



UNIVERSIDAD  
DE LA REPÚBLICA  
URUGUAY

# Sistemas cuánticos abiertos

## y un poquito de termodinámica cuántica

Andrés Vallejo

Instituto de Física- Facultad de Ingeniería - UdelaR

- 1 Sistemas abiertos
- 2 Trabajo y calor: de lo clásico a lo cuántico
- 3 Una formulación alternativa de la primera ley
- 4 Comentarios finales

- 1 **Sistemas abiertos**
- 2 Trabajo y calor: de lo clásico a lo cuántico
- 3 Una formulación alternativa de la primera ley
- 4 Comentarios finales

- Término que refiere a las cantidades físicas medibles

# Observables

- Término que refiere a las cantidades físicas medibles
- Representados mediante operadores Hermíticos ( $O^\dagger = O$ )

# Observables

- Término que refiere a las cantidades físicas medibles
- Representados mediante operadores Hermíticos ( $O^\dagger = O$ )
- Resultados posibles de su medición **son los autovalores de  $O$**

# Observables

- Término que refiere a las cantidades físicas medibles
- Representados mediante operadores Hermíticos ( $O^\dagger = O$ )
- Resultados posibles de su medición **son los autovalores de  $O$** 
  - ▶ Se obtienen con cierta probabilidad que depende del estado

# Observables

- Término que refiere a las cantidades físicas medibles
- Representados mediante operadores Hermíticos ( $O^\dagger = O$ )
- Resultados posibles de su medición **son los autovalores de  $O$** 
  - ▶ Se obtienen con cierta probabilidad que depende del estado
- Ejemplo: Energía:  $\rightarrow$  **operador Hamiltoniano ( $H$ )**
  - ▶ Sistema aislado  $\rightarrow H$  gobierna la evolución
  - ▶ energías posibles  $E_1, \dots, E_N$  autovalores de  $H$

# Observables

- Término que refiere a las cantidades físicas medibles
- Representados mediante operadores Hermíticos ( $O^\dagger = O$ )
- Resultados posibles de su medición **son los autovalores de  $O$** 
  - ▶ Se obtienen con cierta probabilidad que depende del estado
- Ejemplo: Energía:  $\rightarrow$  **operador Hamiltoniano ( $H$ )**
  - ▶ Sistema aislado  $\rightarrow H$  gobierna la evolución
  - ▶ energías posibles  $E_1, \dots, E_N$  autovalores de  $H$
- Como el resultado de cada medida es aleatorio, nos interesan los **valores esperados:  $\langle O \rangle$**

- ¿Cómo se caracteriza un estado en MC?

- ¿Cómo se caracteriza un estado en MC?
  - ▶ Sistema aislado  $\rightarrow |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$
  - ▶ se denominan **estados puros** (perfectamente conocidos, **cero entropía**)

- ¿Cómo se caracteriza un estado en MC?
  - ▶ Sistema aislado  $\rightarrow |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$
  - ▶ se denominan **estados puros** (perfectamente conocidos, **cero entropía**)
- Sin embargo, existen estados más generales:
  - ▶  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}, p_i \geq 0, \sum_i p_i = 1$

- ¿Cómo se caracteriza un estado en MC?
  - ▶ Sistema aislado  $\rightarrow |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$
  - ▶ se denominan **estados puros** (perfectamente conocidos, **cero entropía**)
- Sin embargo, existen estados más generales:
  - ▶  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ ,  $p_i \geq 0$ ,  $\sum_i p_i = 1$
  - ▶ Se denominan **mezclas estadísticas** (hay ignorancia clásica, **entropía >0**)

- ¿Cómo se caracteriza un estado en MC?
  - ▶ Sistema aislado  $\rightarrow |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$
  - ▶ se denominan **estados puros** (perfectamente conocidos, **cero entropía**)
- Sin embargo, existen estados más generales:
  - ▶  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ ,  $p_i \geq 0$ ,  $\sum_i p_i = 1$
  - ▶ Se denominan **mezclas estadísticas** (hay ignorancia clásica, **entropía >0**)
- ¿Cuándo ocurren?
  - ▶ preparaciones imperfectas,
  - ▶ sistemas en equilibrio térmico con el ambiente
  - ▶ en una de las partes de un sistema entrelazado (**¿qué es eso?**)

- **Obs. 1:** estados de equilibrio térmico con el ambiente o entrelazados no pueden ocurrir en sistemas aislados

- **Obs. 1:** estados de equilibrio térmico con el ambiente o entrelazados no pueden ocurrir en sistemas aislados
  - ▶ **SON LOS SISTEMAS ABIERTOS LOS QUE TÍPICAMENTE SE ENCUENTRAN EN ESTADOS MEZCLADOS**

- **Obs. 1:** estados de equilibrio térmico con el ambiente o entrelazados no pueden ocurrir en sistemas aislados
  - ▶ **SON LOS SISTEMAS ABIERTOS LOS QUE TÍPICAMENTE SE ENCUENTRAN EN ESTADOS MEZCLADOS**
- **Obs. 2:** no es lo mismo una superposición:  $|\Psi\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |\varphi_i\rangle$  que una mezcla estadística  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ , a pesar de involucrar las mismas probabilidades:
  - ▶ la superposición es un estado puro; la mezcla, no
  - ▶ en la superposición el sistema se encuentra a priori (antes de medir) en **todos** los estados que figuran en ella, y en la mezcla **en uno solo**, que ignoramos.

- **Obs. 1:** estados de equilibrio térmico con el ambiente o entrelazados no pueden ocurrir en sistemas aislados
  - ▶ **SON LOS SISTEMAS ABIERTOS LOS QUE TÍPICAMENTE SE ENCUENTRAN EN ESTADOS MEZCLADOS**
- **Obs. 2:** no es lo mismo una superposición:  $|\Psi\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |\varphi_i\rangle$  que una mezcla estadística  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ , a pesar de involucrar las mismas probabilidades:
  - ▶ la superposición es un estado puro; la mezcla, no
  - ▶ en la superposición el sistema se encuentra a priori (antes de medir) en **todos** los estados que figuran en ella, y en la mezcla **en uno solo**, que ignoramos.
- ¿Cómo operamos matemáticamente con estados mezclados?
  - ▶ **OPERADOR DENSIDAD**

# Operador densidad

- Para un estado puro  $|\Psi\rangle \rightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$

# Operador densidad

- Para un estado puro  $|\Psi\rangle \rightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$
- En general, para un ensemble de estados puros  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ :

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

# Operador densidad

- Para un estado puro  $|\Psi\rangle \rightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$
- En general, para un ensemble de estados puros  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ :

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

- Propiedades:
  - ▶ Hermítica ( $\rho^\dagger = \rho$ ), semidefinida positiva,  $\text{tr}(\rho) = 1$ .

# Operador densidad

- Para un estado puro  $|\Psi\rangle \rightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$
- En general, para un ensemble de estados puros  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ :

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

- Propiedades:
  - ▶ Hermítica ( $\rho^\dagger = \rho$ ), semidefinida positiva,  $\text{tr}(\rho) = 1$ .
  - ▶ Elementos
    - ★ diagonales  $\rightarrow$  probabilidades
    - ★ no diagonales  $\rightarrow$  *coherencias*

# Operador densidad

- Para un estado puro  $|\Psi\rangle \rightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$
- En general, para un ensemble de estados puros  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ :

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

- Propiedades:

- ▶ Hermítica ( $\rho^\dagger = \rho$ ), semidefinida positiva,  $\text{tr}(\rho) = 1$ .
- ▶ Elementos
  - ★ diagonales  $\rightarrow$  probabilidades
  - ★ no diagonales  $\rightarrow$  *coherencias*
- ▶ Estados:
  - ★ puros:  $\text{tr}(\rho^2) = 1$  ( $\rho^2 = \rho$ )
  - ★ mezclas:  $\text{tr}(\rho^2) < 1$ . A la cantidad  $\text{tr}(\rho^2)$  se la denomina *pureza* del estado

# Operador densidad

- Para un estado puro  $|\Psi\rangle \rightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$
- En general, para un ensemble de estados puros  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ :

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

- Propiedades:

- ▶ Hermítica ( $\rho^\dagger = \rho$ ), semidefinida positiva,  $\text{tr}(\rho) = 1$ .
- ▶ Elementos
  - ★ diagonales  $\rightarrow$  probabilidades
  - ★ no diagonales  $\rightarrow$  *coherencias*
- ▶ Estados:
  - ★ puros:  $\text{tr}(\rho^2) = 1$  ( $\rho^2 = \rho$ )
  - ★ mezclas:  $\text{tr}(\rho^2) < 1$ . A la cantidad  $\text{tr}(\rho^2)$  se la denomina *pureza* del estado
- ▶ **Evolución:**  $\rho(t) = U\rho U^\dagger$ ,  $U =$  *operador evolución*

# Operador densidad

- Para un estado puro  $|\Psi\rangle \rightarrow \rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$
- En general, para un ensemble de estados puros  $\{|\varphi_i\rangle, p_i\}$ :

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

- Propiedades:

- ▶ Hermítica ( $\rho^\dagger = \rho$ ), semidefinida positiva,  $\text{tr}(\rho) = 1$ .
- ▶ Elementos
  - ★ diagonales  $\rightarrow$  probabilidades
  - ★ no diagonales  $\rightarrow$  *coherencias*
- ▶ Estados:
  - ★ puros:  $\text{tr}(\rho^2) = 1$  ( $\rho^2 = \rho$ )
  - ★ mezclas:  $\text{tr}(\rho^2) < 1$ . A la cantidad  $\text{tr}(\rho^2)$  se la denomina *pureza* del estado
- ▶ **Evolución:**  $\rho(t) = \mathbf{U}\rho\mathbf{U}^\dagger$ ,  $\mathbf{U} =$  *operador evolución*
- ▶ **Valores esperados:** si  $X$  observable, entonces  $\langle\mathbf{X}\rangle = \text{tr}(\rho\mathbf{X})$

# Sistemas multipartitos

- **Postulado:** el espacio de Hilbert asociado a un sistema multipartito es el producto tensorial de los correspondientes espacios de Hilbert asociados a sus componentes:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$$

- Si  $\{|\varphi_i\rangle^A\}_{i=1,\dots,N}$ ,  $\{|\varphi_j\rangle^B\}_{j=1,\dots,M}$  son sendas bases de  $\mathcal{H}_A$  y  $\mathcal{H}_B$ , entonces:

$$\{|\varphi_i\rangle^A \otimes |\varphi_j\rangle^B\}_{i=1,\dots,N; j=1,\dots,M}$$

es una base de  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$

- Un estado **puro** genérico del sistema global adopta la forma:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} a_{ij} |\varphi_i\rangle^A \otimes |\varphi_j\rangle^B$$

# Entrelazamiento

- Dado un ket representando el estado de un sistema bipartito, **cabe preguntarse cuales son los estados de cada uno de los sistemas componentes.**

# Entrelazamiento

- Dado un ket representando el estado de un sistema bipartito, **cabe preguntarse cuales son los estados de cada uno de los sistemas componentes.**
- Ej. 1: Si  $|\varphi\rangle^{AB} = |0\rangle^A \otimes |1\rangle^B$ , entonces:

$$|\varphi\rangle^A = |0\rangle^A, \quad |\varphi\rangle^B = |1\rangle^B$$

# Entrelazamiento

- Dado un ket representando el estado de un sistema bipartito, **cabe preguntarse cuales son los estados de cada uno de los sistemas componentes.**
- Ej. 1: Si  $|\varphi\rangle^{AB} = |0\rangle^A \otimes |1\rangle^B$ , entonces:

$$|\varphi\rangle^A = |0\rangle^A, \quad |\varphi\rangle^B = |1\rangle^B$$

- Ej. 2: Si  $|\varphi\rangle^{AB} = \frac{1}{2} [ |0\rangle^A \otimes |0\rangle^B + |0\rangle^A \otimes |1\rangle^B + |1\rangle^A \otimes |0\rangle^B + |1\rangle^A \otimes |1\rangle^B ]$

# Entrelazamiento

- Dado un ket representando el estado de un sistema bipartito, **cabe preguntarse cuales son los estados de cada uno de los sistemas componentes.**
- Ej. 1: Si  $|\varphi\rangle^{AB} = |0\rangle^A \otimes |1\rangle^B$ , entonces:

$$|\varphi\rangle^A = |0\rangle^A, \quad |\varphi\rangle^B = |1\rangle^B$$

- Ej. 2: Si  $|\varphi\rangle^{AB} = \frac{1}{2} [ |0\rangle^A \otimes |0\rangle^B + |0\rangle^A \otimes |1\rangle^B + |1\rangle^A \otimes |0\rangle^B + |1\rangle^A \otimes |1\rangle^B ]$

$$\rightarrow |\varphi\rangle^A = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |0\rangle^A + |1\rangle^A ], \quad |\varphi\rangle^B = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |0\rangle^B + |1\rangle^B ]$$

# Entrelazamiento

- Dado un ket representando el estado de un sistema bipartito, **cabe preguntarse cuales son los estados de cada uno de los sistemas componentes.**

- Ej. 1: Si  $|\varphi\rangle^{AB} = |0\rangle^A \otimes |1\rangle^B$ , entonces:

$$|\varphi\rangle^A = |0\rangle^A, \quad |\varphi\rangle^B = |1\rangle^B$$

- Ej. 2: Si  $|\varphi\rangle^{AB} = \frac{1}{2} [ |0\rangle^A \otimes |0\rangle^B + |0\rangle^A \otimes |1\rangle^B + |1\rangle^A \otimes |0\rangle^B + |1\rangle^A \otimes |1\rangle^B ]$

$$\rightarrow |\varphi\rangle^A = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |0\rangle^A + |1\rangle^A ], \quad |\varphi\rangle^B = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |0\rangle^B + |1\rangle^B ]$$

- Ej. 3: Si  $|\varphi\rangle^{AB} = \frac{1}{2} [ |0\rangle^A \otimes |0\rangle^B + |1\rangle^A \otimes |1\rangle^B ] \dots$

## Entrelazamiento 2

- En el caso anterior no existen kets de los respectivos espacios tales que su producto sea  $|\varphi\rangle^{AB} \rightarrow$  **ESTADO ENTRELAZADO**

## Entrelazamiento 2

- En el caso anterior no existen kets de los respectivos espacios tales que su producto sea  $|\varphi\rangle^{AB} \rightarrow$  **ESTADO ENTRELAZADO**
- A pesar de que el estado global es puro, **los estados locales no lo son**  
 $\rightarrow$  **al ser estados mezclados, deben ser descritos mediante matrices densidad**

## Entrelazamiento 2

- En el caso anterior no existen kets de los respectivos espacios tales que su producto sea  $|\varphi\rangle^{AB} \rightarrow$  **ESTADO ENTRELAZADO**
- A pesar de que el estado global es puro, **los estados locales no lo son**  
 $\rightarrow$  **al ser estados mezclados, deben ser descritos mediante matrices densidad**
- **Información completa sobre el estado global de un sistema no implica información completa sobre las partes de un sistema**

## Entrelazamiento 2

- En el caso anterior no existen kets de los respectivos espacios tales que su producto sea  $|\varphi\rangle^{AB} \rightarrow$  **ESTADO ENTRELAZADO**
- A pesar de que el estado global es puro, **los estados locales no lo son**  $\rightarrow$  **al ser estados mezclados, deben ser descritos mediante matrices densidad**
- **Información completa sobre el estado global de un sistema no implica información completa sobre las partes de un sistema**
- Sistemas entrelazados poseen correlaciones imposibles de alcanzar en sistemas clásicos ("**Acción fantasmal a distancia**")

# Operador densidad reducida

- Sea un sistema bipartito  $AB$  aislado, descrito por su operador densidad  $\rho_{AB}$
- En muchos casos las partes del sistema no se encuentran estados puros... ¿Cómo las describo?

# Operador densidad reducida

- Sea un sistema bipartito  $AB$  aislado, descrito por su operador densidad  $\rho_{AB}$
- En muchos casos las partes del sistema no se encuentran estados puros... ¿Cómo las describo?
- Es posible definir un *operador densidad reducida*  $\rho_A$  tal que, para todo observable **local**  $X$  del sistema  $A$ , satisface:

$$\langle X \rangle = \text{tr} [\rho_{AB}(X \otimes \mathcal{I}_B)] = \text{tr} [\rho_A X]$$

# Operador densidad reducida

- Sea un sistema bipartito  $AB$  aislado, descrito por su operador densidad  $\rho_{AB}$
- En muchos casos las partes del sistema no se encuentran estados puros... ¿Cómo las describo?
- Es posible definir un *operador densidad reducida*  $\rho_A$  tal que, para todo observable **local**  $X$  del sistema  $A$ , satisface:

$$\langle X \rangle = \text{tr} [\rho_{AB}(X \otimes \mathcal{I}_B)] = \text{tr} [\rho_A X]$$

- Se demuestra que

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB}) = \sum_j \langle \varphi_B | \rho_{AB} | \varphi_B \rangle$$

donde  $\{|\varphi_B\rangle\}$  es una base ortonormal cualquiera del espacio  $\mathcal{H}_B$

# Operador densidad reducida

- Sea un sistema bipartito  $AB$  aislado, descrito por su operador densidad  $\rho_{AB}$
- En muchos casos las partes del sistema no se encuentran estados puros... ¿Cómo las describo?
- Es posible definir un *operador densidad reducida*  $\rho_A$  tal que, para todo observable **local**  $X$  del sistema  $A$ , satisface:

$$\langle X \rangle = \text{tr} [\rho_{AB}(X \otimes \mathcal{I}_B)] = \text{tr} [\rho_A X]$$

- Se demuestra que

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB}) = \sum_j \langle \varphi_B | \rho_{AB} | \varphi_B \rangle$$

donde  $\{|\varphi_B\rangle\}$  es una base ortonormal cualquiera del espacio  $\mathcal{H}_B$

- Evolución:  $\rho_A(\mathbf{t}) = \sum_j M \rho_A(\mathbf{0}) M^\dagger$  (no unitaria)

# Entropía cuántica

- ¿Cómo cuantificamos el grado de incerteza de una mezcla estadística?

# Entropía cuántica

- ¿Cómo cuantificamos el grado de incerteza de una mezcla estadística?
- Una forma es mediante la *Entropía de von Neumann* de la matriz densidad, definida como:

$$S_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho)$$

# Entropía cuántica

- ¿Cómo cuantificamos el grado de incerteza de una mezcla estadística?
- Una forma es mediante la *Entropía de von Neumann* de la matriz densidad, definida como:

$$\mathbf{S}_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho)$$

- Propiedades:
  - ▶ Estado puro  $\rightarrow \mathbf{S}_{vN} = 0$

# Entropía cuántica

- ¿Cómo cuantificamos el grado de incerteza de una mezcla estadística?
- Una forma es mediante la *Entropía de von Neumann* de la matriz densidad, definida como:

$$\mathbf{S}_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho)$$

- Propiedades:
  - ▶ Estado puro  $\rightarrow \mathbf{S}_{vN} = 0$
  - ▶ Estado máximamente mezclado  $\rightarrow \mathbf{S}_{vN} = k_B \log(\dim(\mathcal{H}))$

# Entropía cuántica

- ¿Cómo cuantificamos el grado de incerteza de una mezcla estadística?
- Una forma es mediante la *Entropía de von Neumann* de la matriz densidad, definida como:

$$S_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho)$$

- Propiedades:
  - ▶ Estado puro  $\rightarrow S_{vN} = 0$
  - ▶ Estado máximamente mezclado  $\rightarrow S_{vN} = k_B \log(\dim(\mathcal{H}))$
  - ▶ Si un sistema  $AB$  se encuentra en un estado puro,  $S_{vN}(\rho_A) = S_{vN}(\rho_B)$  y ambas cuantifican el grado de entrelazamiento entre A y B

# Entropía cuántica

- ¿Cómo cuantificamos el grado de incerteza de una mezcla estadística?
- Una forma es mediante la *Entropía de von Neumann* de la matriz densidad, definida como:

$$S_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho)$$

- Propiedades:

- ▶ Estado puro  $\rightarrow S_{vN} = 0$
- ▶ Estado máximamente mezclado  $\rightarrow S_{vN} = k_B \log(\dim(\mathcal{H}))$
- ▶ Si un sistema  $AB$  se encuentra en un estado puro,  $S_{vN}(\rho_A) = S_{vN}(\rho_B)$  y ambas cuantifican el grado de entrelazamiento entre A y B
- ▶ Si  $\{\lambda_j\}$  es el conjunto de autovalores de  $\rho$ , entonces:

$$S_{vN} = - \sum_j \lambda_j \log(\lambda_j)$$

**(es la entropía de Gibbs (Shannon) de la distribución de autovalores de la matriz densidad)**

- 1 Sistemas abiertos
- 2 Trabajo y calor: de lo clásico a lo cuántico**
- 3 Una formulación alternativa de la primera ley
- 4 Comentarios finales

# Trabajo y calor: visión clásica

$$\text{Trabajo: } W = W_{macro}^{ext}$$

- "Macro": cuantificable por medio de la variación de una coordenada  $X$  perteneciente a la escala del observador (medible)
- Asociado al movimiento colectivo **ordenado** de muchos grados de libertad
- $\delta W = YdX$  (Ej:  $\delta W = PdV$ )
  - ▶  $Y$  = fuerza generalizada (modificable mediante parámetro de control)

# Trabajo y calor: visión clásica

$$\text{Trabajo: } W = W_{macro}^{ext}$$

- "Macro": cuantificable por medio de la variación de una coordenada  $X$  perteneciente a la escala del observador (medible)
- Asociado al movimiento colectivo **ordenado** de muchos grados de libertad
- $\delta W = YdX$  (Ej:  $\delta W = PdV$ )
  - ▶  $Y$  = fuerza generalizada (modificable mediante parámetro de control)
- No hay incerteza asociada  $\rightarrow$  **no tiene vinculación con la entropía**

# Trabajo y calor: visión clásica

$$\text{Trabajo: } W = W_{macro}^{ext}$$

- "Macro": cuantificable por medio de la variación de una coordenada  $X$  perteneciente a la escala del observador (medible)
- Asociado al movimiento colectivo **ordenado** de muchos grados de libertad
- $\delta W = YdX$  (Ej:  $\delta W = PdV$ )
  - ▶  $Y$  = fuerza generalizada (modificable mediante parámetro de control)
- No hay incerteza asociada → **no tiene vinculación con la entropía**

$$\text{Calor: } Q = W_{micro}^{ext}$$

- "Micro": Interacciones responsables ocurren en una escala inaccesible al experimentador
- Asociada al movimiento **desordenado** a nivel microscópico (choques, etc) en la frontera del sistema ("diferencia de temperatura")

# Trabajo y calor: visión clásica

$$\text{Trabajo: } W = W_{macro}^{ext}$$

- "Macro": cuantificable por medio de la variación de una coordenada  $X$  perteneciente a la escala del observador (medible)
- Asociado al movimiento colectivo **ordenado** de muchos grados de libertad
- $\delta W = YdX$  (Ej:  $\delta W = PdV$ )
  - ▶  $Y$  = fuerza generalizada (modificable mediante parámetro de control)
- No hay incerteza asociada → **no tiene vinculación con la entropía**

$$\text{Calor: } Q = W_{micro}^{ext}$$

- "Micro": Interacciones responsables ocurren en una escala inaccesible al experimentador
- Asociada al movimiento **desordenado** a nivel microscópico (choques, etc) en la frontera del sistema ("diferencia de temperatura")
- Hay incerteza → **su flujo transporta (y casi siempre genera) entropía** (Clausius):

$$dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T}$$

# Trabajo y calor: mecánica estadística

- Sistema de  $N$  partículas con espectro discreto  $E_1, \dots, E_N$

# Trabajo y calor: mecánica estadística

- Sistema de  $N$  partículas con espectro discreto  $E_1, \dots, E_N$
- Estado caracterizado por las fracciones de ocupación  $\{p_j = n_j/N\}$  (distribución de probabilidad)

# Trabajo y calor: mecánica estadística

- Sistema de  $N$  partículas con espectro discreto  $E_1, \dots, E_N$
- Estado caracterizado por las fracciones de ocupación  $\{p_j = n_j/N\}$  (distribución de probabilidad)
- Para un valor de energía dado  $E$ :
  - ▶  $S = k_B \log(\Omega) \simeq -k_B \sum_j p_j \ln p_j$  (Gibbs)
  - ▶  $E = \sum_j p_j E_j$

# Trabajo y calor: mecánica estadística

- Sistema de  $N$  partículas con espectro discreto  $E_1, \dots, E_N$
- Estado caracterizado por las fracciones de ocupación  $\{p_j = n_j/N\}$  (distribución de probabilidad)
- Para un valor de energía dado  $E$ :
  - ▶  $\mathbf{S} = k_B \log(\Omega) \simeq -k_B \sum_j p_j \ln p_j$  (Gibbs)
  - ▶  $\mathbf{E} = \sum_j p_j E_j$
- Como  $\frac{dE}{dt} = \sum_j \dot{p}_j E_j + \sum_j p_j \dot{E}_j$ , es razonable definir:

# Trabajo y calor: mecánica estadística

- Sistema de  $N$  partículas con espectro discreto  $E_1, \dots, E_N$
- Estado caracterizado por las fracciones de ocupación  $\{p_j = n_j/N\}$  (distribución de probabilidad)
- Para un valor de energía dado  $E$ :
  - ▶  $\mathbf{S} = k_B \log(\Omega) \simeq -k_B \sum_j p_j \ln p_j$  (Gibbs)
  - ▶  $\mathbf{E} = \sum_j p_j E_j$
- Como  $\frac{dE}{dt} = \sum_j \dot{p}_j E_j + \sum_j p_j \dot{E}_j$ , es razonable definir:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{Q}} = \sum_j \dot{p}_j E_j \\ \dot{\mathbf{W}} = \sum_j p_j \dot{E}_j \end{cases}$$

- ▶ Trabajo  $\rightarrow$  variación del espectro\*
- ▶ Calor  $\rightarrow$  cambios en las poblaciones

# Trabajo y calor en mecánica cuántica [1]

- Energía interna:  $\mathbf{E} = \langle \mathbf{H} \rangle = \text{tr}[\rho \mathbf{H}] \rightarrow \frac{d\mathbf{E}}{dt} = \text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] + \text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}]$
- Razones de cambio de  $E$ :
  - ▶ cambios en el estado  $\rho$ :  $\text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] = \sum_j \dot{\rho}_j E_j$
  - ▶ cambios en  $H$ :  $\text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}] = \sum_j \rho_j \dot{E}_j$

# Trabajo y calor en mecánica cuántica [1]

- Energía interna:  $\mathbf{E} = \langle \mathbf{H} \rangle = \text{tr}[\rho \mathbf{H}] \rightarrow \frac{d\mathbf{E}}{dt} = \text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] + \text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}]$
- Razones de cambio de  $E$ :
  - ▶ cambios en el estado  $\rho$ :  $\text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] = \sum_j \dot{\rho}_j E_j$
  - ▶ cambios en  $H$ :  $\text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}] = \sum_j \rho_j \dot{E}_j$
- Recordemos que  $\mathbf{S}_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho) \rightarrow$  función de  $\rho$

# Trabajo y calor en mecánica cuántica [1]

- Energía interna:  $\mathbf{E} = \langle \mathbf{H} \rangle = \text{tr}[\rho \mathbf{H}] \rightarrow \frac{d\mathbf{E}}{dt} = \text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] + \text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}]$
- Razones de cambio de  $E$ :
  - ▶ cambios en el estado  $\rho$ :  $\text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] = \sum_j \dot{\rho}_j E_j$
  - ▶ cambios en  $H$ :  $\text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}] = \sum_j \rho_j \dot{E}_j$
- Recordemos que  $\mathbf{S}_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho) \rightarrow$  **función de  $\rho$**
- Por analogía con el caso clásico, es razonable definir:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{Q}} = \text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] \\ \dot{\mathbf{W}} = \text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}] \end{cases}$$

# Trabajo y calor en mecánica cuántica [1]

- Energía interna:  $\mathbf{E} = \langle \mathbf{H} \rangle = \text{tr}[\rho \mathbf{H}] \rightarrow \frac{d\mathbf{E}}{dt} = \text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] + \text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}]$
- Razones de cambio de  $E$ :
  - ▶ cambios en el estado  $\rho$ :  $\text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] = \sum_j \dot{\rho}_j E_j$
  - ▶ cambios en  $H$ :  $\text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}] = \sum_j \rho_j \dot{E}_j$
- Recordemos que  $\mathbf{S}_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho) \rightarrow$  **función de  $\rho$**
- Por analogía con el caso clásico, es razonable definir:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{Q}} = \text{tr}[\dot{\rho} \mathbf{H}] \\ \dot{\mathbf{W}} = \text{tr}[\rho \dot{\mathbf{H}}] \end{cases}$$

- Ampliamente usadas durante los últimos 45 años

[1] R. Alicki, J. Phys. A: Math. Gen. **12**, L103 (1979)

- 1 Sistemas abiertos
- 2 Trabajo y calor: de lo clásico a lo cuántico
- 3 Una formulación alternativa de la primera ley**
- 4 Comentarios finales

# Una formulación alternativa: motivación

- Clave: Teorema de Ehrenfest:

$$\frac{d\langle O \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial t} \right\rangle + i\langle [H, O] \rangle$$

- ▶ Permite calcular el valor esperado de cualquier observable  $O$  en **un sistema aislado**
- ▶  $[H, O] = HO - OH$  (conmutador)

# Una formulación alternativa: motivación

- Clave: Teorema de Ehrenfest:

$$\frac{d\langle O \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial t} \right\rangle + i\langle [H, O] \rangle$$

- ▶ Permite calcular el valor esperado de cualquier observable  $O$  en **un sistema aislado**
  - ▶  $[H, O] = HO - OH$  (conmutador)
- En particular, si  $H \neq H(t)$ :

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d\langle H \rangle}{dt} = 0 \rightarrow E = \text{cte.}$$

# Una formulación alternativa: motivación

- Clave: Teorema de Ehrenfest:

$$\frac{d\langle O \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial t} \right\rangle + i\langle [H, O] \rangle$$

- ▶ Permite calcular el valor esperado de cualquier observable  $O$  en **un sistema aislado**
  - ▶  $[H, O] = HO - OH$  (conmutador)
- En particular, si  $H \neq H(t)$ :

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d\langle H \rangle}{dt} = 0 \rightarrow E = \text{cte.}$$

- Consistente con el hecho de que sistemas aislados tienen energía constante  $\rightarrow$  puede considerarse la expresión de la primera ley para esos sistemas (trivial).

# Una formulación alternativa: motivación

- Clave: Teorema de Ehrenfest:

$$\frac{d\langle O \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial t} \right\rangle + i\langle [H, O] \rangle$$

- ▶ Permite calcular el valor esperado de cualquier observable  $O$  en **un sistema aislado**
  - ▶  $[H, O] = HO - OH$  (conmutador)
- En particular, si  $H \neq H(t)$ :

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d\langle H \rangle}{dt} = 0 \rightarrow E = \text{cte.}$$

- Consistente con el hecho de que sistemas aislados tienen energía constante  $\rightarrow$  puede considerarse la expresión de la primera ley para esos sistemas (trivial).
- Y en sistemas abiertos?

# Una formulación alternativa: motivación

- Clave: Teorema de Ehrenfest:

$$\frac{d\langle O \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial t} \right\rangle + i\langle [H, O] \rangle$$

- ▶ Permite calcular el valor esperado de cualquier observable  $O$  en **un sistema aislado**
  - ▶  $[H, O] = HO - OH$  (conmutador)
- En particular, si  $H \neq H(t)$ :

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d\langle H \rangle}{dt} = 0 \rightarrow E = \text{cte.}$$

- Consistente con el hecho de que sistemas aislados tienen energía constante  $\rightarrow$  puede considerarse la expresión de la primera ley para esos sistemas (trivial).
- Y en sistemas abiertos? **Necesitamos generalizar el teorema de Ehrenfest**

# Teorema de Ehrenfest - Generalización

Esbozo de la demostración:

- $$\begin{cases} \langle O \rangle = \text{tr}(\rho O) \\ \rho = \sum_j \lambda_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \end{cases}$$

# Teorema de Ehrenfest - Generalización

Esbozo de la demostración:

$$\bullet \begin{cases} \langle O \rangle = \text{tr}(\rho O) \\ \rho = \sum_j \lambda_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \end{cases} \rightarrow \langle O \rangle = \sum_j \lambda_j \langle \psi_j | O | \psi_j \rangle$$
$$\Rightarrow \frac{d\langle O \rangle}{dt} = \sum_j \frac{d\lambda_j}{dt} \langle \psi_j | O | \psi_j \rangle + \sum_j \lambda_j \frac{d\langle \psi_j | O | \psi_j \rangle}{dt}$$

# Teorema de Ehrenfest - Generalización

Esbozo de la demostración:

$$\bullet \begin{cases} \langle O \rangle = \text{tr}(\rho O) \\ \rho = \sum_j \lambda_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \end{cases} \rightarrow \langle O \rangle = \sum_j \lambda_j \langle \psi_j | O | \psi_j \rangle$$
$$\Rightarrow \frac{d\langle O \rangle}{dt} = \sum_j \frac{d\lambda_j}{dt} \langle \psi_j | O | \psi_j \rangle + \sum_j \lambda_j \frac{d\langle \psi_j | O | \psi_j \rangle}{dt}$$

•  $\rho$  Hermítica  $\rightarrow$  autovectores ortonormales:

$$\exists T \text{ unitaria } (TT^\dagger = \mathbb{I}) / |\psi_j(\mathbf{t} + d\mathbf{t})\rangle = T(\mathbf{t}, \mathbf{t} + d\mathbf{t}) |\psi_j(\mathbf{t})\rangle$$

# Teorema de Ehrenfest - Generalización

Esbozo de la demostración:

$$\bullet \begin{cases} \langle O \rangle = \text{tr}(\rho O) \\ \rho = \sum_j \lambda_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \end{cases} \rightarrow \langle O \rangle = \sum_j \lambda_j \langle \psi_j | O | \psi_j \rangle$$
$$\Rightarrow \frac{d\langle O \rangle}{dt} = \sum_j \frac{d\lambda_j}{dt} \langle \psi_j | O | \psi_j \rangle + \sum_j \lambda_j \frac{d\langle \psi_j | O | \psi_j \rangle}{dt}$$

•  $\rho$  Hermítica  $\rightarrow$  autovectores ortonormales:

$$\exists T \text{ unitaria } (TT^\dagger = \mathbb{I}) / |\psi_j(\mathbf{t} + d\mathbf{t})\rangle = T(\mathbf{t}, \mathbf{t} + d\mathbf{t}) |\psi_j(\mathbf{t})\rangle$$

•  $T(\mathbf{t}, \mathbf{t} + d\mathbf{t}) \simeq \mathbb{I} - i\Omega d\mathbf{t}$ ,  $\Omega$  Hermítico

## Teorema de Ehrenfest - Generalización (II) [7]

- El resultado es:

$$\frac{d\langle \mathbf{O} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \mathbf{O}}{\partial t} \right\rangle + i\langle [\Omega, \mathbf{O}] \rangle + \sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | \mathbf{O} | \psi_j \rangle$$

## Teorema de Ehrenfest - Generalización (II) [7]

- El resultado es:

$$\frac{d\langle \mathbf{O} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \mathbf{O}}{\partial t} \right\rangle + i\langle [\Omega, \mathbf{O}] \rangle + \sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | \mathbf{O} | \psi_j \rangle$$

- Comparando con  $\frac{d\langle \mathbf{O} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \mathbf{O}}{\partial t} \right\rangle + i\langle [H, \mathbf{O}] \rangle$ , notamos que:
  - ▶  $\Omega$  juega el rol de  $H$

## Teorema de Ehrenfest - Generalización (II) [7]

- El resultado es:

$$\frac{d\langle O \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial t} \right\rangle + i\langle [\Omega, O] \rangle + \sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | O | \psi_j \rangle$$

- Comparando con  $\frac{d\langle O \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial t} \right\rangle + i\langle [H, O] \rangle$ , notamos que:
  - ▶  $\Omega$  juega el rol de  $H$
  - ▶ Nuevo término:  $\sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | O | \psi_j \rangle$  **vinculado a la variación de los autovalores** (recordar esto!)

## Teorema de Ehrenfest - Generalización (II) [7]

- El resultado es:

$$\frac{d\langle \mathbf{O} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \mathbf{O}}{\partial t} \right\rangle + i\langle [\Omega, \mathbf{O}] \rangle + \sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | \mathbf{O} | \psi_j \rangle$$

- Comparando con  $\frac{d\langle O \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial t} \right\rangle + i\langle [H, O] \rangle$ , notamos que:
  - ▶  $\Omega$  juega el rol de  $H$
  - ▶ Nuevo término:  $\sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | \mathbf{O} | \psi_j \rangle$  **vinculado a la variación de los autovalores** (recordar esto!)
- En particular, aplicado al propio  $H$  (recordar que  $E = \langle H \rangle$ ):

$$\frac{dE}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} + i[\Omega, H] \right\rangle + \sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | H | \psi_j \rangle$$

[7] A. Vallejo, A. Romanelli, R. Donangelo, en revisión (2023)

# Primera ley: versión alternativa

- Demostramos:

$$\frac{dE}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} + i[\Omega, H] \right\rangle + \sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | H | \psi_j \rangle$$

# Primera ley: versión alternativa

- Demostramos:

$$\frac{dE}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} + i[\Omega, H] \right\rangle + \sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | H | \psi_j \rangle$$

- Observación clave:  $S_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho) \rightarrow$  no es función de todo el operador densidad, sino solamente de sus autovalores  $\lambda_j$ :

$$\dot{S}_{vN} = - \sum_j \dot{\lambda}_j \log(\lambda_j)$$

# Primera ley: versión alternativa

- Demostramos:

$$\frac{dE}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} + i[\Omega, H] \right\rangle + \sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | H | \psi_j \rangle$$

- Observación clave:  $S_{vN} = -k_B \text{tr}(\rho \log \rho) \rightarrow$  no es función de todo el operador densidad, sino solamente de sus autovalores  $\lambda_j$ :

$$\dot{S}_{vN} = - \sum_j \dot{\lambda}_j \log(\lambda_j)$$

- Notando que solo el último término es concomitante con el cambio de entropía, se propone:

$$\Rightarrow \begin{cases} \dot{Q} \equiv \sum_j \dot{\lambda}_j \langle \psi_j | H | \psi_j \rangle \\ \dot{W} \equiv \langle \mathcal{P} \rangle, \quad \mathcal{P} = \frac{\partial H}{\partial t} + i[\Omega, H] \end{cases}$$

- Consistente con Alipour *et al.* (2022), Ahmadi *et al.* (2023)

# Operador potencia. Discusión

- Como  $H, \Omega$  Hermíticos  $\rightarrow \mathcal{P} = \dot{H} + i[\Omega, H]$  Hermítico  $\rightarrow$  asociado a un observable  $\rightarrow$  **OPERADOR POTENCIA**

# Operador potencia. Discusión

- Como  $H, \Omega$  Hermíticos  $\rightarrow \mathcal{P} = \dot{H} + i[\Omega, H]$  Hermítico  $\rightarrow$  asociado a un observable  $\rightarrow$  **OPERADOR POTENCIA**
- $\dot{\mathcal{W}} = \langle \mathcal{P} \rangle$  tiene dos contribuciones:
  - ▶  $\langle \dot{H} \rangle = \text{tr}(\rho \dot{H})$  (contribución usual)
  - ▶  $i\langle [\Omega, H] \rangle$  (asociada a variación de los autoestados)

# Operador potencia. Discusión

- Como  $H, \Omega$  Hermíticos  $\rightarrow \mathcal{P} = \dot{H} + i[\Omega, H]$  Hermítico  $\rightarrow$  asociado a un observable  $\rightarrow$  **OPERADOR POTENCIA**
- $\dot{\mathcal{W}} = \langle \mathcal{P} \rangle$  tiene dos contribuciones:
  - ▶  $\langle \dot{H} \rangle = \text{tr}(\rho \dot{H})$  (contribución usual)
  - ▶  $i\langle [\Omega, H] \rangle$  (asociada a variación de los autoestados)
- Si no hay interacción con el ambiente o si esta no modifica la rotación de los autoestados de  $\rho$ , la nueva contribución se anula

# Operador potencia. Discusión

- Como  $H, \Omega$  Hermíticos  $\rightarrow \mathcal{P} = \dot{H} + i[\Omega, H]$  Hermítico  $\rightarrow$  asociado a un observable  $\rightarrow$  **OPERADOR POTENCIA**
- $\dot{\mathcal{W}} = \langle \mathcal{P} \rangle$  tiene dos contribuciones:
  - ▶  $\langle \dot{H} \rangle = \text{tr}(\rho \dot{H})$  (contribución usual)
  - ▶  $i\langle [\Omega, H] \rangle$  (asociada a variación de los autoestados)
- Si no hay interacción con el ambiente o si esta no modifica la rotación de los autoestados de  $\rho$ , la nueva contribución se anula
- Principio de incertidumbre:  $\langle i[\Omega, H] \rangle$  **es una medida de la incompatibilidad de los operadores**

# Operador potencia. Discusión

- Como  $H, \Omega$  Hermíticos  $\rightarrow \mathcal{P} = \dot{H} + i[\Omega, H]$  Hermítico  $\rightarrow$  asociado a un observable  $\rightarrow$  **OPERADOR POTENCIA**
- $\dot{\mathcal{W}} = \langle \mathcal{P} \rangle$  tiene dos contribuciones:
  - ▶  $\langle \dot{H} \rangle = \text{tr}(\rho \dot{H})$  (contribución usual)
  - ▶  $i\langle [\Omega, H] \rangle$  (asociada a variación de los autoestados)
- Si no hay interacción con el ambiente o si esta no modifica la rotación de los autoestados de  $\rho$ , la nueva contribución se anula
- Principio de incertidumbre:  $\langle i[\Omega, H] \rangle$  **es una medida de la incompatibilidad de los operadores**
  - ▶ **Mayor incompatibilidad implica mayor desviación respecto a la evolución natural**

# Operador potencia. Discusión

- Como  $H, \Omega$  Hermíticos  $\rightarrow \mathcal{P} = \dot{H} + i[\Omega, H]$  Hermítico  $\rightarrow$  asociado a un observable  $\rightarrow$  **OPERADOR POTENCIA**
- $\dot{\mathcal{W}} = \langle \mathcal{P} \rangle$  tiene dos contribuciones:
  - ▶  $\langle \dot{H} \rangle = \text{tr}(\rho \dot{H})$  (contribución usual)
  - ▶  $i\langle [\Omega, H] \rangle$  (asociada a variación de los autoestados)
- Si no hay interacción con el ambiente o si esta no modifica la rotación de los autoestados de  $\rho$ , la nueva contribución se anula
- Principio de incertidumbre:  $\langle i[\Omega, H] \rangle$  **es una medida de la incompatibilidad de los operadores**
  - ▶ **Mayor incompatibilidad implica mayor desviación respecto a la evolución natural  $\rightarrow$  se requiere más trabajo**

# Operador potencia. Discusión

- Como  $H, \Omega$  Hermíticos  $\rightarrow \mathcal{P} = \dot{H} + i[\Omega, H]$  Hermítico  $\rightarrow$  asociado a un observable  $\rightarrow$  **OPERADOR POTENCIA**
- $\dot{\mathcal{W}} = \langle \mathcal{P} \rangle$  tiene dos contribuciones:
  - ▶  $\langle \dot{H} \rangle = \text{tr}(\rho \dot{H})$  (contribución usual)
  - ▶  $i\langle [\Omega, H] \rangle$  (asociada a variación de los autoestados)
- Si no hay interacción con el ambiente o si esta no modifica la rotación de los autoestados de  $\rho$ , la nueva contribución se anula
- Principio de incertidumbre:  $\langle i[\Omega, H] \rangle$  **es una medida de la incompatibilidad de los operadores**
  - ▶ **Mayor incompatibilidad implica mayor desviación respecto a la evolución natural  $\rightarrow$  se requiere más trabajo**

# Operador potencia. Discusión

- Como  $H, \Omega$  Hermíticos  $\rightarrow \mathcal{P} = \dot{H} + i[\Omega, H]$  Hermítico  $\rightarrow$  asociado a un observable  $\rightarrow$  **OPERADOR POTENCIA**
- $\dot{\mathcal{W}} = \langle \mathcal{P} \rangle$  tiene dos contribuciones:
  - ▶  $\langle \dot{H} \rangle = \text{tr}(\rho \dot{H})$  (contribución usual)
  - ▶  $i\langle [\Omega, H] \rangle$  (asociada a variación de los autoestados)
- Si no hay interacción con el ambiente o si esta no modifica la rotación de los autoestados de  $\rho$ , la nueva contribución se anula
- Principio de incertidumbre:  $\langle i[\Omega, H] \rangle$  **es una medida de la incompatibilidad de los operadores**
  - ▶ **Mayor incompatibilidad implica mayor desviación respecto a la evolución natural  $\rightarrow$  se requiere más trabajo**
- Muy abstracto... veamos un ejemplo concreto

- 1 Sistemas abiertos
- 2 Trabajo y calor: de lo clásico a lo cuántico
- 3 Una formulación alternativa de la primera ley
- 4 Comentarios finales**

# Resumen

- Generalizamos el teorema de Ehrenfest a sistemas abiertos. Ello permite:

# Resumen

- Generalizamos el teorema de Ehrenfest a sistemas abiertos. Ello permite:
  - ▶ Deducir definiciones alternativas de calor y trabajo más próximas al espíritu original de Clausius, consistentes con otras propuestas recientes
  - ▶ Cuantificar los efectos térmicos y mecánicos en los valores esperados de cualquier observable
  - ▶ Mostrar que, en algunos casos, la potencia mecánica es un observable, y dar una interpretación física de la misma (rotaciones en  $\mathcal{H}$ )
  - ▶ Proporcionar nuevas interpretaciones de procesos clásicos

# Resumen

- Generalizamos el teorema de Ehrenfest a sistemas abiertos. Ello permite:
  - ▶ Deducir definiciones alternativas de calor y trabajo más próximas al espíritu original de Clausius, consistentes con otras propuestas recientes
  - ▶ Cuantificar los efectos térmicos y mecánicos en los valores esperados de cualquier observable
  - ▶ Mostrar que, en algunos casos, la potencia mecánica es un observable, y dar una interpretación física de la misma (rotaciones en  $\mathcal{H}$ )
  - ▶ Proporcionar nuevas interpretaciones de procesos clásicos
- Algunas líneas abiertas:
  - ▶ Entrelazamiento como consecuencia de la asimetría de calores
  - ▶ Reinterpretación de otros procesos
  - ▶ Análisis de ciclos cuánticos de potencia y, en particular, de su eficiencia

Muchas gracias