

TRABAJO EN SISTEMAS CUÁNTICOS

Augusto J. Roncaglia

Departamento de Física, FCEyN-UBA e Instituto de Física de Buenos Aires (UBA-CONICET)
Pabellón 1, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina
(Email: augusto@df.uba.ar)

Resumen

El trabajo es un concepto central en la termodinámica, y para procesos que ocurren fuera de equilibrio resulta ser una cantidad estocástica caracterizada por una distribución de probabilidad. En el último tiempo ha habido un gran interés en el estudio de sistemas cuánticos fuera del equilibrio y conceptos fundamentales de la termodinámica, tales como el trabajo, han sido extendidos a estos sistemas. En este artículo de revisión ilustramos nuestros aportes recientes al estudio de la medición de trabajo en sistemas cuánticos, y de la transición cuántico-clásica en la distribución de trabajo.

Palabras clave: Termodinámica cuántica; trabajo; teoremas de fluctuación.

Abstract

Work in quantum systems. Work is a central concept in the context of thermodynamics, and for non-equilibrium systems is a stochastic quantity characterized by a probability distribution. In the last decade there was increased interest in the study of quantum systems out of equilibrium, and fundamental concepts such as work have been extended to the quantum regime. In this revision article we illustrate our proposals that allow to measure work in quantum systems, and enable the study of the quantum-to-classical transition in the work probability distribution.

Key words: Quantum thermodynamics; work; fluctuation theorems.

Introducción

La termodinámica ha demostrado ser una teoría exitosa en la descripción del comportamiento de sistemas macroscópicos. Basada en el concepto de estados de equilibrio establece, por ejemplo, límites al trabajo que puede ser extraído en un determinado proceso. En particular, la energía libre está asociada al máximo trabajo que en promedio es posible extraer de un sistema en contacto con un baño térmico. Generalmente, el trabajo extraído en una única realización de un dado proceso es una cantidad fluctuante, pero para

sistemas de muchas partículas estas fluctuaciones pueden ser despreciables. Sin embargo en sistemas de pocas partículas fuera equilibrio, estas fluctuaciones comienzan a ser apreciables y el trabajo resulta ser una variable estocástica descrita por una determinada distribución de probabilidad. Uno de los resultados más interesantes de las últimas décadas en mecánica estadística es la derivación de los teoremas de fluctuación. Notablemente, las identidades de Jarzynski [1] y Crooks [2] relacionan mediante una igualdad las fluctuaciones de trabajo en sistemas fuera del equilibrio, con la diferencia de energía libre entre estados de equilibrio. Estos teoremas resultaron ser útiles para evaluar experimentalmente energías libres en la nanoescala [3,4]. Con el avance tecnológico de los últimos años, que permite controlar con extrema precisión la dinámica de un número pequeño de sistemas cuánticos [5,6], es posible ir más allá y acceder experimentalmente al régimen cuántico. Es así que adquiere ya sentido práctico estudiar los principios termodinámicos en estos sistemas y surge el área conocida actualmente como termodinámica cuántica [7]. Esta es un área interdisciplinaria que intenta comprender problemas tales como el surgimiento de las leyes de la termodinámica a partir del sustrato cuántico, las limitaciones y ventajas que surgen a partir de considerar máquinas térmicas que operan en el régimen cuántico, la relación entre la termodinámica y teoría cuántica de la información, propiedades de sistemas cuánticos fuera del equilibrio, entre otros. En el régimen cuántico, conceptos tales como el trabajo o calor requieren ser redefinidos ya que su definición clásica carece de sentido en estos sistemas. Para un sistema cuántico aislado, el trabajo realizado puede ser definido en términos de la diferencia de energía medida durante la realización de un determinado proceso. Las mediciones de energía, tal como sucede con toda medición en mecánica cuántica, traen aparejado el colapso de la función de onda a un autoestado de energía. De esta forma, además de las fluctuaciones del estado inicial que podrían tener origen térmico, aparecen naturalmente las fluctuaciones cuánticas. Si uno acepta esta definición de trabajo es posible extender los teoremas de fluctuación a sistemas cuánticos [8,9].

1. Trabajo en sistemas cuánticos como medición proyectiva generalizada

El trabajo en sistemas cuánticos no es un observable usual ya que no es posible construir un operador hermítico que lo represente. Esto se debe simplemente a que los valores posibles de trabajo se encuentran determinados por las posibles diferencias de energía, cuya cantidad es típicamente más grande que la dimensión del espacio de estados. Por lo tanto, un operador hermítico que represente al trabajo no puede existir. Esto no implica, por cierto, que el trabajo no puede ser medido. Por el contrario, la estrategia natural para medir trabajo en un sistema sometido a un proceso unitario U_S , donde el Hamiltoniano del sistema cambia durante un determinado intervalo de tiempo, consiste en medir la energía en los tiempos inicial y final. De esta manera, es posible definir la distribución de probabilidad para el trabajo como:

$$P(W) = \sum_{n,m} p_n p_{n,m} \delta[W - (\tilde{E}_m - E_n)] \quad (1)$$

donde $W = \tilde{E}_m - E_n$ son los valores posibles de trabajo en una dada realización, E_n y \tilde{E}_m son los autovalores de los Hamiltonianos inicial y final respectivamente, p_n es la probabilidad de medir E_n en el tiempo inicial, $p_{n,m}$ es la probabilidad condicional de transición (la probabilidad de que dado que inicialmente se detectó E_n al final se obtenga \tilde{E}_m) y δ es la delta de Dirac. Considerando que el sistema inicialmente se encuentra en equilibrio térmico a temperatura inversa β , y luego es sometido a un proceso unitario donde el Hamiltoniano inicial H cambia a un Hamiltoniano final \tilde{H} resulta sencillo derivar la igualdad de Jarzynski:

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = e^{-\beta \Delta F} \quad (2)$$

donde el promedio se evalúa de acuerdo a la distribución de probabilidad $P(W)$ y ΔF es la variación de energía libre de Helmholtz considerando los Hamiltonianos inicial y final a la temperatura de equilibrio inicial. De esta manera, es posible relacionar propiedades del sistema fuera de equilibrio, como la distribución de probabilidad de trabajo, y cantidades de equilibrio, como la energía libre es independiente de la evolución particular del sistema.

Realizar la medición a dos tiempos de la energía en sistemas cuánticos resulta complicado [10], principalmente debido a que inevitablemente las mediciones proyectivas perturban al sistema cuántico. Sin embargo, recientemente se pudo obtener experimentalmente la distribución de trabajo utilizando iones atrapados [11]. Un método alternativo que fue propuesto para evaluar la distribución cuántica de trabajo se basa en estimar la transformada de Fourier (o función característica) [12,13] y fue implementado en sistemas simples de RMN [14]. El tercer método fue propuesto por nuestro grupo y consiste medir el trabajo utilizando una única medición [15].

La idea principal detrás del método que permite evaluar el trabajo en un sistema cuántico mediante una única medición, radica principalmente en la siguiente observación: la medición de trabajo no es más que una medición generalizada (conocida como POVM) [15]. Este es el tipo de medición más general que se puede definir en mecánica cuántica, y siempre puede ser realizada acoplando al sistema con otro auxiliar midiendo proyectivamente sobre el sistema completo. Este método también puede ser descrito mediante un algoritmo cuántico que permitiría obtener un muestreo fiel y eficiente de $P(W)$ en una computadora cuántica [15]. Por otro lado, una estrategia simple para llevar a cabo la medición de trabajo se encuentra descrita en el circuito de la

Fig.1. En este caso consideramos al sistema S sobre el cual estamos interesados en medir el trabajo realizado en alguna realización de un proceso, y un sistema auxiliar A descrito por un grado de libertad continuo con variables conjugadas de posición y momento. El procedimiento entonces consiste en primero implementar una interacción inicial entre S y A descrita por el siguiente operador evolución $U = e^{-i\lambda \hat{x} H}$, donde \hat{x} es el operador de posición en A y λ es una constante de interacción. Esto induce un registro coherente en el momento de A que es proporcional al valor de la energía S. Se puede notar que este tipo de interacción es similar a la que se genera entre el momento y espín de las partículas en el célebre experimento de Stern-Gerlach. Luego ocurre el proceso sobre el sistema, descrito por la operación unitaria U_S , y posteriormente una interacción final entre ambos sistemas descrita por $\tilde{U} = e^{i\lambda \hat{x} \tilde{H}}$. Esta evolución conjunta permite crear finalmente un registro coherente en el estado de A de todos los posibles valores de trabajo. Una medición final de la variable momento de A revela un determinado valor de W con densidad de probabilidad $P(W)$ [15].

Con respecto a su implementación experimental, existen propuestas para su aplicación en distintos sistemas. En [16] presentamos dos propuestas para medir trabajo y calor en ensambles de átomos fríos. Utilizando la luz como sistema auxiliar, y una interacción entre luz-materia basada en la rotación de Faraday cuántica, es posible acceder a la probabilidad de trabajo haciendo una simple medición homodina de la luz. La idea central consiste en acoplar los átomos con un grado de libertad continuo de la luz caracterizado por las cuadraturas de la luz y consta de tres pasos: en primer lugar los átomos interactúan con la luz de manera que se crean correlaciones entre ambos, luego la luz es almacenada en una memoria cuántica y los átomos son sometidos al proceso unitario U_S , posteriormente se recupera la luz de la memoria y se redirecciona nuevamente hacia los átomos de manera que interactúan por segunda vez. La distribución de trabajo y calor de los átomos se encuentra de esta manera codificada en las cuadraturas de la luz y finalmente una detección homodina de la luz revela el valor de trabajo en una dada realización.

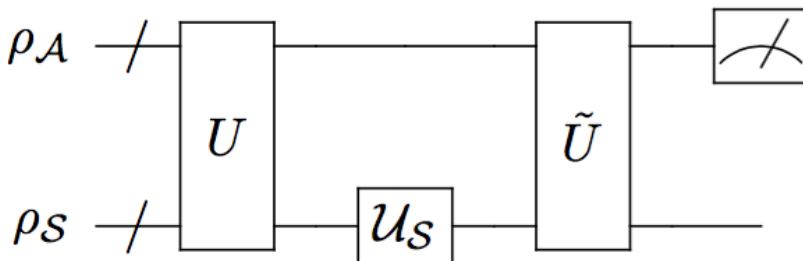


Fig. 1. Circuito cuántico que representa la medición de trabajo sobre un sistema A mediante una única medición generalizada. El sistema S interactúa con otro sistema auxiliar A donde se registran los valores de trabajo y una medición final revela esos valores con la probabilidad adecuada.

Por otro lado, en [15] también propusimos medir trabajo en condensados de Bose-Einstein utilizando un chip [17]. En este caso el sistema en cuestión se encuentra formado por los dos niveles más bajos de energía de átomos de ^{87}Rb que forman el condensado, y el sistema auxiliar se encuentra representado por el grado de libertad continuo asociado con el momento de los átomos. De esta manera, el condensado, que se encuentra atrapado inicialmente en una región cercana al chip, se deja caer por acción de la gravedad. Luego el chip permite aplicar pulsos de corriente a diferentes tiempos que generan un campo magnético no-uniforme acoplado al grado interno de libertad (asociado con los niveles de energía) con el momento de los átomos. De esta forma, es posible implementar las operaciones U y \tilde{U} , que resulta ser el mismo tipo de interacción generada en un experimento de Stern-Gerlach. Luego de la aplicación de ambos pulsos, en el estado momento de los átomos se encuentra codificado el valor de trabajo. Finalmente, pasado un determinado tiempo donde los átomos caen libremente, una medición de la posición de los átomos permite evaluar los valores de trabajo, cuyos valores aparecerán de acuerdo con la distribución $P(W)$. Es de destacar que pudimos implementar experimentalmente esta última propuesta verificando también la igualdad de Jarzynski a nivel cuántico, trabajo que fue fruto de una colaboración con el grupo de la Universidad de Ben-Gurion, y sus resultados serán publicados en breve.

2. Transición cuántico-clásica en la distribución de trabajo

La definición de trabajo en sistemas cuánticos, como vimos anteriormente, requiere la medición de la energía en dos tiempos. Mientras que clásicamente se pueden determinar las trayectorias y determinar así el valor de trabajo en un determinado proceso sin perturbar al sistema, la misma idea no puede ser aplicada a sistemas cuánticos ya que una medición inevitablemente perturba el sistema. Es así que existe una diferencia fundamental entre estas definiciones. En un intento de reconciliar estas ideas, la transición cuántico-clásica en la distribución de trabajo ha sido estudiada en sistemas específicos como sistemas armónicos [18-20], en sistemas integrables mediante métodos semiclásicos analizando las probabilidades de transición [21], y numéricamente en un sistema caótico [22]. En lo que sigue haré un resumen de nuestros avances recientes en el estudio del principio de correspondencia para la probabilidad de trabajo, donde mediante el uso de sistemas caóticos logramos un tratamiento bastante más general [23].

Consideraremos un sistema cuántico cuyo Hamiltoniano H_ξ depende de un parámetro de control ξ . Inicialmente el sistema se encuentra en equilibrio térmico a una temperatura inversa proporcional a β . Luego, el sistema se desacopla del baño térmico, y el parámetro de control cambia súbitamente desde $\xi_0 \rightarrow \xi_f$, apartando al sistema fuera del equilibrio. El trabajo resultante de este

proceso se encuentra descrito por una distribución de probabilidad que nos interesará determinar. El enfoque que utilizaremos para estudiar el principio de correspondencia se basa en el uso de la función característica [18,24], que se encuentra definida mediante la transformada de Fourier de la distribución de trabajo:

$$G(u) = \int dW e^{-iuW} P(W) \quad (3)$$

Es sencillo de ver que la función característica cuántica $G^Q(u)$ para un sistema que se encuentra sometido a un cambio abrupto del Hamiltoniano se puede expresar como:

$$G^Q(u) = \langle e^{iuH_{\xi_f}} e^{-iuH_{\xi_0}} \rangle = Tr \left[e^{iuH_{\xi_f}} e^{-iuH_{\xi_0}} \rho_\beta \right], \quad (4)$$

donde ρ_β es el estado térmico. A partir de esta expresión, se puede notar que u tiene las características asociadas al tiempo en una evolución cuántica. Podemos ver que si u es reemplazado por t/\hbar , $G^Q(u)$ puede ser interpretada como la amplitud de probabilidad entre dos evoluciones diferentes, o simplemente la amplitud promediada del eco de Loschmidt. Nuestro enfoque está basado fuertemente en un método semiclásico derivado en [25-27]. Este método resulta ser eficiente para computar la amplitud de fidelidad y además tiene aplicaciones en diferentes áreas como el estudio de la dinámica molecular, el cómputo de la densidad local de estados en sistemas caóticos, entre otros. Esta representación se la conoce como *dephasing representation (DR)*.

Nuestro sistema se encontrará descrito por un Hamiltoniano $H_\xi = H_0 + \xi V$ y en un dado instante de tiempo cambia súbitamente $\xi_0 \rightarrow \xi_f$. Luego, la función característica en la *DR* puede ser escrita como:

$$G^{DR}(u) = \int d^{2D} x_0 \mathcal{W}_\beta(x_0) \exp[i \Delta S(x_0, u/\hbar)/\hbar] \quad (5)$$

donde D es el número de grados de libertad del sistema, $x_0 \equiv (x, p) \in \mathbb{R}^{2D}$, $\Delta S(x_0, t) = \int_0^t d\tau \Delta H(x(\tau))$ puede ser interpretada como una diferencia de acción, $\Delta H \equiv H_{\xi_f} - H_{\xi_0}$, $x(\tau)$ son las coordenadas en el espacio de fases a tiempo τ de una trayectoria generada por el Hamiltoniano H_{ξ_0} cuyas condiciones iniciales son x_0 , y $\mathcal{W}_\beta(x_0)$ es la función de Wigner del estado de Gibbs del sistema evaluada en x_0 . Dado que la función de Wigner es lineal, el estado térmico del sistema se encuentra representado por una función de Wigner que es una suma convexa de las funciones de Winger de los autoestados del sistema cuyos pesos corresponden a la distribución de Boltzmann. La siguiente aproximación que utilizaremos se conoce como conjetura de ergodicidad cuántica [28-29], la cual

establece que: la función de Wigner de un autoestado típico de energía E , de un Hamiltoniano cuya contraparte clásica es caótica puede ser aproximada por la densidad de probabilidad clásica de Liouville en una capa de energía E del Hamiltoniano. Es decir, la función de Wigner de los autoestados de energía de estos Hamiltonianos puede aproximarse por una función constante y correctamente normalizada que es diferente de cero sólo sobre los puntos del espacio de fases en la capa de energía correspondiente. Aplicando estas aproximaciones a la Ec. (5) arribamos a la siguiente expresión semiclásica (SC) para la función característica [23]:

$$G^{SC}(u) = \int d^{2D} x_0 \frac{e^{-iuH_{\xi_0}}}{Z_{\xi_0}^C} \exp[i \Delta S(x_0, u/\hbar)/\hbar] \quad (6)$$

donde $Z_{\xi_0}^C$ es la función partición clásica del sistema correspondiente al estado inicial de equilibrio. Esta es una expresión simple que resulta ser eficiente para el cálculo de la función característica en sistemas caóticos. Además, es posible mostrar analíticamente que en el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$, manteniendo todas las cantidades clásicas fijas, y aplicando la transformada de Fourier inversa a la función característica, podemos recuperar la distribución clásica (C) [23]:

$$P_{\hbar \rightarrow 0}^{SC}(W) = \frac{1}{2\pi} \int du e^{-iuW} G_{\hbar \rightarrow 0}^{SC}(u) = P^C(W) \quad (7)$$

Es así que la expresión derivada anteriormente nos permite relacionar de manera explícita la distribución de trabajo cuántica con su contraparte clásica.

Como vimos, la expresión obtenida en principio puede ser utilizada en sistemas caóticos. A modo de ejemplo mostraremos su aplicación a un modelo específico. En particular, consideramos una partícula cuántica en un billar desimetrizado. Evaluamos la distribución de trabajo debida a una perturbación súbita del sistema por una función potencial ξV , que consiste en un conjunto de funciones Gaussianas centradas en diferentes puntos del espacio de fases [23]. Este sistema resulta de interés, ya que es posible obtener la función característica cuántica exacta por métodos numéricos, y luego comparar con la expresión semiclásica derivada anteriormente Ec. (6). La evaluación semiclásica resulta simple ya que la convergencia del método es rápida y requiere el cómputo de la evolución clásica del sistema sobre una cantidad pequeña de condiciones iniciales en el espacio de fases.

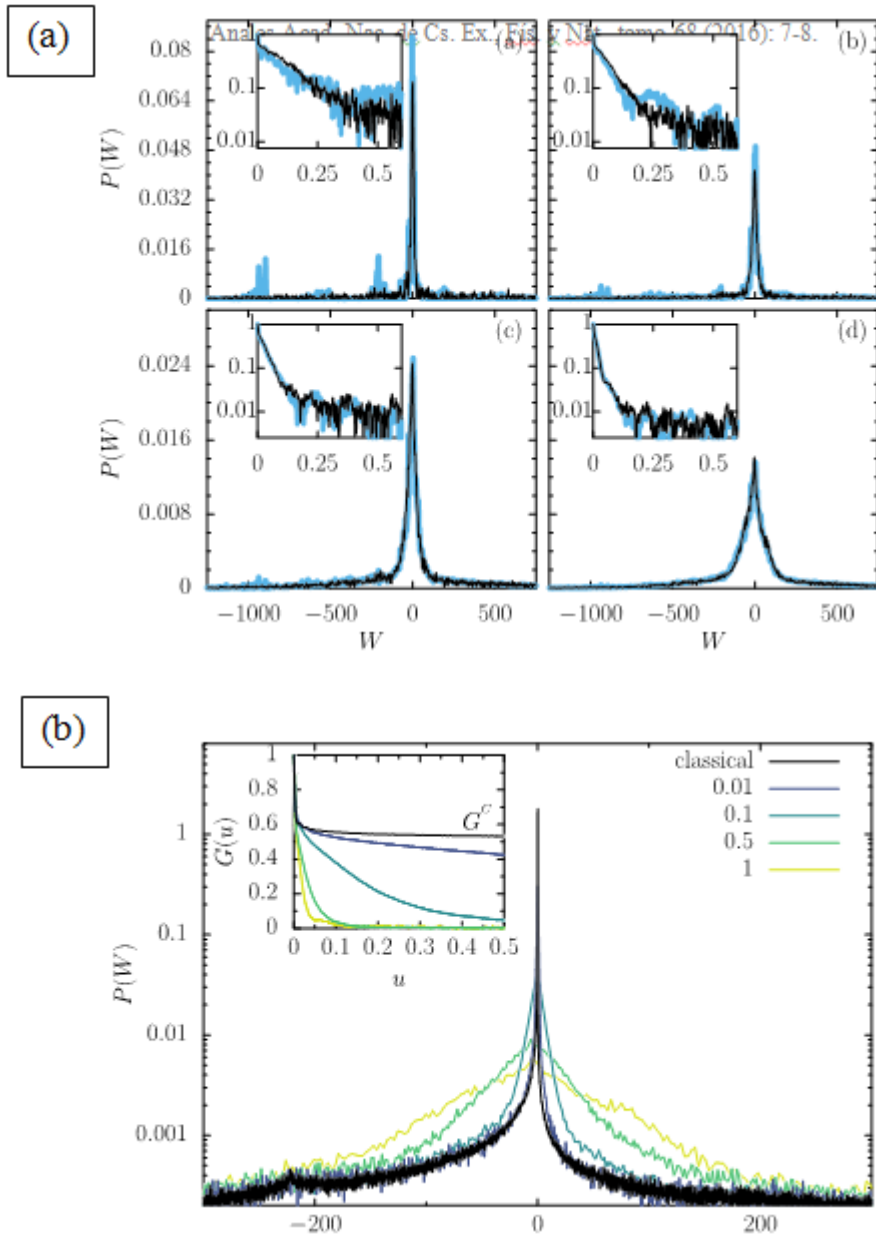


Fig. 2. (a) Densidad de probabilidad de trabajo cuántica (celeste) y semiclásica (negro) para diferentes temperaturas, desde (a)-(d): $\beta = 2^{-6}, 2^{-8}, 2^{-10}, 2^{-12}$. En el añadido de cada figura mostramos la función característica correspondiente. (b) Distribuciones clásicas y semiclásicas de trabajo para $\beta = 2^{-12}$, y $\hbar = 0.01, 0.1, 0.5, 1$, donde se puede ver la convergencia de la distribución de probabilidad en el límite $\hbar \rightarrow 0$. En el añadido también se observa la función característica en estos casos. Figuras de [15].

En la Fig. 2.a se puede observar que el método semiclásico provee una buena aproximación a la distribución cuántica de trabajo que mejora a medida que aumenta la temperatura. Por otro lado, en la Fig. 2.b se observa

cómo la distribución de probabilidad semiclassical converge a la distribución clásica en el límite $\hbar \rightarrow 0$.

Por último, podemos notar que un proceso genérico se puede representar mediante una evolución unitaria durante un determinado tiempo, y en este caso la función característica cuántica se encuentra representada por $G^Q(u) = \text{Tr}[e^{iuH_{\xi_f}} \mathcal{U}_S e^{-iuH_{\xi_0}} \rho_\beta \mathcal{U}_S^\dagger]$, donde \mathcal{U}_S es la operación unitaria asociada al proceso. De esta manera, todo proceso puede ser interpretado como un cambio súbito del Hamiltoniano siempre que defina dicho Hamiltoniano de manera apropiada: $G^Q(u) = \text{Tr}[e^{iu \mathcal{U}_S^\dagger H_{\xi_f} \mathcal{U}_S} e^{-iuH_{\xi_0}} \rho_\beta]$. Basados en esta observación y en estudios preliminares, creemos que las ideas expuestas en [23] pueden ser extendidas a procesos más generales que ocurren en sistemas caóticos.

3. Conclusiones

El estudio de la termodinámica en sistemas cuánticos es un área de mucho interés actualmente. En este artículo se hizo una revisión del concepto de trabajo en sistemas cuánticos poniendo especial énfasis en nuestros aportes recientes. Mostramos una propuesta que permite acceder a la distribución de probabilidad de trabajo mediante una única medición y que es experimentalmente accesible, en particular para sistemas atómicos. Finalmente, nos concentramos en el estudio de la transición cuántico-clásica en la distribución de trabajo, donde mostramos un método semiclassical que permite obtener dicha distribución en ambos límites para sistemas caóticos que sufren un cambio súbito en su Hamiltoniano.

Agradecimientos

Agradezco el financiamiento de ANPCyT (PICT 2013-0621 y PICT 2014-3711), CONICET y UBACyT. El artículo se encuentra basado principalmente en las referencias [15,16,23] agradezco a mis colegas F. Cerisola, I. García-Mata, J. P. Paz y D. A. Wisniacki co-autores de estos trabajos.

Referencias

- [1] C. Jarzynski, *Phys. Rev. Lett.* 78, 2690 (1997).
- [2] G.E. Crooks, *Phys. Rev. E* 60, 2721 (1999).
- [3] J. Liphardt, S. Dumont, S. B. Smith, I. Tinoco & C. Bustamante, *Science* 296, 1832 (2002).
- [4] D. Collin, F. Ritort, C. Jarzynski, S.B. Smith, I. Tinoco & C. Bustamante, *Nature* 437, 231 (2005).
- [5] I. Bloch, J. Dalibard & W. Zwerger, *Rev. Modern Phys.* 80, 885 (2008).

- [6] D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe & D. Wineland, *Rev. Modern Phys.* 75, 281 (2003).
- [7] J. Goold, M. Huber, A. Riera, L. del Rio & P. Skrzypczyk, *J. Phys. A* 49, 143001 (2016).
- [8] J. Kurchan, cond-mat/0007360 (2000).
- [9] H. Tasaki, cond-mat/0009244 (2000).
- [10] G. Huber, F. Schmidt-Kaler, S. Deffner & E. Lutz, *Phys. Rev. Lett.* 101, 070403 (2008).
- [11] S. An, J.-N. Zhang, M. Um, D. Lv, Y. Lu, J. Zhang, Z.-Q. Yin, H. Quan & K. Kim, *Nature Phys.* 11, 193 (2015).
- [12] L. Mazzola, G. De Chiara & M. Paternostro, *Phys. Rev. Lett.* 110, 230602 (2013).
- [13] R. Dorner, S. Clark, L. Heaney, R. Fazio, J. Goold & V. Vedral, *Phys. Rev. Lett.* 110, 230601 (2013).
- [14] T.B. Batalhao, A.M. Souza, L. Mazzola, R. Auccaise, R.S. Sarthour, I.S. Oliveira, J. Goold, G. De Chiara, M. Paternostro & R. M. Serra, *Phys. Rev. Lett.* 113, 140601 (2014).
- [15] A.J. Roncaglia, F. Cerisola & J.P. Paz, *Phys. Rev. Lett.* 113, 250601 (2014).
- [16] G. De Chiara, A.J. Roncaglia & J. P. Paz, *New J. Phys.* 17, 035004 (2015).
- [17] S. Machluf, Y. Japha & R. Folman, *Nature Commun.* 4, 2424 (2013).
- [18] S. Deffner & E. Lutz, *Phys. Rev. E* 77, 021128 (2008).
- [19] P. Talkner, P.S. Burada & P. Hanggi, *Phys. Rev. E* 78, 011115 (2008).
- [20] P. Talkner, M. Morillo, J. Yi & P. Hanggi, *New J. Phys.* 15, 095001 (2013).
- [21] C. Jarzynski, H. Quan & S. Rahav, *Phys. Rev. X* 5, 031038 (2015).
- [22] L. Zhu, Z. Gong, B. Wu, H. Quan, *et al.*, *Phys. Rev. E* 93, 062108 (2016).
- [23] I. García-Mata, A.J. Roncaglia & D.A. Wisniacki, arXiv:1610.08874 (2016).
- [24] P. Talkner, E. Lutz & P. Hanggi, *Phys. Rev. E* 75, 050102 (2007).
- [25] J. Vaníček & E.J. Heller, *Phys. Rev. E* 68, 056208 (2003).
- [26] J. Vaníček, *Phys. Rev. E* 70, 055201 (2004).
- [27] J. Vaníček, *Phys. Rev. E* 73, 046204 (2006).
- [28] M.V. Berry, *J. Phys. A* 10, 2083 (1977).
- [29] A. Voros, in *Lecture Notes in Physics*, Vol. 93, edited by A.V.M.-J. Giannoni & J. Zinn-Justin, Springer, Berlin, 1979.

Manuscrito recibido el 6 de abril de 2017

Aceptado el 28 de abril de 2017.