\rangle d^n x d^n y \int_{\mathbb{R}^m} e^{-\frac{iP \cdot z}{\hbar}} \left\langle Q + \frac{z}{2} \left| A_Q^i \right| Q - \frac{z}{2} \right\rangle d^m z = \\ &= \sum_i \tilde{A}_C^i(q, p, \Pi_q, \Pi_p) \tilde{A}_Q^i(Q, P) = \sum_i f_{A_C^i}(q, p) \tilde{A}_Q^i(Q, P) \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

□

Proposición D.0.2. *Sean $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_C) \otimes \mathcal{D}(\mathcal{H}_Q)$ y sean $W_1, W_2 : \mathbb{R}^{4n+2m} \rightarrow \mathbb{C}$ las funciones de Wigner correspondientes a ρ_1 y ρ_2 respectivamente. Notamos para $i \in \{1, 2\}$ la función $d_i : \mathbb{R}^{2n+2m} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por*

$$d_i(q, p, Q, P) = \iint_{\mathbb{R}^{2n}} W_i(q, p, \Pi_q, \Pi_p, Q, P) d^n \Pi_q d^n \Pi_p \quad \forall (q, p, Q, P) \in \mathbb{R}^{2n+2m} \quad (\text{D.4})$$

que es la densidad marginal en las variables (q, p, Q, P) . Entonces ρ_1 y ρ_2 representan el mismo

estado físico si y solo si se cumple $\forall (q, p, Q, P) \in \mathbb{R}^{2n}$ $d_1(q, p, Q, P) = d_2(q, p, Q, P)$.

Demostración. (de la *Proposición 3.2.4*). Sean ρ_1, ρ_2, W_1, W_2 como en el enunciado. Sea $A \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$ un observable y $\tilde{A} : \mathbb{R}^{4n+2m} \rightarrow \mathbb{C}$ su transformada de Weyl, que es independiente de Π_q y Π_p por la *Proposición 3.2.3*. Entonces para un sistema en el estado ρ_i , con $i \in \{1, 2\}$, el valor esperado de A viene dado por

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_i &= \int_{\mathbb{R}^{4n+2m}} W_i(q, p, \Pi_1, \Pi_p, Q, P) \tilde{A}(q, p, Q, P) d^n q d^n p d^m Q d^m P = \\ &= \int_{\mathbb{R}^{2n+2m}} \tilde{A}(q, p, Q, P) \left(\int_{\mathbb{R}^{2n}} W_i(q, p, \Pi_q, \Pi_p, Q, P) d^n \Pi_q d^n \Pi_p \right) d^n q d^n p d^m Q d^m P = \quad (\text{D.5}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^{2n+2m}} \tilde{A}(q, p, Q, P) d_i(q, p, Q, P) d^n q d^n p d^m Q d^m P \end{aligned}$$

Si $d_1(q, p, Q, P) = d_2(q, p, Q, P)$ es evidente que $\langle A \rangle_1 = \langle A \rangle_2 \forall A \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$, por lo que necesariamente ρ_1 y ρ_2 representan el mismo estado.

Recíprocamente, supongamos que ρ_1 y ρ_2 representan el mismo estado. Entonces $\langle A \rangle_1 = \langle A \rangle_2 \forall A \in \pi_H(\mathcal{A}_H)$. Es decir, se cumple

$$\int_{\mathbb{R}^{2n+2m}} \tilde{A}(q, p, Q, P) d_1(q, p, Q, P) d^n q d^n p d^m Q d^m P = \int_{\mathbb{R}^{2n+2m}} \tilde{A}(q, p, Q, P) d_2(q, p, Q, P) d^n q d^n p d^m Q d^m P \quad (\text{D.6})$$

Para cualquier función $\tilde{A} : \mathbb{R}^{2n+2m} \rightarrow \mathbb{C}$ que sea transformada de Weyl de algún elemento de $\pi_H(\mathcal{A}_H)$. Se puede aplicar la transformada de Weyl inversa sobre cualquier función de $L^\infty(\mathbb{R}^{2n+2m})$ y se obtiene un elemento de $\pi_H(\mathcal{A}_H)$, dada la independencia de estas funciones de las coordenadas Π_q, Π_p . Por tanto, la igualdad anterior se cumple para cualquier $\tilde{A} \in L^\infty(\mathbb{R}^{2n+2m})$, siendo $d_1, d_2 \in L^1(\mathbb{R}^{2n+2m})$, implica necesariamente que $d_1 = d_2$. $\square$

APÉNDICE E

Definiciones y resultados auxiliares

Geometría diferencial

Definición E.0.1. Sea $\mathcal{M}$ una variedad diferenciable y $p \in \mathcal{M}$ un punto. Se llama **vector tangente** a $\mathcal{M}$ en p a cualquier aplicación lineal $X_p : \mathcal{C}^\infty(p) \rightarrow \mathcal{C}^\infty(p)$ que cumpla la regla de Leibniz, es decir, tal que $\forall f, g \in \mathcal{C}^\infty(p)$

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

Definición E.0.2. Sea $\mathcal{M}$ una variedad diferenciable y $p \in \mathcal{M}$ un punto. Se define el **espacio tangente** a $\mathcal{M}$ en p , denotado $T_p\mathcal{M}$ como el conjunto de todos los vectores tangentes a $\mathcal{M}$ en p . Se trata de un espacio vectorial con la suma de vectores como operación interna y la multiplicación por un real como operación externa.

Definición E.0.3. Sea $\mathcal{M}$ una variedad diferenciable. Se define el **fibrado tangente** de $\mathcal{M}$, $T\mathcal{M}$, como la unión de todos los espacios tangentes a la variedad, es decir,

$$T\mathcal{M} = \bigcup_{p \in \mathcal{M}} T_p\mathcal{M} \quad (\text{E.2})$$

Definición E.0.4. Sea $\mathcal{M}$ una variedad diferenciable y $T\mathcal{M}$ su fibrado tangente. Un **campo vectorial** es una aplicación

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

que asocia a cada punto de la variedad un vector del espacio tangente a la variedad en dicho punto. El campo vectorial X es diferenciable si define una derivación del álgebra $(\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M}), \cdot)$ de la forma $D_X f = X(f)$. El conjunto de todos los campos vectoriales diferenciables se denota $\mathcal{X}(\mathcal{M})$.

C^* -álgebras y representaciones

Definición E.0.5. 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 E.0.6. Una $*$ -álgebra $\mathcal{A}$ es un álgebra en la cual está definida una aplicación $*$: $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$, denominada involución, tal que

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

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

Definición E.0.7. Una C^* -álgebra $\mathcal{A}$ es un álgebra de Banach involutiva que satisface

$$\|x^*x\| = \|x\|^2 \quad (\text{E.4})$$

Lema E.0.8. 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

$$\|\omega\|_{\mathcal{A}^*} = \sup\{|\omega(a)|, \|a\|_{\mathcal{A}} = 1\}, \quad \forall \omega \in \mathcal{A}^* \quad (\text{E.5})$$

Definición E.0.9. 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 E.0.10. 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 E.0.11. 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:

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

Definición E.0.12. 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 E.0.13. (Gelfand-Naimark) Una C^* -álgebra $\mathcal{A}$ es isomorfa a un álgebra de operadores acotados sobre un espacio de Hilbert.

Teoría de la medida

Definición E.0.14. Sea $(\Omega, \mathcal{F})$ 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 E.0.15. 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

$$\nu(M) = 0 \quad \forall M \in \mathcal{F} \text{ tal que } \mu(M) = 0 \quad (\text{E.6})$$

Teorema E.0.16. (Radon-Nicodym). Sea $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$ un espacio de medida σ -finito, ν una medida definida en el espacio medible $(\Omega, \mathcal{F})$ y absolutamente continua respecto de μ . Existe una función integrable $f \in \mathcal{L}^1(\mu, \mathbb{C})$ que cumple

$$\nu(A) = \int_A f d\mu, \quad \forall A \text{ medible} \quad (\text{E.7})$$

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

Definición E.0.17. Una medida μ es **regular exterior** sobre un conjunto medible Borel E si

$$\mu(E) = \inf\{\mu(U) \mid U \supset E, U \text{ abierto}\} \quad (\text{E.8})$$

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

$$\mu(E) = \sup\{\mu(K) \mid K \subset E, K \text{ compacto}\} \quad (\text{E.9})$$

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

Definición E.0.18. 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 E.0.19. (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

$$\omega(f) = \int_{\Omega} f d\mu, \quad \forall f \in C_C(\Omega) \quad (\text{E.10})$$

Otras definiciones y resultados

Definición E.0.20. Sea $\mathcal{A}$ un álgebra de Lie. Se dice que la aplicación $X : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ es una **derivación** del álgebra si satisface la regla de Leibniz, esto es, $\forall a, b \in \mathcal{A}$

$$X([a, b]) = [X(a), b] + [a, X(b)] \quad (\text{E.11})$$

Definición E.0.21. Sea Ω un abierto de $\mathbb{R}^n$. Sea $x_0 \in \Omega$. Denotemos $\mathcal{D}(\Omega)$ el conjunto de las funciones reales infinitamente derivables y de soporte compacto sobre Ω . Se define la **distribución delta** en el punto x_0 como la aplicación

$$\begin{aligned} \delta_{x_0} : \mathcal{D}(\Omega) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \varphi &\longmapsto \langle \delta_{x_0}, \varphi \rangle = \varphi(x_0) \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

Definición E.0.22. Se define el **centro** de un álgebra $\mathcal{A}$ como el conjunto

$$Z(\mathcal{A}) = \{x \in \mathcal{A} | ax = xa \forall a \in \mathcal{A}\} \quad (\text{E.13})$$

Teorema E.0.23. (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 $\mathcal{H}$,

$$\mu(A) = \text{Tr}(\hat{\rho}P_A) \quad (\text{E.14})$$

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

Teorema E.0.24. (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

$$U(t) \equiv e^{itH} \quad (\text{E.15})$$