
TRABAJO DE FIN DE GRADO:
Aplicaciones del formalismo de Koopman en la
dinámica de sistemas estadísticos híbridos
clásico-cuánticos.

GRADO EN FÍSICA, UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA
CURSO 2024/2025

AUTOR:
SANTIAGO PUYOL MIANO

DIRECTOR:
JESÚS CLEMENTE GALLARDO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA

Resumen

El presente Trabajo de Fin de Grado aborda el problema fundamental de la dinámica en sistemas híbridos clásico-cuánticos, un área de intersección crucial para diversas ramas de la física y la química. Utilizando como base el formalismo de Koopman-von Neumann (KvN) y su generalización a través del Modelado Dinámico Operacional (ODM), se explora un marco teórico unificado que permite una descripción consistente de la interacción entre grados de libertad clásicos y cuánticos. Mediante la implementación de un modelo numérico de osciladores armónicos acoplados, se investiga la transición entre los regímenes clásico y cuántico, controlada por un parámetro de deformación continuo, κ .

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mi director, Jesús, por su dedicación, paciencia e implicación con el proyecto, su inestimable supervisión y su guía para que nunca faltase algo en lo que trabajar, pero siempre supiera cómo tenía que trabajar en ello. Hay muy pocos directores con el compromiso que tú tienes, y eso te hace un modelo no sólo como científico, sino como docente y como persona.

A mis padres, porque sin su ayuda y apoyo incondicional no hubiera podido llegar hasta aquí. La mitad de mis logros serán siempre vuestros.

A Marina, por ser mi motor y una inspiración tanto moral como académica para sacar todo esto adelante.

A Borja, porque te encontré en mi clase recién salidos de primaria y he tenido que sacarme una carrera para conseguir librarme de ti. Gracias por estar en cada paso del camino.

A toda la gente que no he nombrado, pero que me ha acompañado en esta aventura que ha sido la carrera de Física, tanto compañeros como no compañeros. El fin es mucho más bonito con gente así en el camino.

*I write these words in steel, for
anything not set in metal cannot be
trusted.*

Kwaan, MISTBORN.

ÍNDICE

1	Introducción	1
2	Fundamentos Teóricos de la Dinámica Híbrida	4
2.1.	Mecánica Clásica en un Espacio de Hilbert	4
2.2.	Repaso de la Formulación Algebraica de la Mecánica Cuántica	6
2.3.	Hacia un Modelo Híbrido Unificado	7
3	Simulación Numérica y Análisis del Modelo Híbrido	10
3.1.	Metodología de la Simulación	10
3.2.	Validación y Análisis de la Simulación	14
3.3.	Extensión al Potencial Anarmónico (Cuártico)	19
4	Conclusiones y Trabajo Futuro	22
4.1.	Síntesis de los Resultados Clave	22
4.2.	Limitaciones y Perspectivas	23
4.3.	Líneas de Investigación Futuras	24
	Bibliografía	25
A	El Parámetro κ y la Representación en el Espacio de Fases de Wigner	26
A.1.	La Función de Wigner y el Corchete de Moyal	26
A.2.	Equivalencia con la Dinámica Unificada del ODM	27
B	Resultados Numéricos Adicionales y Galería de Visualizaciones	28
B.1.	Gráficas excluidas de la parte principal.	28
C	Sobre la Implementación Computacional	33
C.1.	Estructura Modular y Versatilidad	33
C.2.	Desafíos y Rendimiento	34

Capítulo 1

Introducción

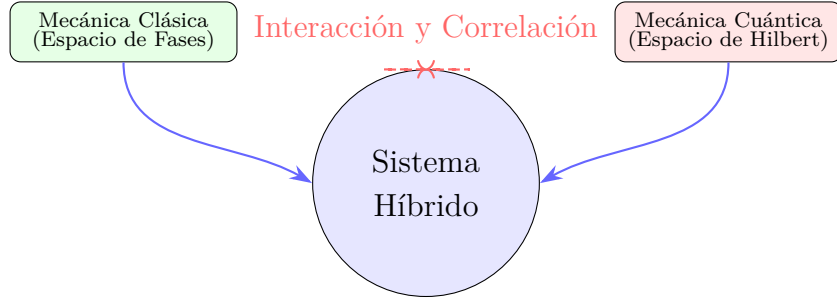
The mathematician plays a game in which he himself invents the rules while the physicist plays a game in which the rules are provided by Nature, but as time goes on it becomes increasingly evident that the rules which the mathematician finds interesting are the same as those which Nature has chosen.

—*P.A.M. Dirac, 1939.*

En el corazón de la física teórica yace una de sus tensiones más profundas y productivas: la dicotomía entre el mundo clásico, descrito por las trayectorias deterministas de la mecánica de Newton y Hamilton, y el mundo cuántico, gobernado por las probabilidades y las superposiciones de la mecánica de Schrödinger y Heisenberg. Aunque la mecánica cuántica es reconocida como la teoría más fundamental, la descripción clásica no solo persiste como un límite práctico indispensable, sino que también es una herramienta esencial en dominios donde un tratamiento cuántico completo es computacionalmente intratable o conceptualmente innecesario. Esta coexistencia da lugar a un vasto y fascinante campo de estudio: los **sistemas híbridos clásico-cuánticos**.

Estos sistemas, en los que ciertos grados de libertad se comportan clásicamente mientras interactúan con otros que requieren una descripción cuántica, no son una mera curiosidad teórica. Son, de hecho, el pan de cada día en una multitud de disciplinas. En la **química molecular**, la dinámica de los núcleos atómicos, pesados y lentos, se aproxima a menudo de forma clásica, mientras que el comportamiento de los electrones de valencia, ligeros y ágiles, se trata cuánticamente. Este enfoque es crucial para modelar reacciones químicas, espectroscopía y procesos no adiabáticos donde la aproximación de Born-Oppenheimer no es válida [8]. En la **materia condensada**, fenómenos como la interacción de la

luz con los plasmones en un metal o la dinámica de un defecto en una red cristalina involucran la interacción entre un campo electromagnético clásico y excitaciones cuánticas. Incluso en la **cosmología**, se investigan modelos en los que el campo gravitatorio se trata clásicamente mientras que los campos de materia que lo pueblan se cuantizan, en un intento de aproximarse a una teoría de la gravedad cuántica.



El desafío fundamental, sin embargo, es formular una dinámica para estos sistemas que sea matemáticamente consistente y físicamente significativa. Las recetas *ad-hoc*, como los enfoques de campo medio tipo Ehrenfest, aunque útiles, a menudo fallan a la hora de capturar correlaciones cuánticas cruciales, decoherencia y el fenómeno del *back-reaction* (la influencia del subsistema cuántico sobre el clásico). Por tanto, la búsqueda de un “primer principio” para la dinámica híbrida es un objetivo central de la física teórica.

Este trabajo se enmarca en una línea de investigación que busca abordar este desafío desde una perspectiva algebraica y unificadora, utilizando dos herramientas conceptuales de gran poder:

1. **El Formalismo de Koopman-von Neumann (KvN):** Propuesto en los albores de la era cuántica, este formalismo reformula la mecánica clásica en el lenguaje de los espacios de Hilbert, proporcionando un terreno matemático común con la mecánica cuántica [5, 9]. La evolución de una distribución clásica $\rho(q, p)$, dictada por la ecuación de Liouville,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H_C, \rho\}_{PB},$$

se traduce en una evolución unitaria de una “función de onda” clásica $\psi(q, p)$ (donde $\rho = |\psi|^2$) generada por el operador Liouvilliano $\hat{L}$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{L}\psi.$$

Esta perspectiva, revisada y expandida en décadas recientes [6], permite tratar la dinámica clásica con las herramientas del análisis funcional que se usan en la mecánica cuántica.

2. **El Modelado Dinámico Operacional (ODM):** Este marco teórico más reciente [2] generaliza el enfoque de KvN introduciendo un parámetro de deformación continuo, $\kappa \in [0, 1]$. Este parámetro modifica la relación de conmutación canónica, $[\hat{x}_q, \hat{p}_q] = i\hbar\kappa$, permitiendo transitar suavemente entre un régimen puramente clásico ($\kappa = 0$) y uno puramente cuántico ($\kappa = 1$). El ODM ofrece una perspectiva poderosa sobre el

límite clásico y la naturaleza de las representaciones en el espacio de fases, como la de Wigner.

La unificación de estos dos formalismos no es un mero ejercicio matemático; es una herramienta poderosa para investigar la naturaleza misma de la frontera clásico-cuántica. Permite formular preguntas precisas sobre cómo emergen las propiedades clásicas a partir de una descripción cuántica y, a la inversa, cómo la “cuanticidad” residual afecta a los grados de libertad que consideramos clásicos. Uno de los hallazgos centrales de este trabajo será, de hecho, que la covarianza estadística entre los subsistemas, una medida directa de su correlación, se comporta de manera anti-intuitiva con el parámetro κ , alcanzando su máximo no en el límite cuántico, sino en el cuasi-clásico. Este resultado sugiere una sutil redistribución de la información cuántica entre la estructura de los operadores y la dinámica de sus correlaciones.

El presente Trabajo de Fin de Grado se sitúa en la intersección de estos formalismos. Utilizando el marco ODM como laboratorio teórico y computacional, este trabajo explora la dinámica de un sistema híbrido modelo con el fin de verificar resultados teóricos previos, mejorar el entendimiento de la transición clásico-cuántica y, en última instancia, contribuir a la caracterización formal de estos sistemas complejos. El trabajo se enmarca en la línea de investigación del grupo de Física Teórica de la Universidad de Zaragoza, que ha realizado contribuciones significativas en la formulación de dinámicas híbridas y el estudio de sus propiedades termodinámicas y de coherencia [1, 3].

Los objetivos específicos de este trabajo son:

1. Revisar y consolidar los conceptos fundamentales del formalismo de Koopman y su generalización a través del modelo ODM.
2. Implementar y simular numéricamente un modelo de osciladores acoplados que sirva como laboratorio para estudiar la transición de un sistema clásico-cuántico a uno puramente cuántico.
3. Analizar la validez y las limitaciones de la aproximación numérica, en particular el efecto del truncamiento del espacio de Hilbert clásico.
4. Utilizar las capacidades del formalismo para investigar fenómenos clave como la retro-reacción (*back-reaction*), la covarianza y el entrelazamiento, y cómo dependen del parámetro κ y de la forma del acoplo.
5. Con ello, sentar las bases para estimar la capacidad predictiva del modelo híbrido, comparando su dinámica con la de modelos cuánticos efectivos y estableciendo un marco para futuros estudios de validación.

La estructura del trabajo está diseñada para guiar al lector desde los fundamentos teóricos hasta los resultados numéricos y sus implicaciones. El Capítulo 2 establecerá las bases conceptuales, detallando los formalismos KvN y ODM. El Capítulo 3 describirá la implementación del modelo, presentará los resultados de las simulaciones y analizará la dinámica observada. Finalmente, el Capítulo 4 sintetizará los hallazgos, discutirá sus limitaciones y propondrá futuras líneas de investigación.

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos de la Dinámica Híbrida

El objetivo de este capítulo es establecer un marco teórico unificado que permita describir de manera consistente la dinámica de sistemas compuestos por subsistemas clásicos y cuánticos. Para lograrlo, es necesario primero reformular tanto la mecánica clásica como la cuántica en un lenguaje matemático común. Partiremos del elegante formalismo de Koopman-von Neumann, que eleva la mecánica clásica a la estructura de un espacio de Hilbert, y lo generalizaremos a través del Modelado Dinámico Operacional (ODM) para obtener un modelo que interpole suavemente entre los regímenes clásico y cuántico.

2.1. MECÁNICA CLÁSICA EN UN ESPACIO DE HILBERT

2.1.1. La Formulación Estándar y su Álgebra de Poisson

Tradicionalmente, la mecánica clásica se describe en una **variedad simpléctica** que conforma el espacio de fases, M_C , parametrizado por coordenadas canónicas de posición y momento, (q, p) , donde un observable clásico es una función real y suave sobre el espacio de fases, $f \in C^\infty(M_C)$. El conjunto de todos los observables forma un álgebra conmutativa bajo el producto punto a punto.

La estructura que gobierna la dinámica es el paréntesis de Poisson.

Definición 2.1 (Paréntesis de Poisson):

El paréntesis de Poisson es una operación bilineal antisimétrica $\{\cdot, \cdot\}_{PB}$ sobre el espacio de observables que, junto con el producto punto a punto, dota a $C^\infty(M_C)$ de la estructura de un álgebra de Poisson. En coordenadas canónicas, se define como:

$$\{f, g\}_{PB} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right). \quad (2.1)$$

La evolución temporal de cualquier observable f viene entonces determinada por las ecuaciones de Hamilton, que pueden escribirse de forma compacta.

PROPOSICIÓN 2.2 (Ecuación de Hamilton). La tasa de cambio de un observable clásico f en el tiempo viene dada por su paréntesis de Poisson con el Hamiltoniano del sistema, H_C :

$$\frac{df}{dt} = \{f, H_C\}_{PB}. \quad (2.2)$$

Análogamente, la evolución de una distribución de probabilidad en el espacio de fases, $\rho(q, p; t)$, está gobernada por la **ecuación de Liouville**, que describe la conservación de la densidad en el flujo Hamiltoniano:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\{\rho, H_C\}_{PB}. \quad (2.3)$$

Si bien esta formulación es poderosa y geoméricamente elegante, su estructura matemática es fundamentalmente distinta a la de la mecánica cuántica, lo que dificulta la construcción de modelos híbridos.

2.1.2. El Formalismo de Koopman-von Neumann

A principios de la década de 1930, Bernard Koopman y John von Neumann propusieron una reformulación radical de la mecánica estadística clásica que la eleva a la estructura de un espacio de Hilbert, acercándola conceptualmente a la mecánica cuántica [5, 9].

Definición 2.3 (Espacio de Hilbert de Koopman-von Neumann):

En el formalismo KvN, los estados de un sistema estadístico se representan como “funciones de onda” complejas y de cuadrado integrable, $\psi(q, p)$, que pertenecen al espacio de Hilbert $\mathcal{H}_C = L^2(M_C, d\mu)$, donde $d\mu$ es la medida de Liouville. La densidad de probabilidad clásica se recupera como el módulo al cuadrado de esta función de onda: $\rho(q, p) = |\psi(q, p)|^2$.

Definición 2.4 (Observables y Dinámica en KvN):

- Los observables clásicos, $f(q, p)$, se representan como operadores autoadjuntos que actúan sobre $\mathcal{H}_C$. En la representación más simple (de Schrödinger), los operadores de posición $\hat{q}$ y momento $\hat{p}$ son **operadores multiplicativos**. El álgebra de estos observables, que denotaremos como $\mathcal{A}_C$, es inherentemente **conmutativa**: $[\hat{q}, \hat{p}] = 0$.
- La evolución temporal de la función de onda clásica $\psi(t)$ viene dada por una ecuación de tipo Schrödinger, $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{L}\psi$, donde el generador de la dinámica, $\hat{L}$, es el **operador de Koopman** o Liouvilliano.

PROPOSICIÓN 2.5 (El Operador Liouvilliano). El operador de Koopman $\hat{L}$ es autoadjunto con respecto al producto escalar de $L^2(M_C)$. En coordenadas canónicas, toma la forma de un operador diferencial de primer orden:

$$\hat{L} = -i\hbar\{H_C, \cdot\}_{PB} = -i\hbar \sum_i \left(\frac{\partial H_C}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} - \frac{\partial H_C}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \right). \quad (2.4)$$

Observación 2.6 (Naturaleza Externa del Generador Clásico). Es crucial notar que el generador de la dinámica, $\hat{L}$, es un **automorfismo externo** al álgebra de observables $\mathcal{A}_C$. Esto se debe a que $\hat{L}$ es un operador diferencial, mientras que los elementos de $\mathcal{A}_C$ (en esta representación) son puramente multiplicativos. Esta necesidad de un generador externo es una característica fundamental del formalismo KvN. Para una revisión moderna y detallada de estos conceptos, véase [6].

2.2. REPASO DE LA FORMULACIÓN ALGEBRAICA DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

La formulación estándar de la mecánica cuántica, cuando se expresa en un lenguaje algebraico, presenta analogías y diferencias clave con el formalismo KvN.

Definición 2.7 (Álgebra de Observables Cuánticos):

- Los **estados puros** son rayos en un espacio de Hilbert complejo y separable, $\mathcal{H}_Q$. Los estados mixtos se describen mediante operadores de densidad ρ_Q , que son operadores positivos de traza unidad.
- Los **observables** físicos se representan mediante operadores autoadjuntos que actúan sobre $\mathcal{H}_Q$. El conjunto de todos los operadores lineales acotados forma una C^* -álgebra, $\mathcal{A}_Q = B(\mathcal{H}_Q)$.

PROPOSICIÓN 2.8 (No Conmutatividad y Dinámica Cuántica).

- El álgebra $\mathcal{A}_Q$ es fundamentalmente **no-conmutativa**, como lo encapsula la relación de conmutación canónica (CCR): $[\hat{x}_q, \hat{p}_q] = i\hbar$.
- La evolución temporal de un observable $\hat{A}$ en la imagen de Heisenberg viene dada por la ecuación de Heisenberg:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_Q, \hat{A}], \quad (2.5)$$

donde el generador, el Hamiltoniano $\hat{H}_Q$, es en sí mismo un observable (la energía). Por tanto, la dinámica cuántica es un **automorfismo interno** del álgebra.

2.3. HACIA UN MODELO HÍBRIDO UNIFICADO

Con ambos sistemas formulados en el lenguaje de operadores sobre espacios de Hilbert, podemos proceder a construir un marco unificado para describir su interacción.

2.3.1. El Álgebra Híbrida y la Condición de Automorfismo

Definición 2.9 (El Álgebra Híbrida):

El espacio de Hilbert para un sistema híbrido es el producto tensorial de los espacios clásico y cuántico, $\mathcal{H}_H = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$. Consecuentemente, el álgebra de observables híbridos, $\mathcal{A}_H$, es el C^* -producto tensorial de las álgebras de observables constituyentes:

$$\mathcal{A}_H = \mathcal{A}_C \otimes \mathcal{A}_Q.$$

Un elemento de $\mathcal{A}_H$ es una combinación lineal de operadores separables de la forma $\hat{A}_C \otimes \hat{B}_Q$.

Para que la dinámica sea físicamente consistente, la evolución temporal debe preservar la estructura de esta álgebra.

Definición 2.10 (La Condición de Automorfismo):

La evolución temporal generada por un Hamiltoniano híbrido $\hat{H}_H$ es consistente si y solo si es un automorfismo de $\mathcal{A}_H$. Infinitesimalmente, esto significa que el álgebra de observables híbridos debe ser cerrada bajo la conmutación con el Hamiltoniano:

$$\forall \hat{A} \in \mathcal{A}_H, \quad [\hat{H}_H, \hat{A}] \in \mathcal{A}_H.$$

Esta condición impone restricciones severas sobre la forma del Hamiltoniano $\hat{H}_H$, particularmente sobre su término de interacción. Como se ha demostrado en [3], para que una evolución unitaria preserve el álgebra, el generador de la dinámica clásica debe ser, a lo sumo, lineal en los operadores de momento generalizados del formalismo KvN.

2.3.2. El Modelo Dinámico Operacional (ODM) y el parámetro

κ

El formalismo ODM [2] ofrece un método sistemático para construir un Hamiltoniano híbrido consistente. Introduce un parámetro de deformación adimensional, $\kappa \in [0, 1]$, que interpola continuamente entre el álgebra clásica y la cuántica.

Definición 2.11 (Álgebra Unificada):

Se postula un álgebra unificada donde los operadores de posición y momento, que actúan sobre el espacio de Hilbert cuántico, satisfacen una relación de conmutación deformada:

$$[\hat{x}_q, \hat{p}_q] = i\hbar\kappa. \quad (2.6)$$

En el límite $\kappa \rightarrow 0$, se recupera el álgebra conmutativa clásica, mientras que para $\kappa \rightarrow 1$, se obtiene el álgebra de Heisenberg estándar.

Para entender la necesidad y la estructura de este modelo, es fundamental recordar una sutileza del formalismo KvN. Como se vio en la Sección 2.1.2, el generador de la dinámica clásica, el Liouvilliano $\hat{L}$, no pertenece al álgebra conmutativa de observables $\mathcal{A}_C$ (formada por operadores multiplicativos como $\hat{q}$ y $\hat{p}$), sino que actúa sobre ella como un operador diferencial. Es decir, la dinámica es un **automorfismo externo**.

El formalismo ODM resuelve este problema de una manera elegante. En lugar de definir la dinámica con un generador externo, postula un álgebra de operadores más grande y no conmutativa que contiene a su propio generador de la dinámica. La clave no es trabajar en un espacio de dimensión directamente más grande, sino en un espacio de la misma dimensión ($2N$ para el sector clásico) pero cuyos operadores se definen a partir de un marco conceptual más amplio de $4N$ operadores.

Definición 2.12 (Álgebra Extendida Clásica):

Para el subsistema clásico, se introduce un conjunto de cuatro operadores fundamentales: los observables de posición y momento, $\hat{x}$ y $\hat{p}$, y sus momentos conjugados en el sentido de la transformación de Koopman-von Neumann, $\hat{\lambda}_x$ y $\hat{\lambda}_p$. Estos últimos representan a los generadores de traslaciones en el espacio de fases. Juntos, forman el álgebra clásica fundamental con las siguientes relaciones de conmutación no nulas:

$$[\hat{x}, \hat{\lambda}_x] = i, \quad [\hat{p}, \hat{\lambda}_p] = i. \quad (2.7)$$

La dinámica es generada por un Hamiltoniano efectivo, $\hat{H}_{\text{eff}}(\kappa)$, que se construye para satisfacer los teoremas de Ehrenfest para todo valor de κ . Este Hamiltoniano es, en general, una función de los cuatro operadores clásicos y de los operadores cuánticos.

PROPOSICIÓN 2.13 (La Función de Isomorfismo F). La conexión entre el álgebra cuántica (con operadores $\hat{x}_q, \hat{p}_q$) y el álgebra clásica extendida (con $\hat{x}, \hat{p}, \hat{\lambda}_x, \hat{\lambda}_p$) no es única. Se puede establecer un isomorfismo que mapea una a la otra. Una elección particularmente útil, propuesta en [2], son los **operadores mixtos**:

$$\hat{x}_q = \hat{x} - \frac{\hbar\kappa}{2}\hat{\lambda}_p, \quad (2.8)$$

$$\hat{p}_q = \hat{p} + \frac{\hbar\kappa}{2}\hat{\lambda}_x. \quad (2.9)$$

Sin embargo, el generador de la dinámica $\hat{H}_{\text{eff}}(\kappa)$ contiene un término adicional, una función arbitraria F , que no afecta a la evolución de los valores esperados de $\hat{x}_q$ y $\hat{p}_q$ pero es necesaria para asegurar que la dinámica sea consistente y que el límite clásico $\kappa \rightarrow 0$ recupere correctamente la ecuación de Liouville. Esta función F es, por construcción, físicamente no medible a través de los observables estándar, pero su presencia es un requisito formal para garantizar la continuidad y el isomorfismo entre las álgebras en los distintos regímenes dinámicos. Para un análisis detallado, véase [2].

2.3.3. La Conexión con el Espacio de Fases de Wigner

El parámetro κ adquiere una profunda interpretación física en el contexto de la mecánica cuántica en el espacio de fases [4]. La evolución de la función de cuasi-probabilidad de Wigner, $W(q, p)$, viene dictada por el corchete de Moyal, $\{\{\cdot, \cdot\}\}_M$.

PROPOSICIÓN 2.14 (Equivalencia de Límites). El formalismo ODM con el parámetro κ es formalmente equivalente a la dinámica en el espacio de fases de Wigner, donde κ juega un papel análogo a la constante de Planck.

- Para $\kappa = 1$, la dinámica del modelo unificado se corresponde con la ecuación de evolución completa de Wigner-Moyal.
- Para $\kappa = 0$, el corchete de Moyal se reduce al corchete de Poisson, y la ecuación de evolución se convierte en la ecuación de Liouville clásica.

De este modo, el formalismo ODM no solo unifica la cinemática, sino también la dinámica, proporcionando un puente continuo entre los dos mundos. Para la visualización de los estados en este espacio de fases, la **representación de Husimi**, al ser estrictamente positiva, resulta especialmente útil como una densidad de probabilidad suavizada.

Respecto a la distribución de Wigner en sí misma y su conexión con el formalismo ODM, se puede encontrar una descripción ligeramente más detallada en A.

2.3.4. Aplicación del formalismo ODM a la dinámica híbrida

En el contexto de los sistemas híbridos, el Hamiltoniano efectivo $\hat{H}_{\text{eff}}(\kappa)$ opera sobre el espacio de Hilbert conjunto $\mathcal{H}_H = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_Q$. Sin acoplo, el generador se separa, $\hat{H}_{\text{eff}}(\kappa) = \hat{L}_h(\kappa) \otimes \mathbb{1}_Q + \mathbb{1}_C \otimes \hat{H}_Q$, y como se validará numéricamente (véase específicamente las Figuras B.7 y B.8 en el Anexo B.1), si el potencial es armónico, $\hat{L}_h(\kappa)$ se reduce al Liouvilliano clásico independientemente de κ .

Es la introducción de un término de acoplo, $\hat{H}_{CQ}(\kappa)$, lo que da vida al sistema híbrido. Este término dicta cómo se transfiere la “cuanticidad” entre los subsistemas, permitiendo que el sistema se comporte de forma clásica en el límite $\kappa \rightarrow 0$ y de forma puramente cuántica en el límite $\kappa = 1$.

Capítulo 3

Simulación Numérica y Análisis del Modelo Híbrido

El propósito de este capítulo es trasladar dicho marco abstracto a un escenario computacional concreto, permitiendo así la validación de sus predicciones, el análisis de sus propiedades y la exploración de los fenómenos físicos que emergen de la interacción clásico-cuántica.

Para lograrlo, se implementará y simulará numéricamente un sistema modelo compuesto por un oscilador armónico mixto acoplado a un oscilador armónico cuántico. Esta elección, aunque simplificada, es lo suficientemente rica para investigar conceptos cruciales como el *back-reaction*, la naturaleza del límite clásico ($\kappa \rightarrow 0$) y la dinámica del entrelazamiento entre los subsistemas.

3.1. METODOLOGÍA DE LA SIMULACIÓN

3.1.1. El modelo físico: Osciladores armónicos acoplados

El sistema bajo estudio consiste en un oscilador armónico mixto unidimensional acoplado a un oscilador armónico cuántico unidimensional. El Hamiltoniano total del sistema híbrido se descompone en tres partes:

$$\hat{H}_{\text{eff}}(\kappa) = \hat{L}_h(\kappa) \otimes \hat{\mathbb{1}}_Q + \hat{\mathbb{1}}_C \otimes \hat{H}_Q + \hat{H}_{CQ}(\kappa), \quad (3.1)$$

donde $\hat{L}_h(\kappa)$ es el generador de la dinámica del subsistema mixto (el Liouvilliano generalizado), $\hat{H}_Q$ es el Hamiltoniano del oscilador cuántico y $\hat{H}_{CQ}(\kappa)$ describe la interacción entre ambos. El código desarrollado es flexible, permitiendo el uso de un potencial armónico estándar $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ o la inclusión de un término anarmónico de tipo cuártico, como se explorará en la Sección 3.3.

3.1.2. Implementación Computacional y Estado Inicial

El formalismo de Koopman representa al oscilador clásico en un espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^2)$ de dimensión infinita. Para la simulación, se trunca este espacio utilizando una base de Fock con $(N_{max,h} + 1)$ niveles para cada grado de libertad (posición y momento), resultando en un espacio clásico de dimensión $(N_{max,h} + 1)^2$. De manera análoga, el subsistema cuántico se describe en una base de Fock de $(N_{max,q} + 1)$ niveles. Para las simulaciones presentadas, se han utilizado típicamente $N_{max,h} = 8$ y $N_{max,q} = 8$.

Los operadores se construyen matricialmente en esta base. El generador de la dinámica unificada, $\hat{L}_h(\kappa)$, y el término de acoplo, $\hat{H}_{CQ}$, se implementan en las funciones `L_h_generator` y `create_unified_coupling_term`, respectivamente. Esta última función permite explorar diversos tipos de interacción, como $\hat{X}_{mix} \otimes \hat{X}_Q$, $\hat{P}_{mix} \otimes \hat{P}_Q$ o incluso términos de interacción cruzados o de orden superior al lineal.

El estado inicial del sistema, a menos que se indique lo contrario, se ha escogido de forma deliberada para no ser trivial. El subsistema clásico se inicia en una superposición de dos estados coherentes¹, localizado en dos regiones separadas del espacio de fases, mientras que el subsistema cuántico se prepara en un estado con una distribución de probabilidad Gaussiana sobre la base de Fock, centrado en el nivel $n = 2$. Este estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |\psi_C(0)\rangle \otimes |\psi_Q(0)\rangle$ es separable.

3.1.3. Visualización de la Trayectoria Dinámica

Para traducir los resultados abstractos de la evolución del vector de estado a una interpretación física intuitiva, es esencial emplear técnicas de visualización adecuadas. El estado de cada subsistema se caracteriza por su matriz densidad reducida, a partir de la cual se calculan tanto las distribuciones de probabilidad en la base de Fock como reconstrucciones en los espacios de fases (función de Husimi) y de posiciones.

Representación en la Base de Fock

El estado de cada subsistema en cualquier instante puede ser caracterizado por su distribución de probabilidad sobre sus respectivos estados base de Fock. Esto se visualiza como histogramas que muestran la probabilidad de ocupación de cada autoestado del operador número ($|n_x, n_p\rangle$ para el clásico, $|n_q\rangle$ para el cuántico), permitiendo un análisis directo de la transferencia de poblaciones inducida por el acoplo. La Figura 3.1 muestra una instantánea de esta representación, comparando el caso desacoplado con el caso acoplado, donde la redistribución de probabilidades en este último evidencia el efecto de la interacción.

¹En concreto, la versión truncada de un estado coherente, pues los estados coherentes tienen contribuciones de todos los autoestados del operador número $|n\rangle$.

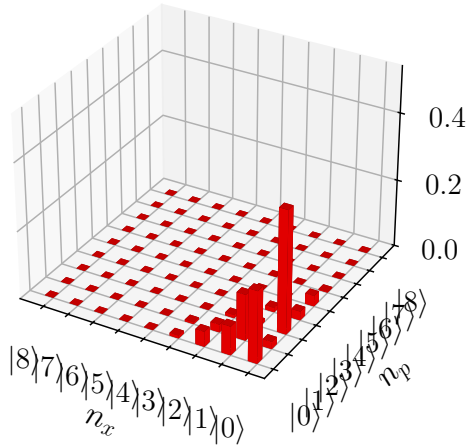
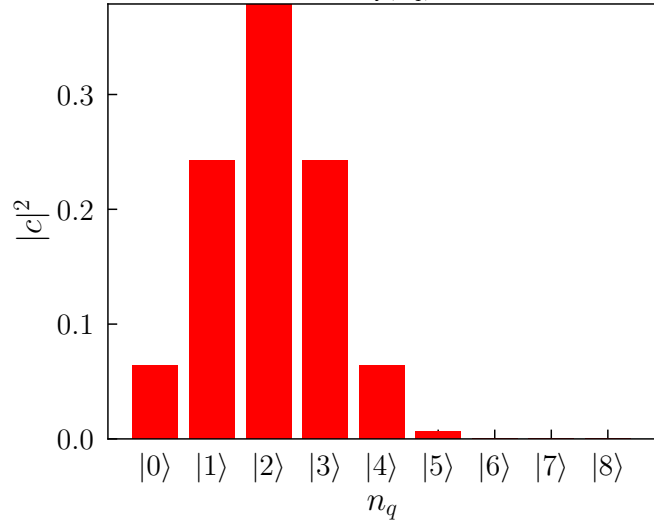
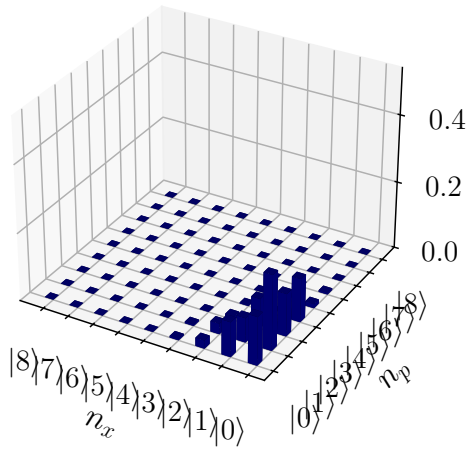
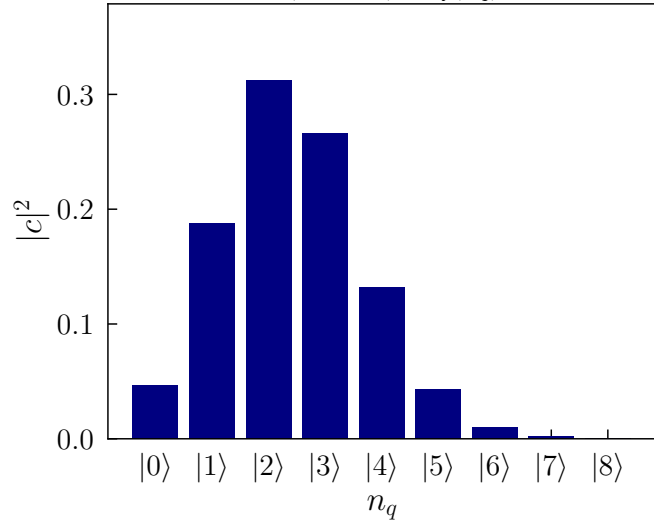
Densidades de Probabilidad Marginales Híbridas a $t = 5.82s$ Sin Acoplo: $\rho_C(n_x, n_p)$ a $t = 5.82$ Sin Acoplo: $\rho_Q(n_q)$ a $t = 5.82$ Con Acoplo ($\varepsilon = 0.1$): $\rho_C(n_x, n_p)$ a $t = 5.82$ Con Acoplo ($\varepsilon = 0.1$): $\rho_Q(n_q)$ a $t = 5.82$ 

Figura 3.1: Distribuciones de probabilidad marginales en la base de Fock en $t = 5.82$. Izquierda: Probabilidad conjunta $P(n_x, n_p)$ para el subsistema clásico. Derecha: Probabilidad $P(n_q)$ para el subsistema cuántico. Se compara el caso sin acoplo (arriba) con el caso acoplado (abajo).

Representación en el Espacio de Fases: La Función de Husimi

Aunque la base de Fock es completa, no ofrece una intuición directa sobre la localización en el espacio de fases. Para ello, se reconstruye la **función de cuasi-probabilidad de Husimi** Q , $Q(q, p; t)$ [7]. Esta función se define como la proyección² del estado (la matriz densidad reducida $\rho_C(t)$) sobre una base de estados coherentes $|\alpha(q, p)\rangle$.

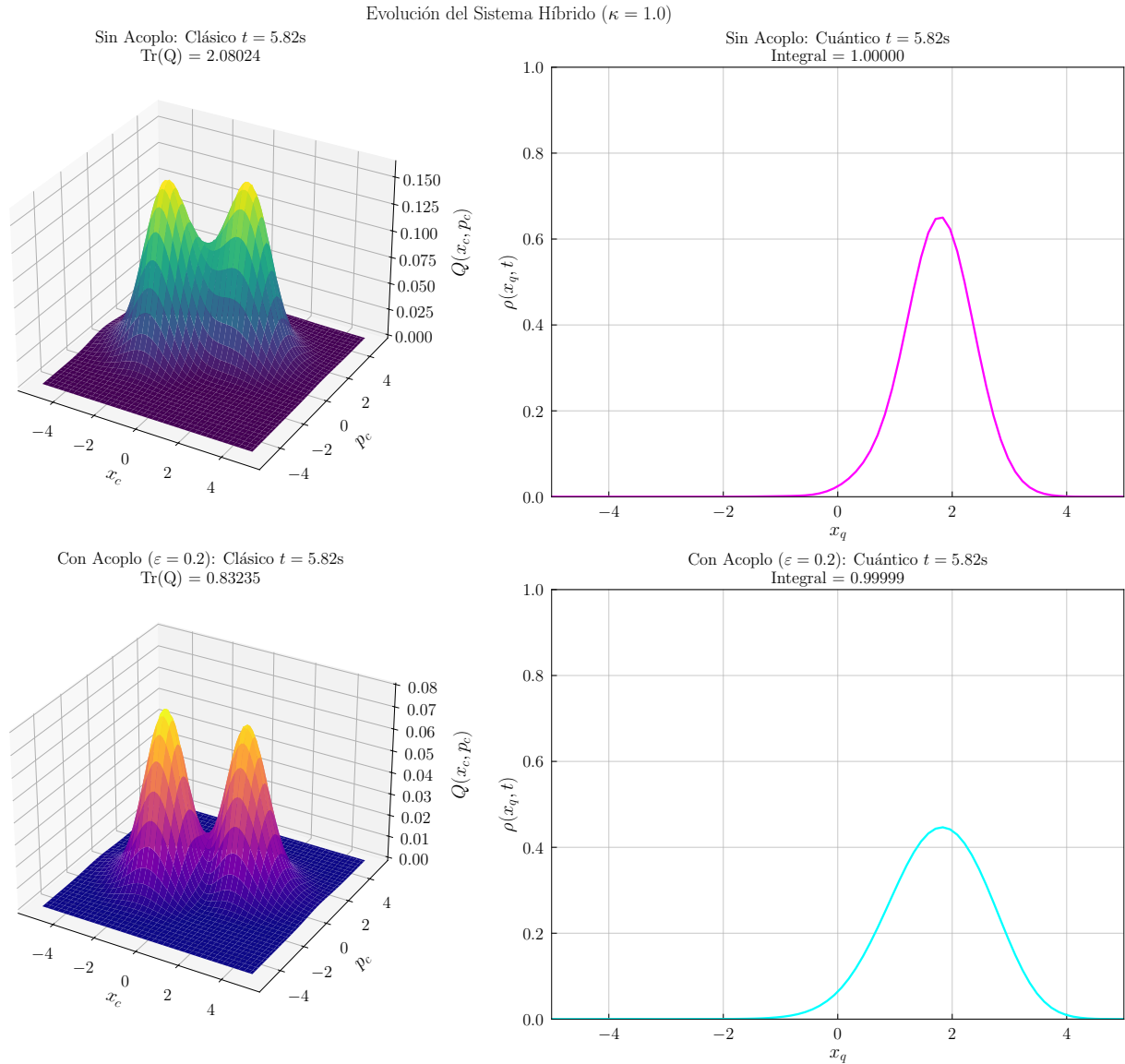


Figura 3.2: Representaciones del estado en $t = 5.82$. Izquierda: Función de Husimi $Q(q, p)$ del subsistema clásico. Derecha: Densidad de probabilidad $\rho_Q(x)$ del subsistema cuántico.

A diferencia de la función de Wigner, la función de Husimi es siempre no negativa, por lo que puede interpretarse como una densidad de probabilidad suavizada en el espacio de fases, representando la probabilidad de encontrar el sistema en un “paquete de onda” localizado en torno al punto (q, p) .

² $Q(q, p; t) = \frac{1}{\pi} \langle \alpha(q, p) | \rho_C(t) | \alpha(q, p) \rangle$.

3.2. VALIDACIÓN Y ANÁLISIS DE LA SIMULACIÓN

3.2.1. Evolución de Observables y Efectos del Acoplo

En las Figuras 3.3, 3.4 y 3.5 se representa la evolución de las posiciones y momentos esperados. La dinámica bajo acoplo se establece en patrones oscilatorios complejos pero ordenados. Se observa que a medida que κ disminuye (el sistema se vuelve más clásico), las trayectorias se asemejan más a las del caso desacoplado. El tipo de acoplo tiene un impacto drástico: un acoplo $\hat{X}_{\text{mix}} \otimes \hat{X}_Q$ induce amortiguamiento en el subsistema cuántico y un cambio de fase en los operadores mixtos, mientras que un acoplo $\hat{X}_{\text{mix}} \otimes \hat{P}_Q$ genera un complejo intercambio de energía y altera el periodo de las oscilaciones de todo el sistema, evidenciando la formación de nuevos modos normales híbridos.

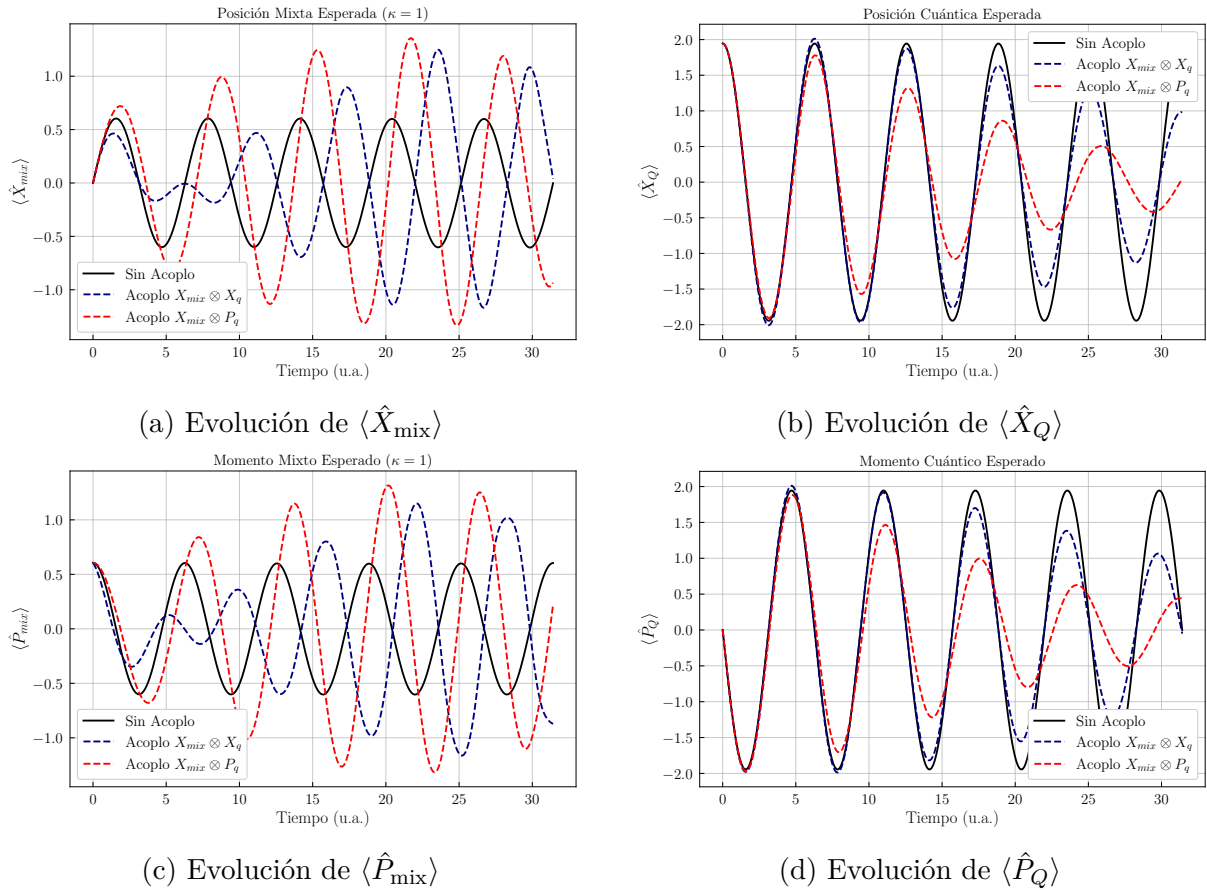


Figura 3.3: Evolución de los valores esperados de los observables para diferentes tipos de acoplo en el régimen puramente cuántico ($\kappa = 1.0$).

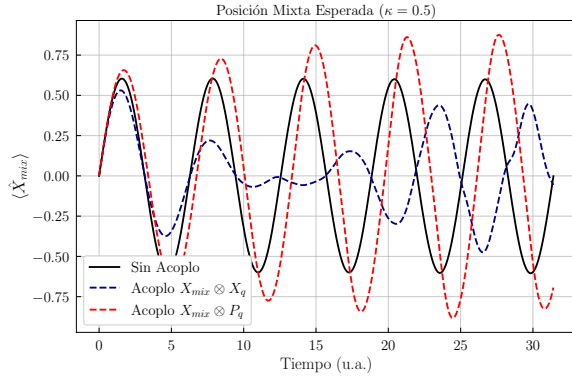
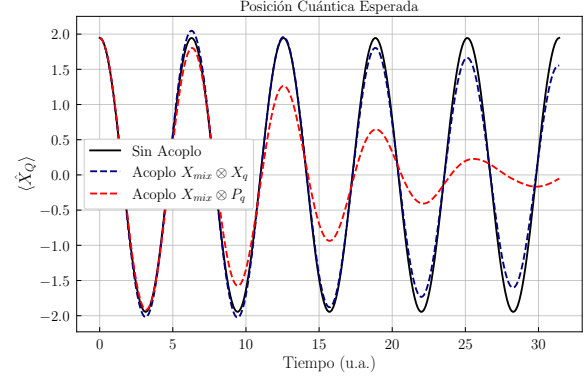
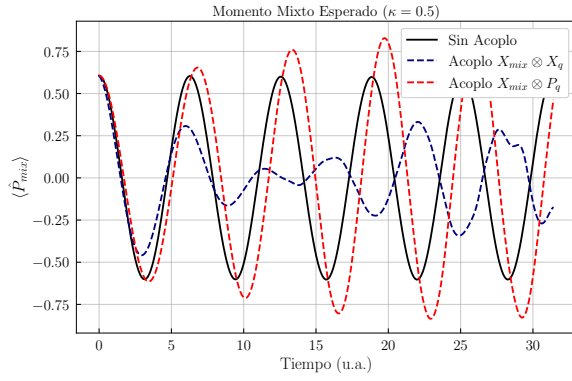
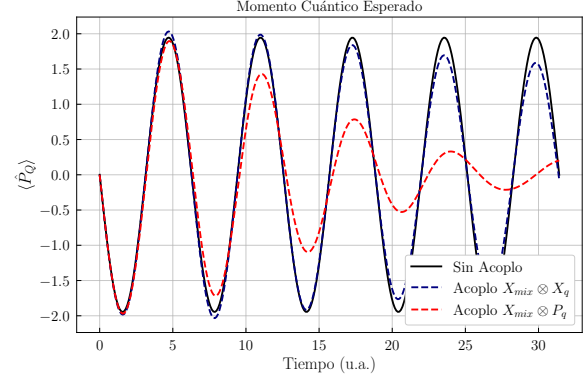
(a) Evolución de $\langle \hat{X}_{\text{mix}} \rangle$ (b) Evolución de $\langle \hat{X}_Q \rangle$ (c) Evolución de $\langle \hat{P}_{\text{mix}} \rangle$ (d) Evolución de $\langle \hat{P}_Q \rangle$

Figura 3.4: Evolución de los valores esperados de los observables para diferentes tipos de acoplo en un régimen híbrido intermedio ($\kappa = 0.5$). La comparación de las curvas sigue el mismo código de colores que en la Figura 3.3.

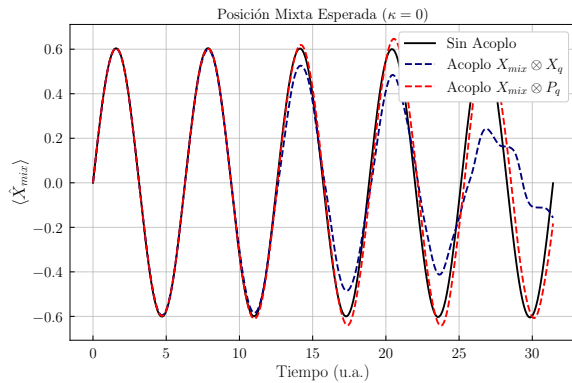
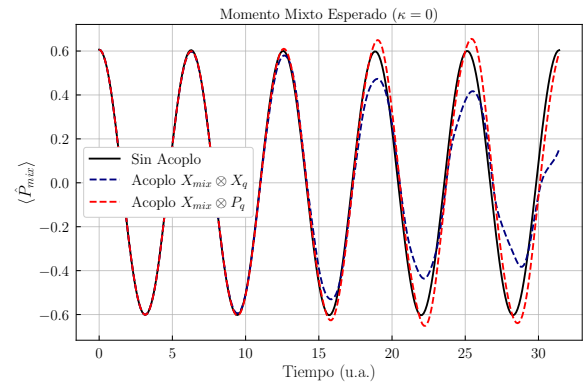
(a) Evolución de $\langle \hat{X}_{\text{mix}} \rangle$ (b) Evolución de $\langle \hat{P}_{\text{mix}} \rangle$

Figura 3.5: Evolución de los valores esperados de los observables para diferentes tipos de acoplo en un régimen puramente clásico ($\kappa = 0$). La comparación de las curvas sigue el mismo código de colores que en la Figura 3.3.

3.2.2. Análisis Paramétrico con κ : Transición Clásico-Cuántica

El parámetro κ controla la transición entre los regímenes. La Figura 3.6 muestra la evolución de diversos observables como superficies sobre el plano (κ, t) , proporcionando una visión global de la dinámica. El acoplo utilizado es de tipo $\hat{X}_{\text{mix}} \otimes \hat{X}_Q$.

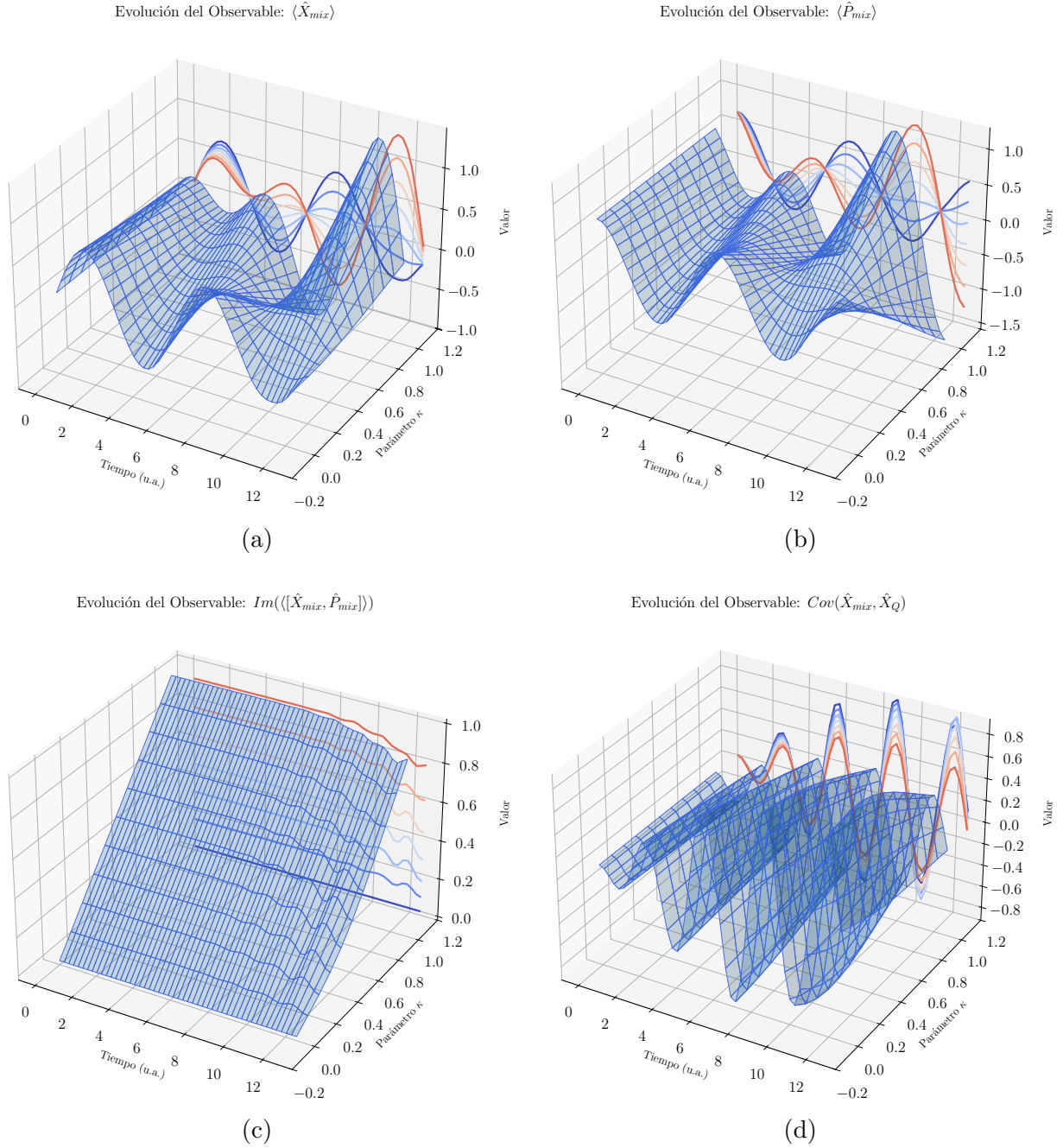


Figura 3.6: Superficies de evolución de los valores esperados para (a) la posición mixta, (b) el momento mixto, (c) el conmutador imaginario y (d) la covarianza. Estas superficies ilustran la transición suave de la dinámica al variar κ .

El Conmutador Mixto y la Covarianza Híbrida

Dos observables emergen como sondas particularmente reveladoras de la naturaleza del sistema híbrido: el conmutador mixto y la covarianza.

El conmutador, cuyo valor esperado teórico es $\text{Im}(\langle [\hat{X}_{\text{mix}}, \hat{P}_{\text{mix}}] \rangle) = \hbar\kappa$, sirve como un test de consistencia interna del formalismo (Figura 3.6c). Numéricamente, se observa que su valor promedio escala linealmente con κ , como se espera. Las desviaciones sistemáticas a tiempos largos y para κ grandes delatan los límites de validez de la simulación impuestos por el truncamiento de la base, un punto discutido en la Sección 3.2.

La covarianza, definida como $\text{Cov}(\hat{X}_{\text{mix}}, \hat{X}_Q) = \langle \hat{X}_{\text{mix}} \otimes \hat{X}_Q \rangle - \langle \hat{X}_{\text{mix}} \rangle \langle \hat{X}_Q \rangle$, cuantifica la correlación estadística entre los subsistemas. El análisis de su evolución (Figura 3.6d) revela un resultado fundamental y anti-intuitivo: la correlación es **máxima en el régimen cuasi-clásico** ($\kappa \rightarrow 0$) y disminuye a medida que el sistema se vuelve más cuántico.

Efectos sobre el Subsistema Cuántico. Es natural preguntarse cómo esta compleja interacción afecta recíprocamente al subsistema cuántico. Aunque el foco de este trabajo está en la influencia sobre el sector clásico (*back-reaction*), es instructivo observar la dinámica de los observables puramente cuánticos, como $\langle \hat{X}_Q \rangle$. Como cabría esperar, su comportamiento no se desvía drásticamente de la evolución de un oscilador cuántico estándar. El acoplo introduce principalmente efectos de amortiguamiento y pequeños desplazamientos de fase, consistentes con un sistema cuántico que interactúa débilmente con un entorno (en este caso, el subsistema clásico). La fenomenología no presenta sorpresas cualitativas, razón por la cual no se ha incluido en las figuras principales del capítulo para centrar la discusión en los aspectos más novedosos del formalismo. Para una visualización detallada de la evolución de los observables cuánticos bajo diferentes acoplos, véanse las Figuras B.2, B.4 y B.3 en el Apéndice B.1.

3.2.3. Cuantificación del Entrelazamiento y la Naturaleza del Estado Híbrido

El entrelazamiento es la firma de la correlación puramente cuántica, una propiedad sin análogo clásico. Se cuantifica a través de la pureza de los estados reducidos, $\mathcal{P} = \text{Tr}(\rho^2)$, donde ρ es la matriz densidad de un subsistema. Un sistema está entrelazado si la pureza de cualquiera de sus subsistemas es estrictamente menor que 1.

Las simulaciones (Figura 3.7) demuestran de forma inequívoca que para cualquier $\kappa \geq 0$ y un acoplo no nulo, un estado inicialmente separable evoluciona inevitablemente hacia un estado entrelazado. El entrelazamiento se establece rápidamente tras el inicio de la interacción y se estabiliza, indicando un equilibrio dinámico entre los subsistemas.

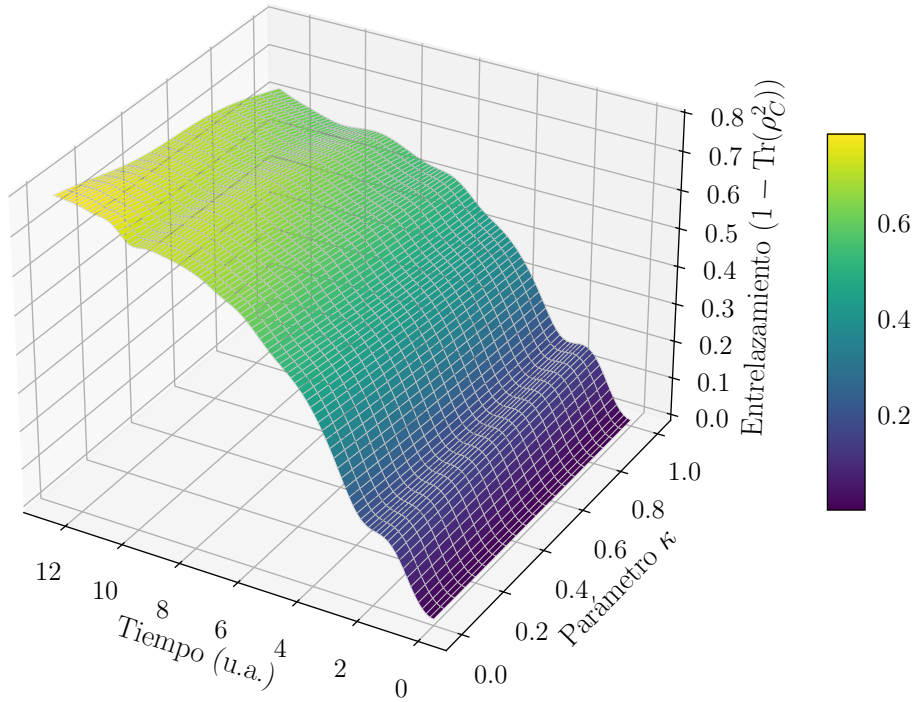
Evolución del Entrelazamiento Clásico-Cuántico ($\varepsilon = 0.25$)

Figura 3.7: Evolución del entrelazamiento ($1 - \text{Tr}(\rho_C^2)$) en función del tiempo y κ . El entrelazamiento aparece para cualquier $\kappa > 0$ con acoplo, pero su magnitud no escala de forma pronunciada con κ .

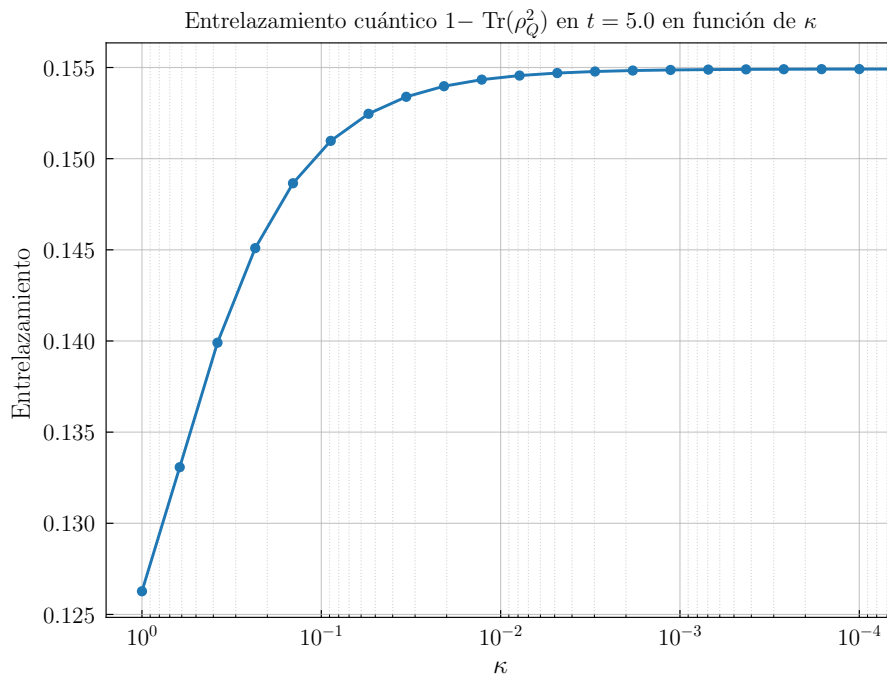


Figura 3.8: Entrelazamiento del subsistema cuántico en $t = 5.0$ en función de κ . Muestra que el efecto de κ sobre el entrelazamiento se satura para valores pequeños.

Una Observación sobre la Magnitud del Entrelazamiento

Al observar la Figura 3.8, surge una conclusión importante sobre el comportamiento del entrelazamiento en el formalismo ODM. Aunque el entrelazamiento se satura rápidamente para valores pequeños de κ , la gráfica muestra que la magnitud de la correlación cuántica no varía de forma drástica en el rango $\kappa \in [0, 1]$. Es decir, el estado final no es significativamente “más entrelazado” en el régimen puramente cuántico ($\kappa = 1$) que en el régimen cuasi-clásico (e.g., $\kappa \approx 0.1$).

Este hallazgo es fundamental para validar la utilidad del modelo híbrido. Demuestra que el mecanismo de acoplo es capaz de generar correlaciones dinámicas significativas y cualitativamente similares a las del caso puramente cuántico, incluso cuando la estructura algebraica de los operadores (controlada por κ) es casi clásica. La consiguiente necesidad de describir los subsistemas mediante matrices densidad es una característica inherente a la dinámica híbrida acoplada en casi todo el espectro de la transición, y no un fenómeno exclusivo del límite puramente cuántico. Refuerza la idea de que cualquier modelo híbrido que pretenda ser físicamente realista debe, por construcción, ser capaz de describir estados mixtos y entrelazados.

En otras palabras, no es necesario un sistema completamente cuántico para observar la emergencia de un fuerte entrelazamiento. El modelo híbrido, para cualquier $\kappa > 0$, captura de manera efectiva el fenómeno clave de la correlación dinámica entre los subsistemas. Esto es precisamente lo que se busca en una descripción física de sistemas híbridos: un modelo que, aunque computacionalmente más simple que una descripción cuántica completa, sea capaz de reproducir las características físicas esenciales de la interacción, como la generación de entrelazamiento. Por lo tanto, se puede afirmar que el formalismo ODM proporciona un marco robusto para estudiar estas correlaciones en la frontera clásico-cuántica.

3.3. EXTENSIÓN AL POTENCIAL ANARMÓNICO (CUÁRTICO)

Para explorar la robustez y generalidad de los fenómenos observados, se ha extendido el análisis a un sistema donde el subsistema clásico está sujeto a un potencial anarmónico de tipo cuártico: $U(x_c) = \frac{1}{2}m\omega^2x_c^2 + c_4x_c^4$. La introducción de este término no lineal ($c_4 \neq 0$) tiene profundas consecuencias en la dinámica clásica subyacente, proporcionando un caso de estudio donde el comportamiento clásico y el cuántico (que sigue siendo armónico) son cualitativamente diferentes.

3.3.1. Distorsión de la Dinámica en el Espacio de Fases

A diferencia del oscilador armónico, cuyas trayectorias en el espacio de fases son elipses cerradas, el potencial cuártico genera trayectorias más complejas y deformadas. Esto implica

que un paquete de ondas clásico ya no experimentará una simple rotación periódica, sino que sufrirá efectos de cizallamiento (*shearing*) y filamentación, distorsionando su forma a medida que evoluciona. La Figura 3.9 ilustra de forma contundente esta diferencia: mientras que el estado del oscilador armónico simplemente rota, el estado del oscilador anarmónico se deforma y extiende, perdiendo su estructura inicial de doble pico.

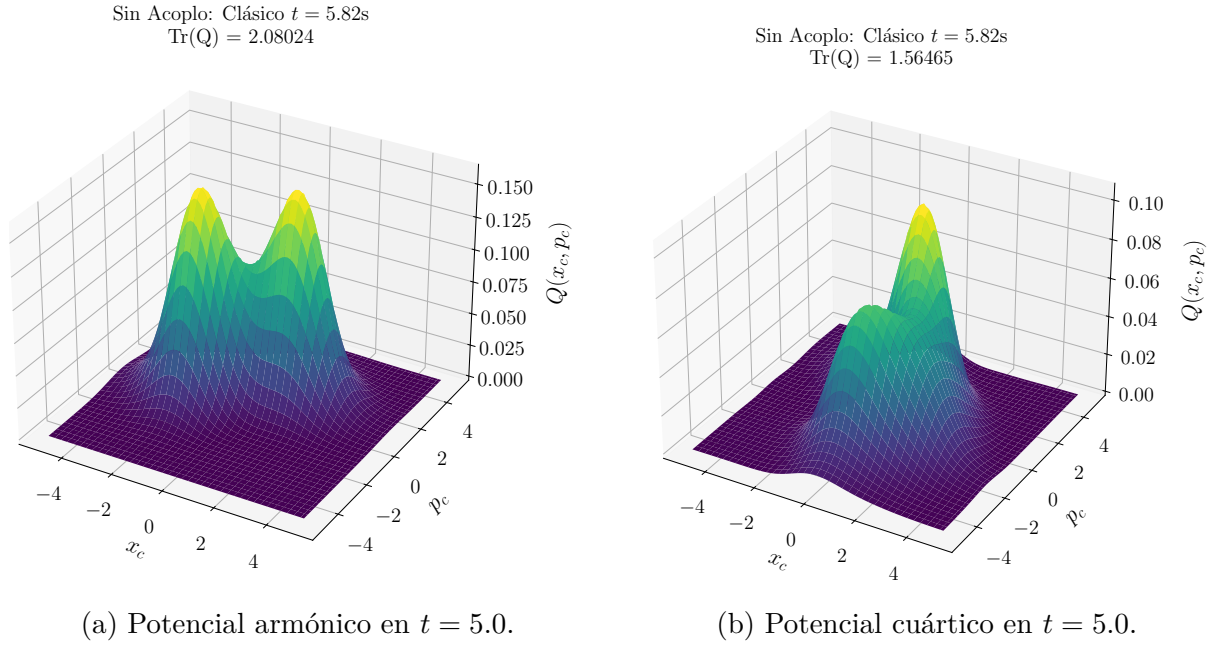


Figura 3.9: Comparación de la evolución de la función de Husimi clásica para un potencial armónico (a) y uno cuártico (b). La anarmonicidad introduce una notable distorsión en la distribución de probabilidad en el espacio de fases.

3.3.2. Persistencia de la Fenomenología Híbrida

A pesar de esta dinámica clásica más compleja, los fenómenos híbridos fundamentales persisten. La retro-reacción, la dependencia de κ y la generación de entrelazamiento siguen presentes.

Evolución de Observables. La Figura 3.10 muestra cómo la evolución del observable mixto $\langle \hat{X}_{\text{mix}} \rangle$ pierde su periodicidad simple, exhibiendo un comportamiento aperiódico y complejo. Sin embargo, y esto es lo más relevante, la diferencia entre la trayectoria desacoplada (negro) y la acoplada (rojo y azul) sigue siendo cualitativamente similar a la del caso armónico: el acoplo introduce una desviación significativa e inmediata en la trayectoria del subsistema clásico. Esto sugiere que los mecanismos de transferencia de información y correlación mediados por el formalismo ODM son una característica estructural del modelo, robusta frente a los detalles específicos del potencial clásico.

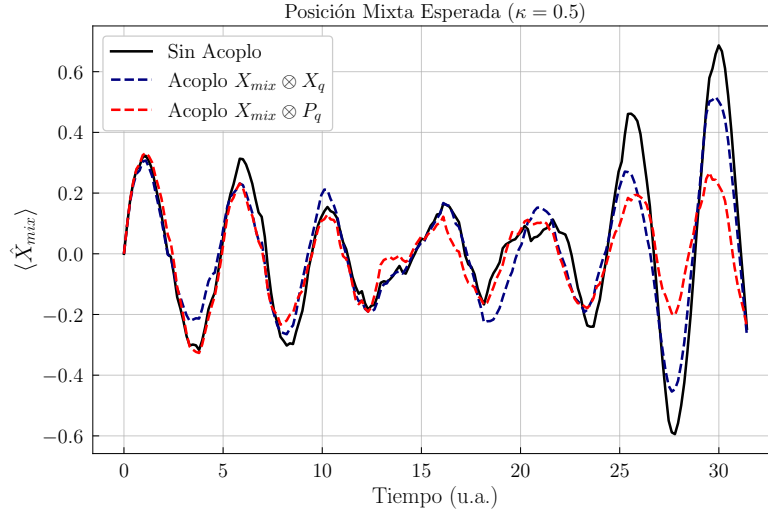


Figura 3.10: Evolución del valor esperado de la posición mixta $\langle \hat{X}_{mix} \rangle$ para un sistema con potencial cuártico ($\kappa = 0.5$). A pesar de la pérdida de periodicidad simple, el efecto del acoplo (divergencia entre la curva con y sin interacción) persiste.

Entrelazamiento y Variación con κ . De forma análoga al caso armónico, el sistema con potencial cuártico también exhibe generación de entrelazamiento para cualquier $\kappa > 0$. La Figura 3.11 muestra el entrelazamiento del subsistema cuántico en un tiempo fijo en función de κ . Nuevamente, se observa el mismo comportamiento cualitativo: el entrelazamiento se activa bruscamente para valores pequeños de κ y luego se satura. Este resultado refuerza la conclusión de que la fenomenología del entrelazamiento en este modelo es una característica general y no una particularidad del potencial armónico.

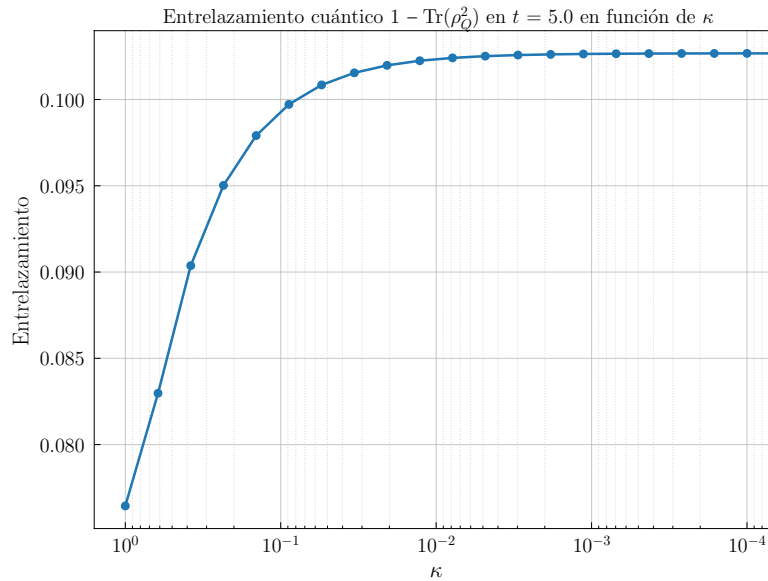


Figura 3.11: Entrelazamiento del subsistema cuántico en $t = 5.0$ en función de κ para un sistema con potencial clásico anarmónico. El comportamiento cualitativo de la saturación del entrelazamiento persiste.

Capítulo 4

Conclusiones y Trabajo Futuro

A lo largo de este trabajo se ha explorado el formalismo de Koopman y su generalización mediante el modelado dinámico operacional (ODM) como un marco teórico y computacional para la descripción de sistemas híbridos clásico-cuánticos. Partiendo de una base teórica que representa la mecánica clásica en un espacio de Hilbert, se ha implementado numéricamente un modelo de osciladores acoplados para validar las predicciones del formalismo, analizar su comportamiento en los límites clásico y cuántico y, fundamentalmente, investigar la naturaleza de la interacción híbrida y el entrelazamiento.

Las simulaciones han confirmado la robustez y consistencia del modelo, pero también han revelado una serie de fenómenos complejos y, en ocasiones, anti-intuitivos, que desafían las nociones preconcebidas sobre la transición clásico-cuántica. Este capítulo sintetiza los resultados clave obtenidos, discute las limitaciones inherentes al enfoque y propone líneas de investigación futuras que surgen naturalmente de este estudio.

4.1. SÍNTESIS DE LOS RESULTADOS CLAVE

Los hallazgos más significativos de este trabajo se pueden resumir en los siguientes puntos:

- **Validación y Consistencia del Modelo Unificado:** Se ha verificado numéricamente que el formalismo ODM interpola de manera suave y consistente entre la mecánica clásica y la cuántica. En ausencia de acoplo, la dinámica del sistema es independiente del parámetro κ , como exige la teoría (Figuras B.7 y B.8). En el límite $\kappa \rightarrow 0$, el modelo reproduce correctamente la dinámica de Koopman-von Neumann (KvN), mientras que para $\kappa = 1$ describe un sistema completamente cuántico, demostrando la validez de la implementación.
- **Naturaleza Dual de la Retro-reacción:** Se ha clarificado la naturaleza de la retro-reacción (*back-reaction*). En el límite puramente clásico de KvN ($\kappa = 0$), se

ha demostrado numéricamente que la aparente influencia del subsistema cuántico sobre el clásico es un artefacto debido al truncamiento de la base de Hilbert, y que su magnitud tiende a cero al aumentar el tamaño de la base (Figura B.9). Sin embargo, para cualquier $\kappa > 0$, emerge una **retro-reacción física genuina**, cuya fenomenología (amortiguamiento, cambios de fase, alteración de frecuencias) depende críticamente tanto de la forma del acoplo como del valor de κ .

- **La Covarianza como Sonda de la Interacción Híbrida:** El resultado más sorprendente de este trabajo es la dependencia de la covarianza entre los subsistemas con el parámetro κ . Contrariamente a la intuición, la correlación estadística, medida como $\text{Cov}(\hat{X}_{\text{mix}}, \hat{X}_Q)$, es **máxima en el régimen cuasi-clásico** ($\kappa \rightarrow 0$) y disminuye a medida que el sistema se vuelve más cuántico.
- **El Estado Híbrido como Estado Entrelazado:** Se ha demostrado que, para cualquier $\kappa > 0$ y un acoplo no nulo, un estado inicialmente separable evoluciona inevitablemente hacia un estado entrelazado. Esto se manifiesta en una pureza de los subsistemas reducidos menor que la unidad. Este hallazgo refuerza la conclusión de que una descripción dinámica coherente de sistemas híbridos no puede, en general, mantener la separabilidad del estado. Por tanto, es imperativo un tratamiento en términos de **matrices densidad** para describir el estado de los subsistemas, ya que la imagen de estados puros individuales para cada parte del sistema deja de ser válida en cuanto la interacción actúa.

4.2. LIMITACIONES Y PERSPECTIVAS

Pese a los resultados obtenidos, el enfoque presenta limitaciones que abren nuevas preguntas.

- **Impacto del Truncamiento del Espacio de Hilbert:** La limitación más significativa es el truncamiento de la base clásica. Como se ha evidenciado en el análisis del conmutador mixto, este truncamiento introduce artefactos y limita el tiempo de validez de las simulaciones, un problema que se agrava con acoplos no lineales.
- **Caracterización del Espacio de Estados Clásicos:** Se ha observado que diferentes configuraciones del estado cuántico inicial pueden llevar a evoluciones distintas de la matriz densidad clásica, aunque los valores esperados de los observables clásicos no reflejen esta diferencia. Esto sugiere que el espacio de los “estados físicos” clásicos es un subconjunto o un espacio cociente del espacio de las matrices densidad. Una caracterización matemática más precisa de este espacio es necesaria para una interpretación inequívoca de resultados como la pureza y la entropía del subsistema clásico [3].

4.3. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN FUTURAS

Este trabajo sienta las bases para varias líneas de investigación futuras:

1. **Interpretación Física de los Términos de Acoplo:** Investigar sistemáticamente qué sistemas físicos reales se corresponden con los diferentes operadores de acoplo. Por ejemplo, conectar el término $\hat{X}_{\text{mix}} \otimes \hat{X}_Q$ con interacciones dipolares en modelos moleculares, o el término $\hat{P}_{\text{mix}} \otimes \hat{P}_Q$ con efectos de momento en colisiones.
2. **Formalismo Termodinámico y Entropía Híbrida:** Utilizar la estructura de matrices densidad para explorar la termodinámica de estos sistemas. En particular, investigar cómo la entropía híbrida, definida como la entropía de von Neumann de la matriz densidad total [1], evoluciona en el tiempo bajo diferentes dinámicas (unitarias y no unitarias) y cómo se relaciona con el entrelazamiento.
3. **Extensión a Dinámicas No Unitarias:** El formalismo actual se ha centrado en una evolución unitaria. Un paso natural es extender el modelo para incluir dinámicas no unitarias, como las descritas por ecuaciones maestras de tipo Lindblad. Esto permitiría modelar sistemas abiertos, disipación y decoherencia, acercando el modelo a escenarios experimentales más realistas.
4. **Desarrollo de Técnicas Computacionales Avanzadas:** Para superar la limitación del truncamiento de la base, se podrían explorar métodos numéricos más sofisticados. Las redes de tensores (como MPS o MPO) han demostrado ser muy eficaces para tratar sistemas cuánticos de muchos cuerpos y podrían adaptarse al formalismo KvN para manejar de forma más eficiente el gran tamaño del espacio de Hilbert clásico.

En conclusión, el formalismo de Koopman-von Neumann generalizado ofrece un campo de juego teóricamente rico y computacionalmente accesible para desentrañar la compleja y fascinante dinámica de los sistemas híbridos clásico-cuánticos, abriendo nuevas preguntas sobre la naturaleza fundamental de la interacción y la correlación en la frontera de la física clásica y cuántica.

Bibliografía

- [1] J. L. Alonso et al. «Entropy and Canonical Ensemble of Hybrid Quantum Classical Systems». En: *Physical Review E* 102.4 (14 de oct. de 2020), pág. 042118. DOI: 10.1103/PhysRevE.102.042118.
- [2] Denys I. Bondar et al. «Operational Dynamic Modeling Transcending Quantum and Classical Mechanics». En: *Physical Review Letters* 109.19 (8 de nov. de 2012), pág. 190403. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.190403.
- [3] C. Bouthelie-Madre et al. «Hybrid Koopman C*-Formalism and the Hybrid Quantum-Classical Master Equation». En: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 56.37 (15 de sep. de 2023), pág. 374001. ISSN: 1751-8113, 1751-8121. DOI: 10.1088/1751-8121/aceed5. arXiv: 2306.15601 [math-ph].
- [4] James Glimm y Arthur Jaffe. *Quantum Physics*. New York, NY: Springer, 1987. ISBN: 978-0-387-96477-5 978-1-4612-4728-9. DOI: 10.1007/978-1-4612-4728-9.
- [5] B. O. Koopman. «Hamiltonian Systems and Transformation in Hilbert Space». En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 17.5 (mayo de 1931), págs. 315-318. DOI: 10.1073/pnas.17.5.315.
- [6] D. Mauro. *Topics in Koopman-von Neumann Theory*. 30 de ene. de 2003. DOI: 10.48550/arXiv.quant-ph/0301172. arXiv: quant-ph/0301172. Prepublicado.
- [7] Kin'ya Takahashi. «Wigner and Husimi Functions in Quantum Mechanics». En: *Journal of the Physical Society of Japan* 55.3 (15 de mar. de 1986), págs. 762-779. ISSN: 0031-9015. DOI: 10.1143/JPSJ.55.762.
- [8] John C. Tully. «Molecular Dynamics with Electronic Transitions». En: *The Journal of Chemical Physics* 93.2 (15 de jul. de 1990), págs. 1061-1071. ISSN: 0021-9606. DOI: 10.1063/1.459170.
- [9] John Von Neumann, Robert T. Beyer y Nicholas A. Wheeler. *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. New edition. Princeton: Princeton University Press, 2018. 304 págs. ISBN: 978-0-691-17856-1 978-0-691-17857-8.

Apéndice A

El Parámetro κ y la Representación en el Espacio de Fases de Wigner

El propósito de este anexo es formalizar la conexión, mencionada en la Sección 2.3.3, entre el formalismo del Modelado Dinámico Operacional (ODM) y la conocida formulación de la mecánica cuántica en el espacio de fases. Esta conexión proporciona una interpretación física más profunda y visual del parámetro de deformación κ , mostrándolo como un controlador continuo de la “cuanticidad” en la dinámica del espacio de fases.

A.1. LA FUNCIÓN DE WIGNER Y EL CORCHETE DE MOYAL

En lugar de describir un estado cuántico por su función de onda $|\psi\rangle$ o su matriz densidad $\hat{\rho}$, la formulación de Wigner lo representa mediante una función de cuasi-probabilidad $W(q, p)$ definida sobre el espacio de fases clásico. Para un estado puro, se define como:

$$W(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ipy/\hbar} \langle q + y/2 | \hat{\rho} | q - y/2 \rangle, \quad (\text{A.1})$$

donde $|q\rangle$ son los autoestados de la posición. Aunque $W(q, p)$ puede tomar valores negativos (de ahí el término “cuasi-probabilidad”), sus integrales marginales sobre p o q devuelven las densidades de probabilidad correctas en el espacio de posiciones y momentos, respectivamente.

La evolución temporal de la función de Wigner no está gobernada por la ecuación de Liouville clásica, sino por la **ecuación de Wigner-Moyal**:

$$\frac{\partial W(q, p; t)}{\partial t} = \{\{H, W\}\}_M, \quad (\text{A.2})$$

donde $H(q, p)$ es el símbolo de Weyl del Hamiltoniano (su análogo clásico) y $\{\{\cdot, \cdot\}\}_M$ es el **corchete de Moyal**. Este se define a través de la *star-product* ($*$) como:

$$\{\{f, g\}\}_M = \frac{f^*g - g^*f}{i\hbar}. \quad (\text{A.3})$$

El corchete de Moyal es una deformación del corchete de Poisson clásico. En el límite $\hbar \rightarrow 0$, el corchete de Moyal se reduce al de Poisson, $\{\{\cdot, \cdot\}\}_M \rightarrow \{\cdot, \cdot\}_{PB}$, y la ecuación de Wigner-Moyal se convierte en la ecuación de Liouville clásica.

A.2. EQUIVALENCIA CON LA DINÁMICA UNIFICADA DEL ODM

El formalismo ODM permite recuperar esta dinámica de forma natural. El punto de partida es la ecuación de evolución unificada para la “función de onda” abstracta $|\Psi_\kappa(t)\rangle$, gobernada por el Hamiltoniano $\hat{H}_{qc}$ que depende de κ :

$$i\hbar \frac{d|\Psi_\kappa(t)\rangle}{dt} = \hat{H}_{qc}|\Psi_\kappa(t)\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Como demuestran Bondar et al. en [2], este modelo es formalmente equivalente a la dinámica de Wigner si se considera que el parámetro κ juega un papel análogo a la constante de Planck. Al reescribir la ecuación anterior en la representación del espacio de fases (xp -representation) e introducir un cambio de variables, se demuestra que la evolución de la función de cuasi-probabilidad de Wigner asociada al estado $|\Psi_\kappa(t)\rangle$ viene dada por:

$$\frac{\partial W_\kappa(q, p; t)}{\partial t} = \{\{H, W_\kappa\}\}_{M, \kappa}, \quad (\text{A.5})$$

donde el corchete de Moyal ahora está “deformado” por el parámetro κ . Esto significa que en su definición, la constante de Planck $\hbar$ es reemplazada por el producto $\hbar\kappa$.

Esta equivalencia formal es el resultado clave:

- **Para $\kappa = 1$ (límite cuántico):** El producto efectivo es $\hbar \cdot 1 = \hbar$. Se recupera la ecuación de Wigner-Moyal estándar de la mecánica cuántica. La dinámica exhibe todos los efectos cuánticos capturados por la representación de Wigner.
- **Para $\kappa \rightarrow 0$ (límite clásico):** El producto efectivo $\hbar\kappa \rightarrow 0$. En este límite, el corchete de Moyal se reduce al corchete de Poisson. La ecuación de evolución se convierte en la ecuación de Liouville clásica:

$$\frac{\partial W_0(q, p; t)}{\partial t} = \{H, W_0\}_{PB}. \quad (\text{A.6})$$

Esto describe la evolución de una densidad de probabilidad clásica en el espacio de fases.

Por lo tanto, el parámetro κ del formalismo ODM no es solo un artificio matemático, sino que tiene una interpretación física directa y poderosa: **controla la “cantidad de cuanticidad” de la dinámica en el espacio de fases**, permitiendo una transición suave y matemáticamente consistente desde el mundo clásico (Liouville) al cuántico (Wigner-Moyal).

Apéndice B

Resultados Numéricos Adicionales y Galería de Visualizaciones

Este anexo recopila una selección de resultados numéricos y visualizaciones adicionales que complementan y profundizan el análisis presentado en el Capítulo 3. Todo el código utilizado para generar estas figuras está disponible en un repositorio público de GitHub.

B.1. GRÁFICAS EXCLUIDAS DE LA PARTE PRINCIPAL.

Este anexo recopila una selección de resultados gráficos adicionales que complementan y profundizan el análisis presentado en el Capítulo 3.

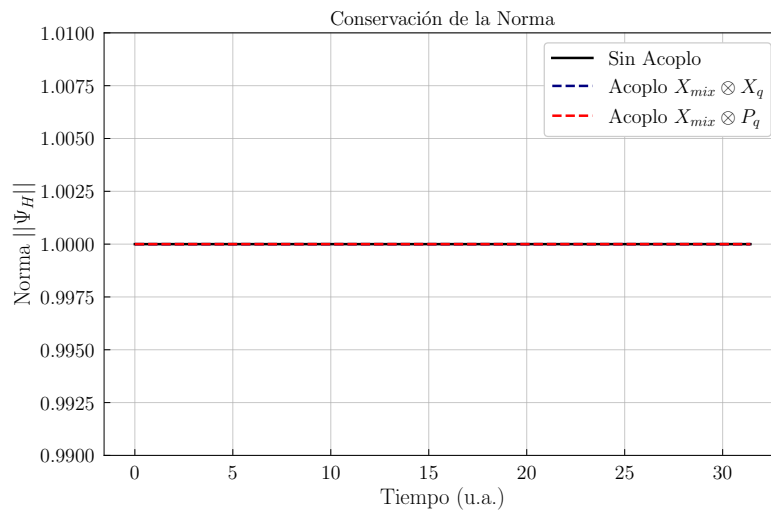


Figura B.1: Conservación de la norma del estado híbrido total, $\|\Psi(t)\|^2$, en el tiempo. Tanto en el caso sin acoplo (negro) como en el caso acoplado (rojo y azul), la norma se mantiene constante e igual a 1, confirmando que la evolución temporal implementada es unitaria.

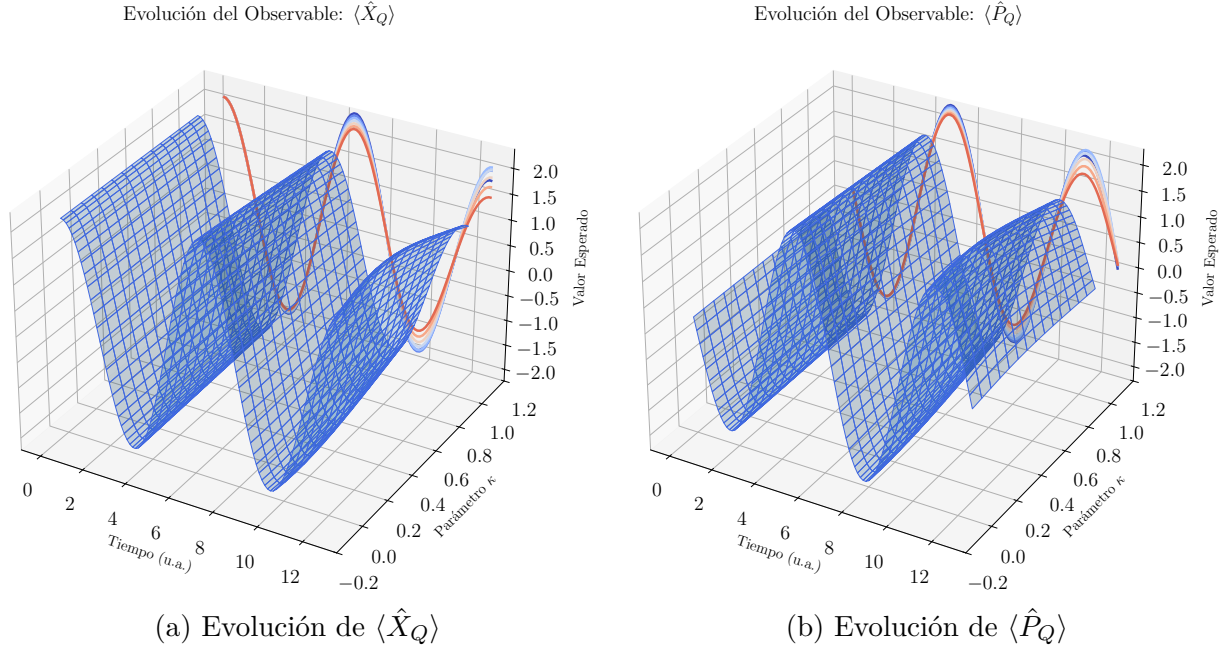


Figura B.2: Evolución de los observables cuánticos para un acoplo de tipo $\hat{\mathbf{X}}_{\text{mix}} \otimes \hat{\mathbf{X}}_Q$. Se observa un amortiguamiento en la amplitud de las oscilaciones que es más pronunciado para valores de κ cercanos a 1. La dinámica es consistente con la de un sistema cuántico perdiendo coherencia por la interacción con su entorno.

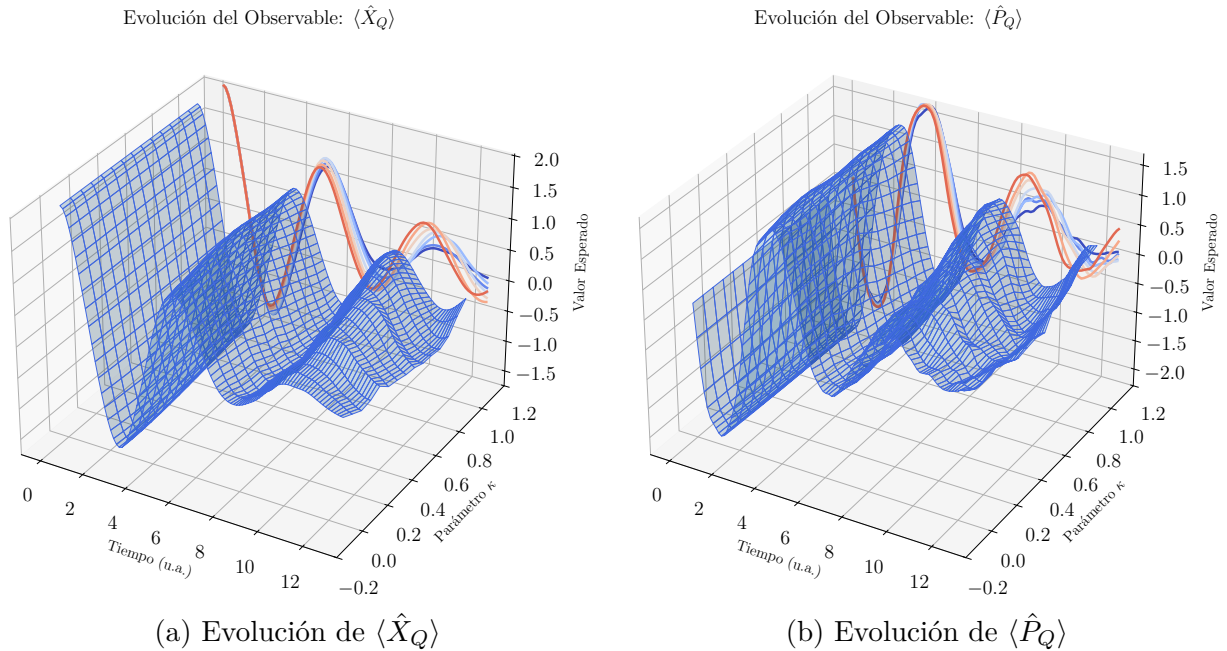


Figura B.3: Evolución de los observables cuánticos para un acoplo no lineal de tipo $\hat{\mathbf{X}}_{\text{mix}}^2 \otimes \hat{\mathbf{X}}_Q^2$. El efecto de amortiguamiento es significativamente más intenso en comparación con el acoplo lineal, manifestándose incluso para valores más pequeños de κ , lo que indica una transferencia de energía y coherencia más eficiente.

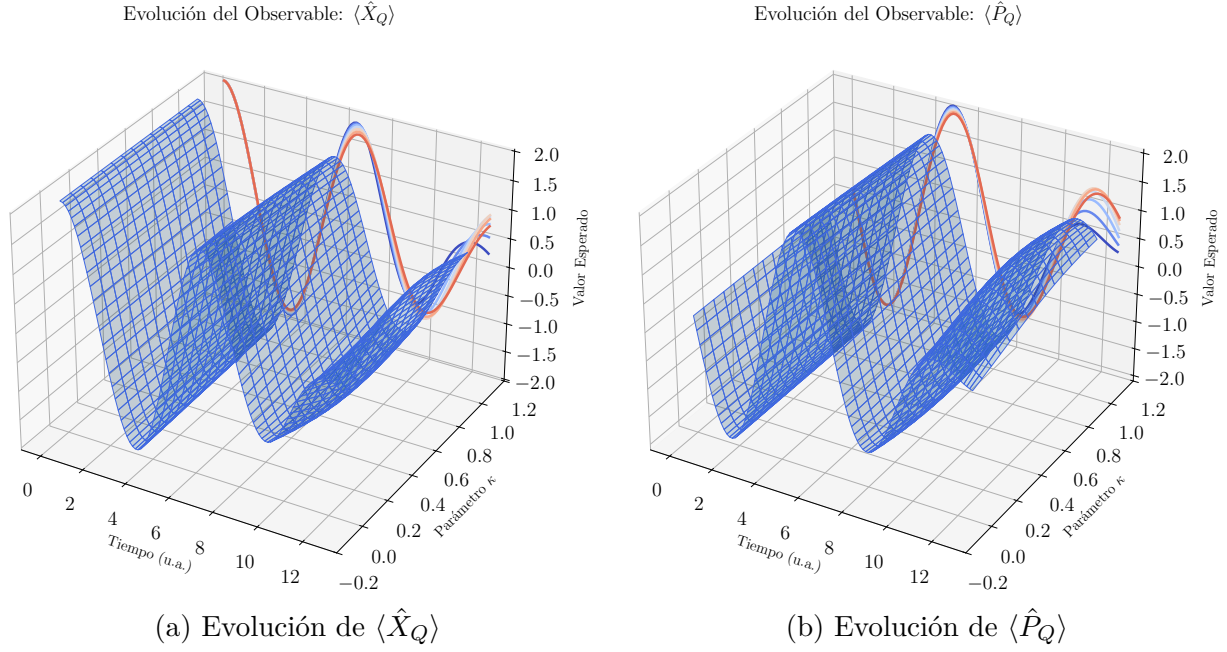


Figura B.4: Evolución de los observables cuánticos para un acoplo cruzado de tipo $\hat{X}_{\text{mix}} \otimes \hat{P}_Q$.

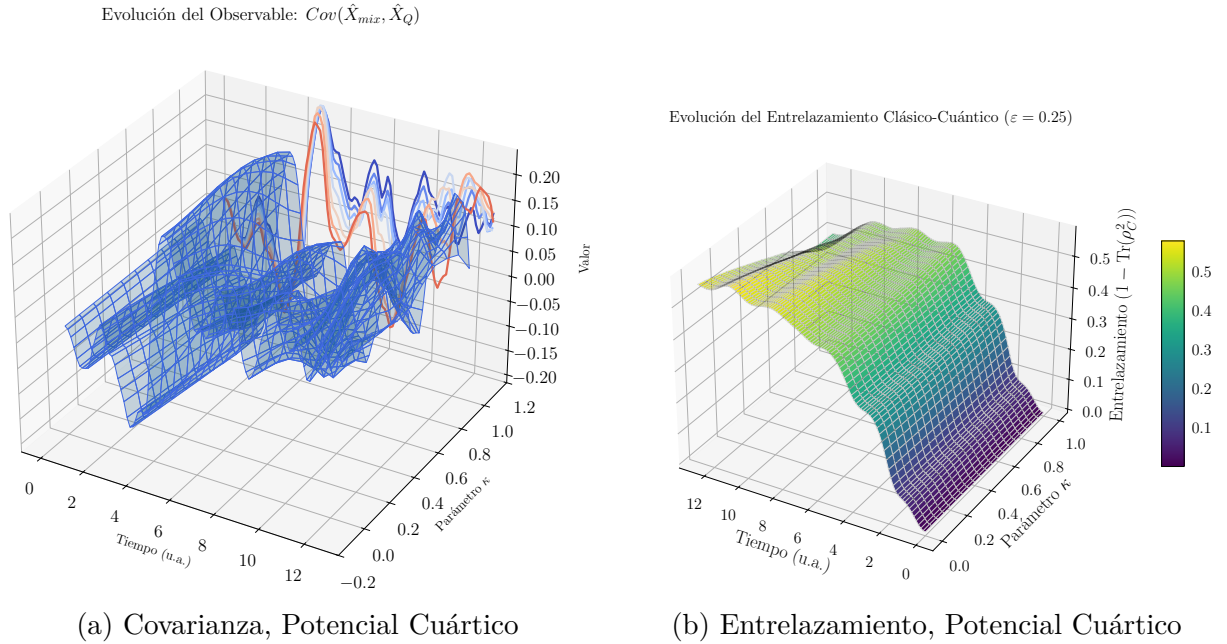


Figura B.5: Superficies de evolución para el sistema con potencial clásico cuártico y acoplo $\hat{X}_{\text{mix}} \otimes \hat{X}_Q$. A pesar de la dinámica clásica no lineal, (a) la covarianza sigue siendo máxima para $\kappa \rightarrow 0$ en la mayor parte del espectro temporal y (b) el entrelazamiento se activa para cualquier $\kappa > 0$, mostrando la robustez de la fenomenología híbrida (recordemos que a partir de un cierto momento temporal el análisis pierde sentido por los efectos de borde).

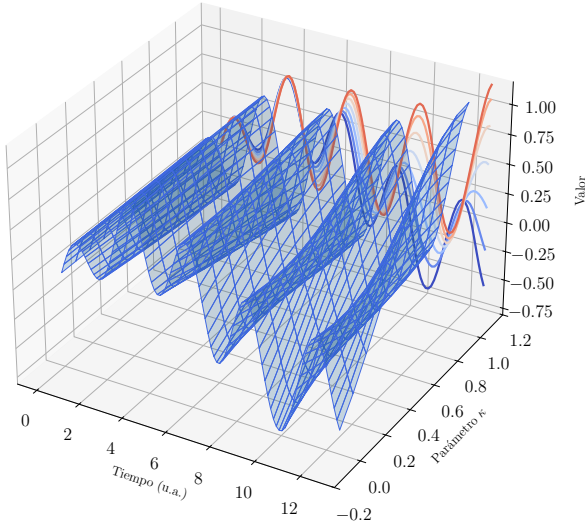
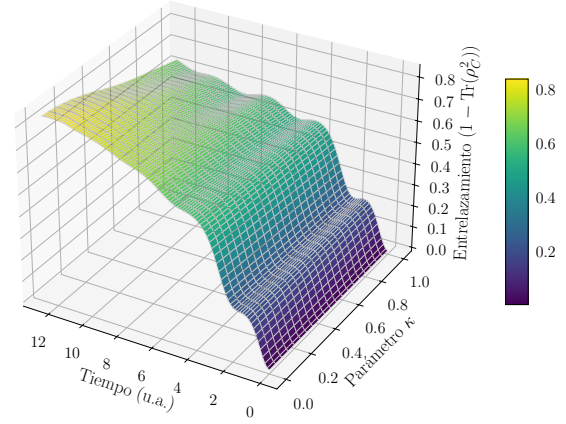
Evolución del Observable: $Cov(\hat{X}_{mix}, \hat{X}_Q)$ (a) Covarianza, Acoplo $\hat{X}_{mix} \otimes \hat{P}_Q$ Evolución del Entrelazamiento Clásico-Cuántico ($\varepsilon = 0.25$)(b) Entrelazamiento, Acoplo $\hat{X}_{mix} \otimes \hat{P}_Q$

Figura B.6: Superficies de evolución para el sistema con potencial armónico y acoplo cruzado. La fenomenología de la covarianza y el entrelazamiento es cualitativamente diferente a la del acoplo $\hat{X}_{mix} \otimes \hat{X}_Q$ (mostrado en la Figura 3.6) en cuanto a que aparece un cambio de fase, sugiriendo que la maximización de la covarianza en el límite cuasi-clásico no es un resultado general entre un observable mixto uno cuántico, sino que afecta a los observables involucrados en el acoplo.

Equivalencia del Modelo Mixto al Clásico para potencial armónico

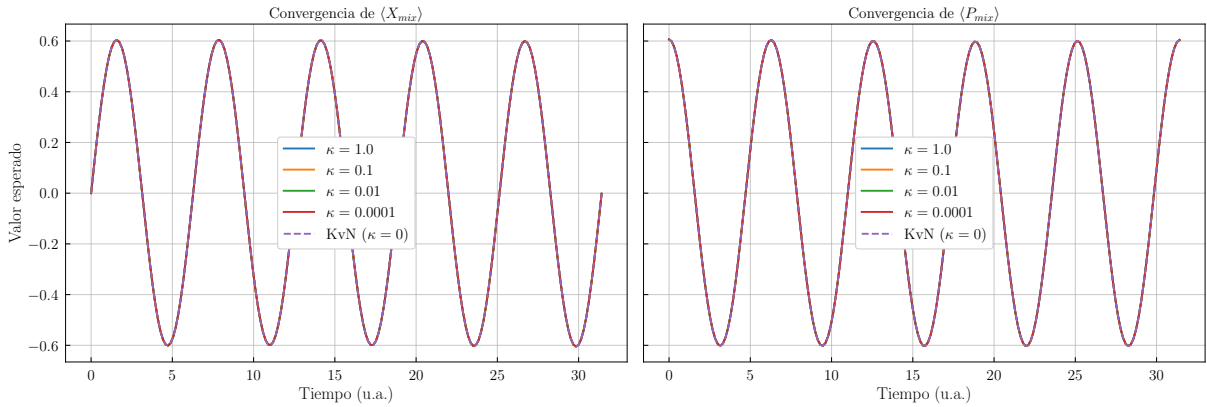


Figura B.7: Independencia del modelo con el valor de κ para el caso sin acoplo y con un potencial de tipo cuadrático.

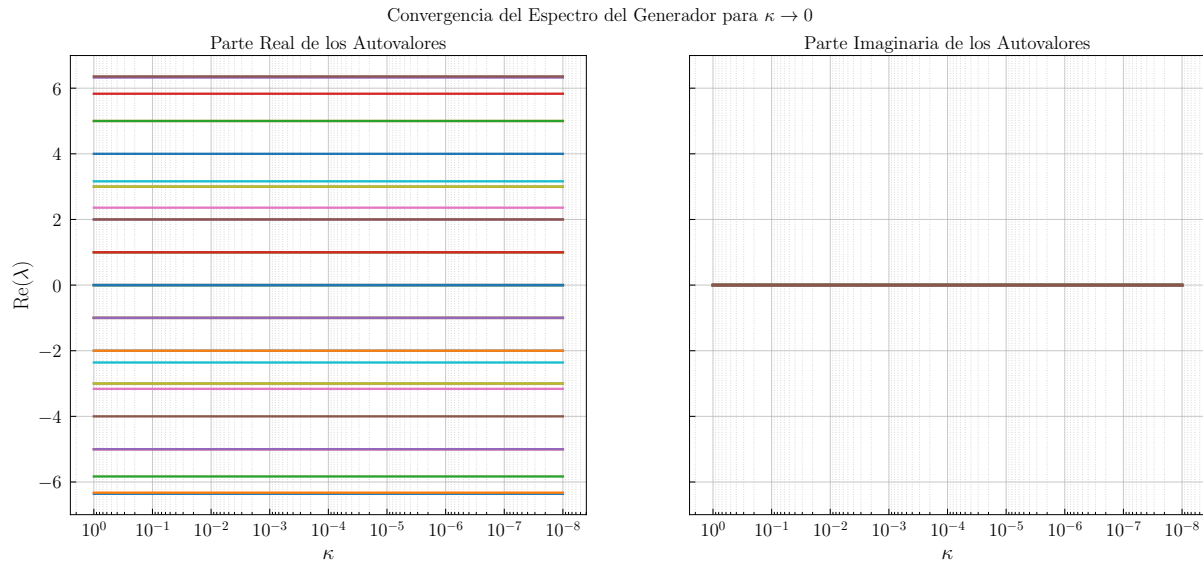


Figura B.8: Independencia del espectro con κ para el caso sin acoplo y con un potencial de tipo cuadrático.

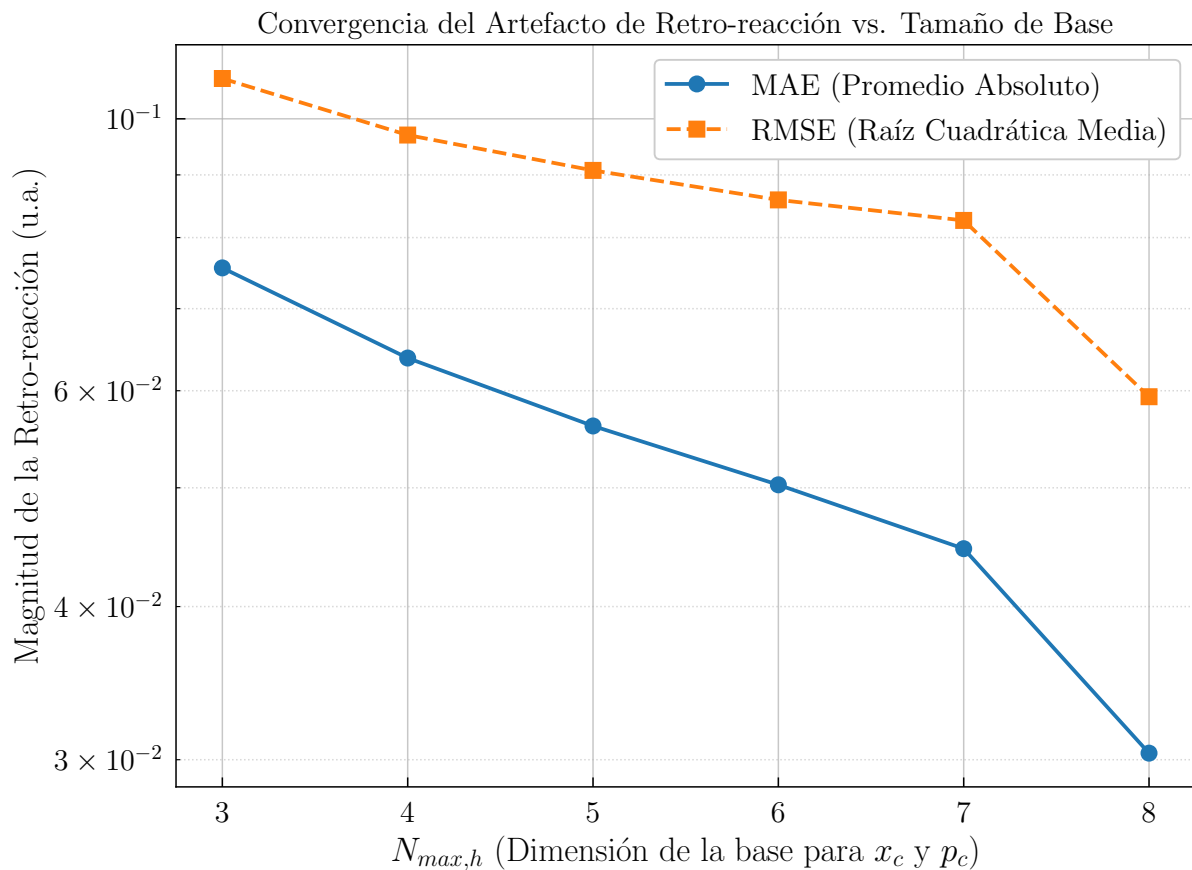


Figura B.9: Disminución del *back-reaction* con el tamaño de la base clásica, demostrando que es un artefacto numérico derivado de la truncación del espacio de Hilbert y verificando así la predicción teórica de [3].

Apéndice C

Sobre la Implementación Computacional

La traducción de este complejo marco teórico a un programa funcional implica superar varios desafíos, pero también ofrece una notable versatilidad para la exploración de la física de sistemas híbridos.

C.1. ESTRUCTURA MODULAR Y VERSATILIDAD

El código se ha desarrollado en Python utilizando librerías estándar como `NumPy` y `SciPy` para el álgebra lineal y `Matplotlib` para la visualización. Se ha diseñado con un enfoque modular, separando la definición de los operadores, la construcción de los Hamiltonianos, la evolución temporal y el post-procesamiento. Esta estructura permite al usuario modificar fácilmente los parámetros clave del sistema:

- El tipo de potencial clásico (`POTENTIAL_TYPE`).
- La forma del término de acoplo (`COUPLING_TYPE`).
- El parámetro de interpolación cuántica, κ .
- La fuerza del acoplo, ε .
- Las dimensiones de los espacios de Hilbert truncados, $N_{max,h}$ y $N_{max,q}$.

Esta flexibilidad ha sido fundamental para realizar los análisis paramétricos presentados en este trabajo y abre la puerta a futuras exploraciones de una amplia gama de sistemas híbridos.

C.2. DESAFÍOS Y RENDIMIENTO

El principal desafío computacional reside en la naturaleza del formalismo KvN. El espacio de Hilbert clásico es de dimensión infinita, y su truncamiento a una base finita es la principal fuente de error numérico. La dimensión de la matriz del Hamiltoniano total crece como $(N_{max,h} + 1)^2 \times (N_{max,q} + 1)$, lo que supone una carga computacional significativa.

La evolución temporal se realiza mediante la exponenciación de la matriz Hamiltoniana, $U(t) = \exp(-i\hat{H}_{\text{eff}}t/\hbar)$, utilizando la función `scipy.linalg.expm`. Este es el paso más costoso, ya que la complejidad de la exponenciación de matrices escala aproximadamente como $\mathcal{O}(D^3)$, donde D es la dimensión de la matriz. Esto significa que duplicar $N_{max,h}$ puede aumentar el tiempo de cálculo en un factor de 16 o más, limitando en la práctica el tamaño de la base y el tiempo de simulación alcanzable.

A lo largo del desarrollo, se ha puesto un gran énfasis en la validación y la verificación, implementando tests como los descritos en la Sección 3.2 para asegurar que los resultados físicos obtenidos son numéricamente robustos y no meros artefactos de la aproximación. Todo el código fuente desarrollado para este TFG, incluyendo los scripts para generar todas las figuras y animaciones, se ha hecho público y está disponible en el siguiente repositorio:

<https://github.com/snati/MixedQuantumHO>