Biblioteca Digital
F C E N - U B A

BIBLIOTECA CENTRAL LUIS F LELOIR
BIBLIOTECA CENTRAL LELOIR
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UBA

Tesis de Grado

Teoría de recursos de la termodinámica cuántica. Correlaciones en los procesos de formación de recursos

Sapienza, Facundo Fabián

2017

Este documento forma parte de las colecciones digitales de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en bibliotecadigital.exactas.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the digital collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in bibliotecadigital.exactas.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:
Sapienza, Facundo Fabián. (2017). Teoría de recursos de la termodinámica cuántica. Correlaciones en los procesos de formación de recursos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
https://hdl.handle.net/20.500.12110/seminario_nFIS000062_Sapienza

Cita tipo Chicago:
Sapienza, Facundo Fabián. "Teoría de recursos de la termodinámica cuántica. Correlaciones en los procesos de formación de recursos". Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2017. https://hdl.handle.net/20.500.12110/seminario_nFIS000062_Sapienza

EXACTAS UBA
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

UBA
Universidad de Buenos Aires

Dirección: Biblioteca Central Dr. Luis F. Leloir, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. **Contacto:** bibliotecadigital.exactas.uba.ar
Intendente Güiraldes 2160 - C1428EGA - Tel. (++54 +11) 4789-9293

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO DE FÍSICA JUAN JOSÉ GIAMBIAGI

Teoría de Recursos de la Termodinámica Cuántica

Correlaciones en los procesos de formación de recursos

TESIS DE LICENCIATURA EN CIENCIAS FÍSICAS

Facundo Fabián Sapienza

Director: Dr. Augusto Roncaglia

Noviembre de 2017

TEMA: Estudio del rol de las correlaciones en sistemas cuánticos a partir de los principios de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica.
ALUMNO: Facundo Fabián Sapienza
LU N° : 556/12
LUGAR DE TRABAJO: Departamento de Física Juan José Giambiagi, Ciudad Universitaria.
DIRECTORES DEL TRABAJO: Dr. Augusto Roncaglia
FECHA DE INICIACIÓN: septiembre de 2016
FECHA DE FINALIZACIÓN: noviembre de 2017
FECHA DE EXAMEN: 4 de diciembre de 2017
INFORME FINAL APROBADO POR:

Autor	Jurado .....
Director	Jurado .....
Profesor de Tesis de Licenciatura	Jurado .....

Índice general

Resumen **5**

Introducción **6**

Agradecimientos **13**

Notación **15**

1. Termodinámica Cuántica **17**
1.1. Preliminares 18
1.2. Reservorio térmico 20
1.3. Operadores termales 21
1.3.1. Gibbs-preserving maps 23
1.4. Wit 24
1.5. Evolución temporal 25

2. Teoría de Recursos en Termodinámica Cuántica **27**
2.1. Teoría de recursos 27
2.1.1. Teoría de recursos de no uniformidad 28
2.2. Condición necesaria y suficiente para las transformaciones térmicas 30
2.2.1. Termomayorización 33
2.2.2. Segundas leyes de la termodinámica cuántica 35
2.3. Trabajo en termodinámica cuántica 37
2.3.1. Trabajo de formación 37
2.3.2. Trabajo de extracción 39
2.3.3. Reversibilidad en termodinámica cuántica 41
2.4. Energía libre estándar en teoría de recursos 41
2.4.1. Transformaciones con infinitas copias 42
2.4.2. Transformaciones con error 43

2.4.3. Transformaciones con catalizadores 43

3. Correlaciones en Termodinámica Cuántica **44**
3.1. El problema 46
3.2. Caso $D = 2$ 51
3.3. Familia de estados $\mathcal{R}^*$-críticos 55
3.3.1. Reversibilidad 60
3.3.2. Densidad 61
3.3.3. Estados cuasi-térmicos 65
3.4. Límite termodinámico 68

4. Ciclo Térmico basado en Estados Correlacionados **72**
4.1. Transformación cíclica 72
4.2. Trabajo extraíble y eficiencia del ciclo 77
4.3. Límite asintótico de la eficiencia 78
4.3.1. Régimen $C_{N,m_0}E_0(p_A - p_D) \to 0$ 80
4.3.2. Régimen $C_{N,m_0}E_0(p_A - p_D) \to \infty$ 81
4.4. Trabajos anteriores 81

5. Generalización a Sistemas de Dimensión Arbitraria **84**
5.1. Solución del problema 85
5.2. Generalización de estados $\mathcal{R}^*$-críticos 88
5.2.1. Densidad y estados cuasi-térmicos 92
5.3. Límite termodinámico 93

Conclusiones **97**

A. Mayorización **100**

B. Entropía y divergencia de Renyi **103**

C. Demostraciones de termodinámica cuántica **108**

D. Demostración $N\langle E\rangle \in \mathcal{E}$ **113**

Referencias **115**

Resumen

En la presente tesis definimos lo que llamamos trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}$. El mismo es una medida de cual es la mínima cantidad de energía que es necesaria invertir para transformar el estado térmico de N copias de un sistema en un estado correlacionado de las N partes de manera tal que localmente cada copia se encuentre en un estado ρ fijo. Caracterizamos el trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}$ a la vez que encontramos una expresión para los estados correlacionados con menor costo energético. Destacamos una subfamilia de estos estados a los cuales denominamos estados $\mathcal{R}^*$-críticos. Los estados $\mathcal{R}^*$-críticos forman una familia de estados reversibles, densos en el espacio de estados y cuyo trabajo de formación $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}$ coincide con la diferencia de energía libre estándar ΔF_1 en el límite termodinámico. Dentro de este marco, mostramos que la diferencia de energía estándar de un estado es igual a la mínima energía que es necesaria invertir para crear un estado correlacionado localmente equivalente en el límite termodinámico. Por otro lado, los estados $\mathcal{R}^*$-críticos permiten definir ciclos térmicos de extracción de trabajo a escala nanoscópica. Caracterizamos el trabajo extraíble de cada repetición del ciclo y estudiamos la eficiencia η_C del mismo. Demostramos también que asintóticamente la eficiencia η_C coincide con la eficiencia de Carnot.

Introducción

Conociendo el árbol genealógico

Termodinámica y Mecánica Cuántica. Dos grandes teorías de dos generaciones distintas de la historia de la física.

La primera es una teoría de origen fenomenológico que relaciona magnitudes tales como energía, trabajo y calor en la descripción de sistemas macroscópicos en equilibrio. La termodinámica no se basa en el comportamiento específico de una o varias leyes de la naturaleza, sino busca el modelo más simple que refleja una característica universal de todas las leyes. Su poder recae en el hecho de que no busca entender los detalles microscópicos de un sistema en particular. Por el contrario, intenta poner límites a los procesos físicos permitidos y establece relaciones entre cantidades aparentemente descorrelacionadas. La termodinámica, inalterable, ha sobrevivido a todos los cambios de paradigma en el escenario de la física, en las palabras de Einstein: *"la termodinámica es la única teoría física con contenido universal, de la cual yo estoy convencido, dentro del rango de aplicabilidad de sus conceptos básicos nunca podrá ser derrocada"*[1] [1].

La segunda de ellas es una teoría fundamental que explica el comportamiento de sistemas microscópicos: cristales, moléculas, átomos. Su desarrollo se dio en el siglo XX y surge a partir de problemas abiertos que dejaron la termodinámica y el electromagnetismo. Estos dilemas permitieron a los científicos de la época construir las bases de la mecánica cuántica. A diferencia de la termodinámica y tal como la mecánica clásica, la mecánica cuántica intenta describir los detalles particulares de los bloques fundamentales que componen los sistemas macroscópicos. Es también una teo-

[1] *"The only physical theory of universal content, which I am convinced, that within the framework of applicability of its basic concepts will never be overthrown."*

ría tremendamente exitosa cuyas predicciones han sido comprobadas con asombrosa precisión. Con ambas teorías en escena, naturalmente surge la pregunta acerca de qué es lo que sucede fuera del límite macroscópico, en el régimen de pocos sistemas cuánticos. ¿Aparecen nuevas restricciones? ¿Es posible construir nuevos dispositivos que aprovechen estas características? ¿Cuál es el límite que nos permite recuperar la termodinámica usual?

La mecánica estadística representó el primer acercamiento entre el mundo microscópico y la termodinámica mediante el concepto de *entropía*. Esta cantidad fue introducida por Clausius a mediados del siglo XIX para distinguir distintos tipos de fuentes de calor en los ciclos de las máquinas térmicas, y de esta manera formalizó la segunda ley de la termodinámica utilizando la metodología desarrollada por Carnot en el estudio de los ciclos de las máquinas térmicas. A escala microscópica, decimos que todo sistema está compuesto por bloques fundamentales regidos por las leyes de la mecánica, sea clásica o cuántica. La primera relación entre la termodinámica de un sistema y su estructura molecular subyacente se debe a Boltzmann con el estudio de la cinética de gases. De esta manera, la entropía en mecánica estadística se encuentra relacionada con el número de configuraciones microscópicas que un sistema termodinámico puede tener cuando su estado se encuentra especificado por determinadas variables macroscópicas.

Si bien la mecánica estadística ha ganado su lugar en el árbol genealógico, es una teoría que tiene sus limitaciones en este marco. Su jurisdicción se limita a sistemas con muchos grados de libertad y exhibe el comportamiento promedio de los sistemas físicos. Lejos de este límite en el que consideramos pocos sistemas correlacionados, las fluctuaciones térmicas y cuánticas dominan.

La información en el centro de escena

Hacia principios del siglo XX, el concepto de información comenzó a cobrar más y más importancia. La idea fue abstraer el fenómeno físico en cuestión y cuantificarlo a partir de probabilidades sobre ciertos eventos, sin importar de que evento se tratase (el resultado de un experimento, el número ganador de la lotería). Veamos esto con un ejemplo. Supongamos que queremos enviar una señal por un canal y queremos comprimir la señal para enviar un mensaje lo más corto posible pero que contenga todo el contenido de la señal original. Si dicha señal esta compuesta por n caracteres distintos, donde cada carácter aparece con probabilidad p_i en la señal, la cantidad mínima de bits por carácter que son necesarios para codificar el código resulta ser $-\sum_{i=1}^{n} p_i \log_2 p_i$, cantidad que fue introducida por Shan-

non en 1948. De esta forma, se llegó a la conclusión que comprimir una señal o enviarla por un canal ruidoso tenía que ver con el viejo concepto de entropía. En este caso, la entropía cuantifica el grado de ignorancia acerca de determinados eventos.

En 1932, von Neumann llega a la entropía que hoy lleva su nombre a partir de un experimento mental. La pregunta que se hacía von Neumann era cual es el costo energético de borrar un gas de N átomos, inicialmente en un estado separable $\rho^{\otimes N}$ con $\rho = \sum p_i \left|\phi_i\right\rangle\!\left\langle\phi_i\right|$, mediante la transformación a un estado puro $\left|\phi_1\right\rangle^{\otimes N}$ en un proceso reversible. La respuesta a la que llego involucraba la entropía que luego llevaría su nombre. Curiosamente, von Neumann llega a esta expresión 16 años antes de que Shannon publicara su trabajo, siendo la entropía de Shannon un caso particular de la entropía de von Neumann.

Otro concepto que nos muestra la relación entre termodinámica e información fue el principio de Landauer (1961) [2], que establece el mínimo costo energético del borrado de información. La mínima cantidad de información clásica que podemos almacenar corresponde a 1 bit. El principio de Landauer establece que durante el proceso de borrado se disipa al menos una cantidad de energía igual a $k_B T \log 2$, donde T es la temperatura y k_B la contante de Boltzmann. Y es el principio de Landauer que explica la famosa paradoja del demonio de Maxwell [1]. Supongamos que hay un gas confinado en un recipiente con dos cámaras conectadas entre sí por medio de una pequeña válvula. Un agente que tiene la capacidad de manipular la válvula puede controlar el flujo de partículas del gas que llegan a ella. De esta manera, el agente podría ingeniárselas y confinar las partículas con mayor energía cinética en una de las cámaras y extraer trabajo a partir de la diferencia de temperatura. El punto crucial de esta situación paradójica es que el demonio adquiere información acerca de partículas individuales del gas y utiliza esta información para convertir calor en trabajo útil. Esto en principio podría hacerlo en forma cíclica, violando aparentemente la segunda ley de la termodinámica. Sin embargo, esta aparente paradoja puede ser resuelta si consideramos que para que hacer este proceso funcione en forma cíclica es necesario borrar la memoria del demonio, y a partir del principio de Landauer se puede ver que la cantidad de calor disipada compensa la extracción de trabajo realizada por el demonio. En las palabras del matemático Gregory Chaitin, la información es ahora el centro de escena.

De la misma manera que fue concebida la entropía de von Neumann, es posible fortalecer el nexo entre mecánica cuántica y termodinámica utilizando herramientas desarrolladas en teoría de la información y teoría de la información cuántica. Una manera de realizar esto es a partir de lo que

conocemos como teoría de recursos de la termodinámica cuántica.

¿Por qué una teoría de recursos?

Históricamente han existido dos enfoques distintos para construir una teoría científica [3]. La primera de ellas es la que denominamos *descriptiva* o *dinamicista*. Dentro de una teoría descriptiva, que es el caso más común en física, se definen propiedades y se describen comportamientos independientemente de cualquier accionar de un agente externo que manipula o interactúa con los objetos que la teoría intenta describir. El segundo enfoque es el pragmático. Dentro de una teoría pragmática, estamos más interesados en describir cómo un agente externo puede manipular los objetos de la teoría. Una teoría de recursos se construye a partir de dos objetos. Primero, un conjunto de estados permitidos para el sistema de estudio. Segundo, las transformaciones entre estados del sistema que están permitidas para un agente externo. No sólo el enfoque de una teoría de recursos es puramente pragmático, sino que además podemos encontrar evidencia de esto mismo en la química, teoría de la información e incluso en los comienzos de la termodinámica, por citar algunos casos.

El marco de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica permite extender las ideas de la termodinámica estándar donde se incluyen los efectos cuánticos y sistemas de dimensión pequeña fuera del equilibrio térmico. Estas teorías identifican un conjunto restrictivo de operaciones que actúan sobre 'recursos valiosos'. De esta manera, para un dado estado inicial, permite definir un conjunto de estados que son alcanzables. Por ejemplo, mediante la aplicación de operaciones locales estocásticas y comunicación clásica (LOCC) en un estado cuántico producto inicial de dos partes sólo podremos producir estados separables de dos partes. Las mismas operaciones aplicadas a estados entrelazados de dos partes, como un estado de Bell de dos partes, permiten recuperar todos los estados de dos partes. De esta manera, los estados de Bell resultan ser recursos valiosos que trivializan la teoría. Es así que el conjunto de operaciones permitidas induce una estructura en el espacio de estados donde es posible encontrar monótonos que establecen relaciones de orden, al igual que la entropía y la energía libre en la termodinámica.

En este caso restringiremos la teoría de recursos para estados fuera del equilibrio térmico a una temperatura definida T. La clase restringida de operaciones que define la teoría de recursos incluye solo las que pueden ser llevadas a cabo a partir de unitarias que conservan la energía del sistema y estados térmicos arbitrarios a dicha temperatura. Es decir, estados fuera del

equilibrio térmico son recursos en este caso. Este marco nos permitirá responder preguntas tales como ¿Cómo es posible cuantificar la calidad de los diferentes recursos?, ¿Podemos convertir un recurso en otro en forma determinista?, ¿Qué sucede si permitimos una determinada probabilidad de éxito?, ¿Qué sucede si permitimos el uso de catalizadores?. De esta manera, asumimos que el experimentador tiene control completo sobre las operaciones que puede realizar y podemos obtener restricciones que son de carácter fundamental.

¿Por qué necesitamos una termodinámica cuántica?

Más allá de la motivación teórica de tener una descripción de la termodinámica de sistemas de dimensión pequeña, los avances tecnológicos de los últimos años incentivan a la comunidad científica a preocuparse por teorías que puedan ayudar a comprender el comportamiento y los límites de las capacidades de estos sistemas. La tecnología actual permite manipular y controlar sistemas cuánticos formados por pocos grados de libertad. Dentro de esta revolución tecnológica, parte de la comunidad científica comenzó a interesarse cada vez más en los límites fundamentales de estos sistemas y, en particular, el enfoque que ofrece la teoría de recursos de la termodinámica cuántica. Los primeros trabajos consideran sistemas cuánticos que evolucionan por medio de operaciones unitarias y pueden estar acoplados a sistemas auxiliares, tales como baños térmicos y baterías. Dentro de todos estos trabajos iniciales podemos destacar, a nuestro entender, los mas importantes. Uno de ellos muestra cómo es posible reconstruir el límite termodinámico a partir de las transformaciones sobre muchos estados permitiendo un error de orden sublineal en la cantidad de particulas. [4]. Fuera del límite termodinámico, a partir del concepto de operador termal [5] fue posible encontrar que la relación que gobierna las transformaciones entre estados es la mayorización. Partiendo del concepto de mayorización, es posible establecer cuales son las transiciones permitidas. También es posible cuantificar el costo energético para la formación de recursos y la cantidad de energía que es posible extraer a partir de un determinado recurso [5]. Sorprendentemente, surge naturalmente el concepto de irreversibilidad en esta teoría, dado que en general el trabajo de formación es diferente al trabajo de extracción. Una generalización importante a los operadores termales se obtiene a partir de la introducción de catalizadores. Un catalizador es un sistema auxiliar que no sufre modificaciones luego del proceso y permite transformaciones que sin él serian imposibles, de allí su nombre. A partir de este formalismo, es posible encontrar toda una familia de segundas leyes

que obedecen las transformaciones entre sistemas cuánticos en interacción con un baño térmico, es decir, una familia de energías libres que rigen las transformaciones entre estados [6]. Efectivamente, una de estas energías libres coincide con la energía libre estándar.

TODO MUY LINDO, PERO QUE VOY A ENCONTRAR EN ESTA TESIS

En esta tesis nos interesamos en el costo energético de la creación de correlaciones entre las distintas partes de un sistema. Su caracterización general resulta complicada, por lo que nos concentraremos en analizar el caso simétrico, es decir el trabajo de formación de sistemas correlacionados cuyos estados locales son equivalentes. La idea general del trabajo podemos enunciarla a partir de la siguiente tarea: tenemos que distribuir estados equivalentes entre diferentes laboratorios que realizan experimentos locales, ¿cuál es el mínimo trabajo de formación si necesitamos distribuir estos estados a N laboratorios diferentes? Una respuesta inmediata es N veces el trabajo de formación de una copia. Veremos en esta tesis que esto no es así, y que la creación de correlaciones ayuda a mejorar el costo energético de esta tarea. A partir de la caracterización completa de este problema, mostramos que en el límite termodinámico cuando $N \to \infty$, el trabajo por copia es igual a la energía libre estándar del estado local. Es decir, mostramos que la energía libre en teoría de recursos tiene otra propiedad específica: es el trabajo por copia mínimo necesario para crear un dado estado multipartito localmente equivalente. Más aún, mostramos que esto puede hacerse de manera reversible para cualquier estado en el límite termodinámico.

¿CÓMO LEER ESTA TESIS?

La presente tesis está organizada en cinco capítulos. Los primeros dos capítulos son un resumen de los resultados más importantes obtenidos en los últimos años en el campo de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica. Por otro lado, los últimos tres capítulos incluyen nuevos resultados obtenidos como resultado del trabajo de tesis. Aparte se incluyen cuatro apéndices que contienen información complementaria.

A lo largo del primer capítulo son introducidos los elementos fundamentales de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica, tales como la definición de reservorio térmico y los operadores termales.

En el segundo capítulo se presenta formalmente la definición de una teoría de recursos y se muestra como ejemplo la teoría de recursos de no

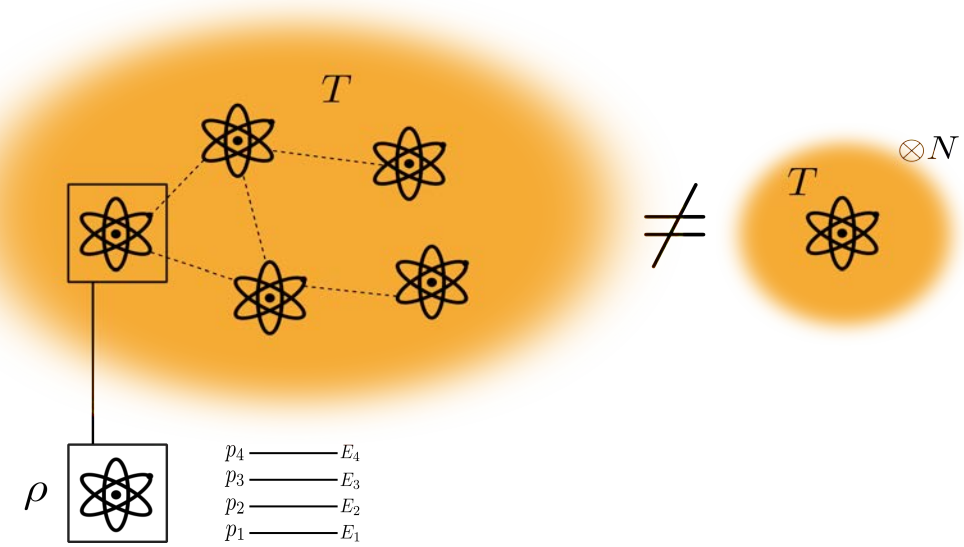


Figura 1: *En esta tesis vamos a explorar la posibilidad de permitir correlaciones entre las distintas partes de un sistema físico. Dadas N copias de un sistema, vamos a buscar estados correlacionados de las N partes de manera tal que el trabajo de formación del sistema completo sea menor que el trabajo de formación de cada parte por separado y de manera tal que cada copia correlacionada del sistema se encuentre en el estado ρ que se desea formar. Las correlaciones van a permitir disminuir el costo energético que requiere formar recursos.*

uniformidad. Luego se presenta la relación que gobierna las transformaciones entre estados en la termodinámica cuántica. A partir de ello, se pueden obtener expresiones para los trabajos de formación y de extracción. Por último, vemos como se recupera la termodinámica como la teoría límite de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica.

El tercer capítulo constituye el capítulo más largo y más denso en contenido. En el mismo se introduce el problema tratado en esta tesis y se presentan y demuestran los resultados obtenidos. Se define el trabajo de formación correlacionado, que va a ser la cantidad con la cual vamos a trabajar a lo largo de la tesis. Por simplicidad, a lo largo de todo el capítulo se trabaja con sistemas de dimensión dos.

El cuarto capítulo es una aplicación de los resultados del capítulo tres. Se define un ciclo térmico correlacionado basado en transformaciones nanoscópicas reversibles entre estados. Se estudia la efectividad de dichos ciclos térmicos y se lo compara con la eficiencia del ciclo de Carnot en el límite termodinámico.

Por último, el quinto capítulo es una generalización de los resultados del capítulo tres para sistemas de dimensión arbitraria.

Agradecimientos

Primero me gustaría agradecer a mi director, el Dr. Augusto Roncaglia, por enseñarme y dirigirme a lo largo del último año. No podría estar más contento por haber trabajado por él y agradecido por todo lo que me enseño y con quien espero seguir vinculado a lo largo de los próximos años de investigación.

Luego y principalmente quiero agradecer a mi familia (Mamá, Papá, Puffy, abuelas, tíos, tías y primos) por haber estado siempre presente y haberme permitido llegar a este día tan especial. Sé que estuvieron y que siempre estarán en los años venideros donde quiera que esté.

También me gustaría agradecer a la educación pública de nuestro país, en particular a la Universidad de Buenos Aires. No puedo dejar de lado el hecho de haber podido asistir a una universidad de excelencia y gratuita, oportunidad que sé que no todos tienen en el mundo, inclusive en nuestro país.

Quiero agradecer especialmente a todos los profesores que me sirvieron de guía y me aconsejaron siempre que lo necesite (muchas veces) a lo largo de los últimos años, tanto dentro como fuera de la facultad. Entre ellos quiero destacar a Augusto, Carlos, Leo, Matt y Patu. Tuve la suerte de no tener uno o dos directores, sino de tener a un batallón de ellos para asesorarme sobre este hermoso mundo de la ciencia (y ya que estamos, la vida).

A todos los amigos que me acompañaron desde siempre (en especial a Lulu y a Lucho); amigos del colegio; a todos los amigos que me brindo la facultad (a todo el grupo de los Wichis); colegas de Aristas; amigos de viajes; amigos que viven en el extranjero; amigos del laboratorio; y a todos ellos que han estado presente y han, de una forma u otra, moldeado a la persona que hoy les escribe. Un especial agradecimiento a Agus y Dani, que no sólo estuvieron siempre sino que también tuvieron mucho que ver con las decisiones que tomé a lo largo de los últimos años.

Muchas son las personas a la que agradecer y corta es cualquier cosa que pueda escribir para ellos. Simplemente, muchas gracias a todos.

Notación

S	Sistema
R	Reservorio
H_S	Hamiltoniano del sistema S
H_R	Hamiltoniano del reservorio R
k_B	Constante de Boltzmann
T	Temperatura del reservorio
T_C, T_H	Temperaturas del reservorio frío y caliente
β	Temperatura inversa
Z_S	Función de partición del sistema
Z_R	Función de partición del reservorio
Z, s	Constantes del Teorema 3.2.1
E_0	Energía del Hamiltoniano con $D = 2$
E_i	Energías permitidas del sistema
D	Dimensión del sistema S
N	Número de copias del sistema S
$\mathcal{E}_N$	Energías permitidas por el sistema de N copias
$g_N(\cdot)$	Degeneración del sistema de N copias
ρ, σ	Operador densidad
$\rho^{(N)}$	Operador densidad del sistema de N copias correlacionadas
τ	Estado térmico del sistema
p	Parámetro del estado local ρ
p_G	Parámetro del estado térmico τ
p^*	Valor de p asociado a un estado $\mathcal{R}^*$-crítico
p^*_+, p^*_-	Valor de p asociado a un estado cuasi-térmico
p_d	Autovalores del estado ρ
λ_E	Autovalores del estado $\rho^{(N)}$
q_E	Cociente entre λ_E y los autovalores del estado térmico
$F_1(\cdot)$	Energía libre estándar
$S(\cdot)$	Entropía de von Neumann

$D_{KL}(\cdot\|\|\cdot)$	Divergencia de Kullback-Leiber
$D_1(\cdot\|\|\cdot)$	Entropía mutua
$D_\infty(\cdot\|\|\cdot)$	Divergencia infinito
$D_0(\cdot\|\|\cdot)$	Divergencia cero
$D_\alpha(\cdot\|\|\cdot)$	Divergencias de Renyi
P_E	Proyector sobre subespacio de energía E
η_E	Estado máximamente mixto con energía E
$\mathcal{E}$	Operador termal
$\xrightarrow{\mathcal{E}}$	Transformación termal
$\prec$	Relación de mayorización
$\prec_T$	Relación de termomayorización
$\mathcal{D}_H$	Operador *dephasing*
W_∞	Trabajo de formación
W_0	Trabajo de extracción
$\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$	Trabajo de formación correlacionado
$\mathrm{W}_{\mathrm{motor}}$	Trabajo extraíble de un ciclo térmico correlacionado
F_∞	Energía libre de formación
F_0	Energía libre de extracción
$\rho^{(N)}$	Estado correlacionado de las N copias
$\mathrm{tr}_{-i}(\cdot)$	Traza parcial sobre todas las copias salvo la copia i
$\mathcal{C}(\rho, N)$	Conjunto de estados factibles
$\mathcal{C}^*(\rho, N)$	Conjuntos de estados factibles homogéneos en energía
$\mathcal{R}$	Estados reversibles
$\mathcal{R}^*$	Estados $\mathcal{R}^*$-críticos
U	Soporte de energías de los estados correlacionados
$\mathbb{1}$	Función indicadora
$\lfloor\cdot\rfloor$	Parte entera
$\lceil\cdot\rceil$	Mínimo entero mayor o igual
Q_H	Calor entregado por el reservorio a T_H
η_C	Eficiencia del ciclo basado en correlaciones
η_{Carnot}	Eficiencia del ciclo de Carnot

Capítulo 1

Termodinámica Cuántica

La termodinámica consiste en el estudio de sistemas físicos descriptos a partir de propiedades macroscópicas o globales, tales como la temperatura, la entropía o la energía media del sistema. En función de los parámetros que determinan el estado del sistema es que podemos responder a preguntas tales como: ¿cuáles son las transformaciones permitidas por el sistema? ¿Son estas transformaciones reversibles? ¿cuánto trabajo podemos extraer de un estado a una cierta temperatura fija? ¿cuánto trabajo es necesario invertir para formar cierto estado? ¿es posible definir trasformaciones cíclicas del sistema de la cual en cada ciclo podamos convertir calor en trabajo?. En la actualidad, la manipulación de sistemas cada vez más pequeños es una realidad, siendo posible la realización de experimentos que involucran unos pocos átomos con pocos grados de libertad. Naturalmente, esto abre el interrogante de cómo extender las ideas de la termodinámica al régimen cuántico.

La termodinámica cuántica es la extensión de los conceptos termodinámicos a sistemas microscópicos y nanoscópicos. El objetivo de este capítulo es introducir los conceptos fundamentales que constituyen, dentro del contexto de la teoría de recursos, la termodinámica cuántica.

Los dos conceptos más importantes son el de reservorio térmico y el de operador térmico. Como veremos más adelante, toda transformación termodinámica es efectuada mediante la interacción del sistema con un reservorio térmico caracterizado por una temperatura T. El conjunto de operaciones que consisten en acoplar al sistema con el reservorio, efectuar una operación unitaria que no modifique la energía total y luego trazar sobre

el reservorio se denominan operaciones termales. Un aspecto importante de este paradigma es que la interacción entre el sistema y reservorio nunca queda explicitada, lo cual no sólo simplifica el análisis sino que también permite formular una teoría más general.

A continuación introduciremos las definiciones formales de reservorio térmico y operador termal. Más adelante se introducen también el *work qubit* y el *switching qubit*. A modo de resumen, la Figura 1.1 esquematiza todos los componentes mencionados. El sistema de estudio S se encuentra inmerso en un reservorio térmico caracterizado por su temperatura T y Hamiltoniano H_R. Por otro lado, se cuenta con dos sistemas auxiliares. El *switching qubit* que permite incluir evoluciones temporales en el Hamiltoniano del sistema y el *work qubit* que es responsable de almacenar o suministrar la energía sobrante del sistema.

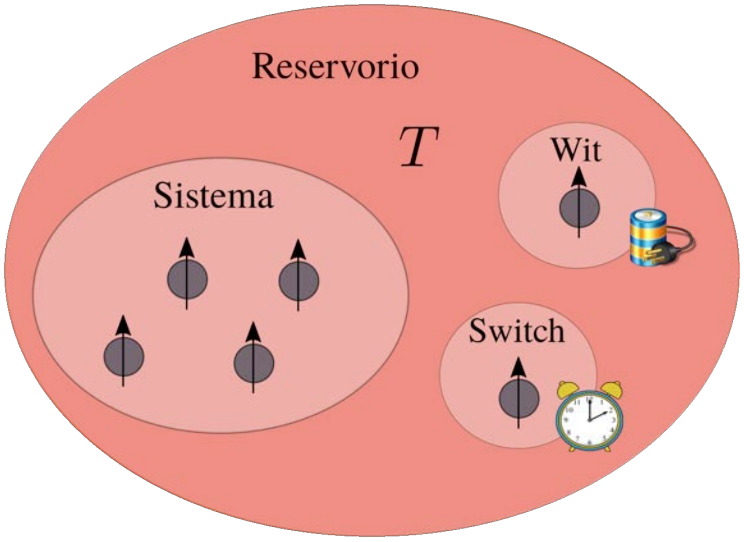


Figura 1.1: *Esquema completo de los distintos sistemas que conforman el paradigma de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica.*

1.1. Preliminares

Una de las cantidades más importantes en termodinámica es la energía libre de Helmholtz F_1 definida como

$$F_1(\rho) = \langle E(\rho) \rangle - k_B T S(\rho) \tag{1.1}$$

donde T es la temperatura del reservorio térmico que rodea al sistema, k_B es la constante de Boltzmann, $\langle E(\rho) \rangle$ es la energía media y $S(\cdot)$ es la entropía del sistema. La monotonía de la energía libre es la que gobierna

las transiciones entre estados clásicos en contacto con un reservorio térmico. De ser posible la transición, la diferencia de energía libre establece el trabajo máximo que se puede extraer del sistema. A su vez, esto define la cantidad de trabajo necesario para revertir el proceso ya que la termodinámica de sistemas macroscópicos en equilibrio es reversible.

Otro concepto clave en termodinámica es el de estado térmico o estado de Gibbs. Hay varias formas equivalentes de definir un estado térmico. La primera de ellas es a partir del estado cuántico al que tiende todo sistema a tiempos largos cuando el mismo se encuentra en contacto con un baño térmico macroscópico. Otra manera de caracterizarlo es como el único estado del sistema del cual no es posible extraer trabajo cuando se encuentra en contacto con un reservorio térmico [7]. Equivalentemente, dado un sistema con Hamiltoniano H_S y una temperatura T, el estado térmico τ se define como el estado del sistema que maximiza la entropía de von Neumann $S(\cdot)$ sujeto a que el valor medio de energía medio está fijo [8]. En todos los casos, el estado térmico o estado de Gibbs está dado por

$$\tau = \frac{e^{-\beta H_S}}{Z_H} \qquad Z_H = \mathrm{tr}\left[e^{-\beta H_S}\right] \tag{1.2}$$

donde $\beta = (k_B T)^{-1}$ y Z_H es la función de partición del sistema.

Además, la energía libre F_1 cuantifica que tan parecido es un estado ρ al estado térmico τ. Cuanto más parecidos sean, menor es el trabajo que es posible extraer. Esta idea puede ser formalizada a través de la divergencia de Kullback-Leibler o de entropía relativa mediante la siguiente relación [9]

$$W_1(\rho) = F_1(\rho) - F_1(\tau) = \frac{1}{\beta} D_{KL}(\rho||\tau) \tag{1.3}$$

donde W_1 es el trabajo que se puede extraer del estado ρ y $D_{KL}(\cdot||\cdot)$ es la divergencia de Kullback-Leibler definida por

$$D_{KL}(\rho||\sigma) = \mathrm{tr}\,\rho(\log\rho - \log\tau) \tag{1.4}$$

Como ya mencionamos, para sistemas macroscópicos las transiciones de estados están gobernadas por la energía libre F_1. Sin embargo, en el régimen cuántico va a ser necesario recurrir a herramientas matemáticas más sofisticadas, como la mayorización y las entropías de Renyi. Estas herramientas van a permitir generalizar la ecuación (1.3) para estados microscópicos.

Gran parte de los resultados que se exponen a lo largo de la tesis son

válidos únicamente para estados semiclásicos. Un estado ρ se dice semiclásico si conmuta con el Hamiltoniano H_S del sistema. Recordemos que la ecuación de Schrödinger para matrices densidad está dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[\rho, H] \tag{1.5}$$

Por lo tanto, los estados semiclásicos son los estados estacionarios del sistema.

1.2. Reservorio térmico

Uno de los ingredientes fundamentales en la termodinámica cuántica es el de reservorio térmico. El reservorio térmico es un sistema auxiliar R como el de la ecuación (1.2) con un cierto Hamiltoniano H_R y a una determinada temperatura T. A diferencia del sistema S, es de suma importancia que el reservorio R sea macroscópico. Sin embargo, es posible definir una teoría de recursos para reservorios de dimensión finita [10].

La manera de imponer que el reservorio sea un sistema macroscópico es a través de un conjunto de hipótesis. Dado el reservorio con estado de Gibbs y fijado $\delta \ll 1$, debe existir un conjunto de energías $\mathcal{E}_R$ de manera tal que el reservorio se encuentre en una energía del conjunto $\mathcal{E}_R$ con probabilidad $1-\delta$, es decir:

$$\mathrm{tr}\,[P_{\mathcal{E}_R}\tau] \geq 1-\delta$$

donde $P_{\mathcal{E}_R}$ es el proyector sobre los subespacios con energía en $\mathcal{E}_R$, y que se cumplan las siguientes propiedades:

(1) El espectro de energías se distribuye alrededor de una media $\langle E\rangle$ y con desvío estándar $\mathcal{O}(\sqrt{\langle E\rangle})$.

(2) La degeneración g_R de una energía $E \in \mathcal{E}_R$ escala exponencialmente en E, es decir que existe alguna constante positiva c tal que

$$g_R(E) \geq e^{cE}$$

(3) Para todas tres energías E_R, E_S y E'_S con $E_R \in \mathcal{E}_R$ existe $E'_R \in \mathcal{E}_R$ tal que

$$E_S + E_R = E'_S + E'_R$$

(4) Para toda energía $E \in \mathcal{E}_R$ se tiene

$$\left| \frac{g_R(E)e^{-\beta E_S}}{g_R(E - E_S)} - 1 \right| < \delta$$

es decir $g_R(E - E_S) \approx g_R(E)e^{-\beta E_S}$.

Las hipótesis (1) y (2) son los resultados clásicos que se obtienen para baños térmicos en mecánica estadística [11]. Por otro lado, la hipótesis (3) tiene que ver con la continuidad del espectro del baño térmico. Por último, la hipótesis (4) es una consecuencia de

$$g(E + \Delta E) = e^{S(E+\Delta E)} \approx e^{S(E)+\frac{\partial S}{\partial E}\Delta E} = g(E)e^{\beta \Delta E}$$

Sea E un autovalor del Hamiltoniano H_S con autovectores $|E, g\rangle$, $g = 1, 2, \ldots, g(E)$. Definimos como η_E^X al estado del sistema X máximamente mixto sobre el subespacio de energía E, es decir

$$\eta_E^X = \frac{1}{g(E)} \sum_{g=1}^{g(E)} |E, g\rangle\langle E, g| \tag{1.6}$$

Luego, se puede demostrar que si el reservorio cumple las hipótesis mencionadas, vale que[1]

$$\frac{1}{p_E} P_E(\rho_S \otimes \tau_R) P_E \approx \bigoplus_{E_S} P_{E_S} \rho_S P_{E_S} \otimes \eta_{E-E_S}^R \tag{1.7}$$

donde $p_E = \mathrm{tr}(P_E \rho_R \otimes \tau_S)$, P_E es el proyector sobre el subespacio de energía E y la suma $\oplus_{E_S}$ se hace sobre todos los valores de energia posibles E_S del sistema [5]. Esto establece la equivalencia entre la proyección del estado total sobre un valor de energía E con acoplar cada subespacio de energía constante E_S del sistema con el estado microcanónico del subespacio de energía $E - E_S$ del reservorio.

1.3. Operadores termales

El otro ingrediente de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica es el de operador termal. Los operadores termales operan sobre el estado

[1] El enunciado formal y la demostración de este resultado se pueden encontrar en el Apéndice C.

del sistema S y formalizan la interacción del sistema con el reservorio sujeto a la restricción de conservar la energía total.

El sistema S es acoplado a un reservorio R que cumple las hipótesis anteriormente mencionadas. La interacción entre el sistema S y el reservorio R tiene que ser tal que conserve la energía total del sistema [6]. Es decir, dado un sistema S y una temperatura T, las operaciones permitidas incluyen:

- Agregar un sistema R macroscópico cuyo estado sea un estado de Gibbs para algún Hamiltoniano H_R a temperatura igual a T.
- Realizar cualquier operación unitaria sobre SR que conmute con el Hamiltoniano total del sistema $H_S + H_R$, es decir, que no agregue ni quite energía del sistema. Esto es equivalente a decir que podemos aplicar cualquier operación unitaria sobre los subespacios de energía constante del sistema SR.
- Remover el reservorio R luego de efectuar alguna operación.

Todas estas restricciones pueden escribirse matemáticamente de la siguiente manera [4][5][6].

Definición 1.3.1 (*Operadores Termales*)

Dado un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ y un Hamiltoniano H_S, un operador termal $\mathcal{E} : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mapsto \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es un operador de la forma

$$\mathcal{E}(\rho) = \mathrm{tr}_2 \left(U \left(\rho \otimes \tau_R \right) U^\dagger \right) \tag{1.8}$$

donde τ_R es el estado de Gibbs de un sistema anciliario con Hamiltoniano H_R cualquiera y temperatura T, y U es un operador unitario tal que $[U, H_S \otimes I + I \otimes H_R] = 0$.

Este es el conjunto de operaciones más generales que se pueden incluir de manera tal que no se introduzca energía en el sistema. Desde el punto de vista práctico, representa un conjunto de operadores muy general, pero impone condiciones necesarias para la evolución del sistema. A su vez, tiene la ventaja de que no es necesario explicitar la interacción o el flujo de energía entre el sistema y el reservorio. A diferencia de otros formalismos donde sólo se pide la conservación de la energía en valor medio [12], la restricción de que la transformación unitaria U conmute con el Hamiltoniano impone una conservación fuerte de la energía (primera ley de la termodinámica).

De esta manera, dado un estado ρ del sistema S decimos que es posible transformar ρ en σ por medio de operadores termales, y lo notamos $\rho \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma$, si

existe un operador termal $\mathcal{E}$ tal que $\mathcal{E}(\rho) = \sigma$. A su vez, se puede demostrar fácilmente que la energía libre F_1 también es un monótono de la teoría de recursos de la termodinámica [13], es decir que si $\rho \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma$ entonces $F_1(\sigma) \leq F_1(\rho)$.

Para sistemas semiclásicos, los operadores termales pueden pensarse como procesos de Markov, donde sólo nos interesa la probabilidad de transición entre los distintos niveles de energía. Es claro que todo operador termal $\mathcal{E}$ induce una matriz estocástica que opera sobre los distintos niveles de energía del Hamiltoniano H_S, donde la probabilidad de transición de un autoestado de energía E_i a otro E_j está dada por

$$T_{i \mapsto j} = \langle E_j | \, \mathcal{E} \left(|E_i\rangle\langle E_i| \right) |E_j\rangle \tag{1.9}$$

Denominamos como proceso termal a toda matriz de transición de la forma (1.9). A su vez, los procesos térmicos inducen operadores termales y existe un biyección entre ambos conjuntos [14].

Proposición 1.3.1

Sean ρ y σ dos estados tales que $[\rho, H_S] = [\sigma, H_S] = 0$ y sean $\boldsymbol{p}$ y $\boldsymbol{q}$ sus vectores de autovalores, respectivamente. Entonces existe un operador termal $\mathcal{E}$ tal que $\mathcal{E}(\rho) = \sigma$ si y sólo si existe un proceso térmico T tal que $T\boldsymbol{p} = \boldsymbol{q}$.

1.3.1. Gibbs-preserving maps

Es importante remarcar que los operadores termales no son la única familia de operadores a partir de la cual es posible formular una teoría cuántica de la termodinámica. Otro conjunto de operadores que están estrechamente vinculados a los operadores termales son los operadores que preservan el estado de Gibbs (*Gibbs-preserving maps* a partir de ahora). Dado el estado térmico del sistema τ_S, decimos que un operador $\mathcal{G}$ es un *Gibbs-preserving map* si cumple

$$\mathcal{G}(\tau_S) = \tau_S$$

El conjunto de operadores termales es una subclase de operadores *Gibbs-*

preserving. Esto es inmediato de:

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(\tau_S) &= \mathrm{tr}_2\left(U\left(\frac{e^{-\beta H_S}}{Z_S}\otimes\frac{e^{-\beta H_R}}{Z_R}\right)U^\dagger\right)\\
&= \mathrm{tr}_2\left(U\frac{e^{-\beta(H_S+H_R)}}{Z_{SR}}U^\dagger\right)\\
&= \mathrm{tr}_2\left(\frac{e^{-\beta(H_S+H_R)}}{Z_{SR}}\right)\\
&= \frac{e^{-\beta H_S}}{Z_S} = \tau_S
\end{aligned}$$

donde usamos que $[H_S+H_R, U]=0$. Sin embargo, no todo *Gibbs-preserving map* es un operador termal. La diferencia entre ambas familias de operadores es que un operador termal no puede crear coherencias entre los distintos niveles de energía, mientras que un *Gibbs-preserving map* si. Por ejemplo, si consideramos un Hamiltoniano de la forma $H = E_0\,|1\rangle\langle 1|$ entonces la transformación $|1\rangle \mapsto |+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ no puede realizarse por medio de operadores termales pero si por medio de *Gibbs-preserving maps* [1]. Sin embargo, se puede demostrar que para transformaciones entre estados semiclásicos ambos formalismos coinciden [15].

1.4. Wit

Otro concepto de gran importancia en termodinámica es el de trabajo. Durante un proceso termodinámico, la energía del sistema puede variar y ser almacenada en algún sistema auxiliar. Cuando la energía del sistema disminuye, decimos que el sistema entregó dicha energía en forma de trabajo al sistema auxiliar. Por ejemplo, en el caso de un gas que se expande y mueve un pistón del cual cuelga un objeto (Figura 1.2a), el trabajo entregado por el gas es utilizado para levantar el balde, aumentando su energía potencial.

El análogo cuántico es el qubit de trabajo (*work qubit*), o simplemente *wit*. El *wit* es un sistema auxiliar compuesto por un único qubit, es decir, un sistema de dimensión dos, con base $\{|0\rangle, |W\rangle\}$ y con un Hamiltoniano de la forma

$$H_W = W\,|W\rangle\langle W|$$

De esta manera, el wit es el sistema que almacena (o suministra) la diferencia de energía entre el estado del sistema final respecto del estado

Figura 1.2: *Analogía entre la noción de trabajo termodinámico clásico (a) y trabajo en termodinámica cuántica (b). Figura extraída de [5].*

inicial. Por ejemplo, si ρ es el estado inicial del sistema y σ el final, decimos que es posible extraer una cantidad de trabajo W si la transformación $\rho \otimes |0\rangle\langle 0| \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma \otimes |W\rangle\langle W|$ es posible mediante operadores termales. De la misma manera, decimos que es necesario entregar una cantidad de trabajo W para transformar el estado ρ en σ si la transformación $\rho \otimes |W\rangle\langle W| \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma \otimes |0\rangle\langle 0|$ es posible.

Otra posibilidad es permitir la extracción de una cantidad de trabajo pero con una probabilidad no nula de fallar. Fijado un $\epsilon \ll 1$, podemos buscar los W_ϵ tal que la transformación

$$\rho \otimes |0\rangle\langle 0| \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma \otimes ((1-\epsilon)\,|W_\epsilon\rangle\langle W_\epsilon| + \epsilon\,|0\rangle\langle 0|)$$

está permitida por operadores termales. De esta manera, con probabilidad $1-\epsilon$ es posible extraer trabajo W_ϵ de la transformación $\rho \mapsto \sigma$. A lo largo de la tesis, vamos a mencionar algunos de los resultados importantes que surgen a partir de considerar esta posibilidad. Sin embargo, los resultados obtenidos corresponden siempre a transformaciones donde no existe probabilidad de fallar.

1.5. Evolución temporal

Hasta el momento sólo mencionamos que el sistema S está caracterizado por un dado Hamiltoniano H_S. Sin embargo, es importante poder incluir en el formalismo el caso en el cual el Hamiltoniano del sistema evolucione con el tiempo. Dado que sólo interesan los estados iniciales y finales, sin importar los estados intermedios, vamos a contemplar el caso en el cual el Hamiltoniano del sistema inicial H_S^0 y el Hamiltoniano final H_S^1 son diferentes.

Dentro de este formalismo, la manera de permitir esto es introduciendo

un sistema auxiliar C formado por un único qubit, denominado qubit de cambio (*switching qubit*). El Hamiltoniano del sistema SC es de la forma

$$H_{\text{tot}} = H_S^0 \otimes |0\rangle\langle 0|_C + H_S^1 \otimes |1\rangle\langle 1|_C$$

e imponemos que el estado inicial del sistema C sea $|0\rangle$ y el final $|1\rangle$. De esta manera, la transformación $(\rho, H_S^0) \xrightarrow{\mathcal{E}} (\sigma, H_S^1)$ es equivalente a la transformación $(\rho \otimes |0\rangle\langle 0|, H_{\text{tot}}) \xrightarrow{\mathcal{E}} (\sigma \otimes |1\rangle\langle 1|, H_{\text{tot}})$. A lo largo de la tesis nos concentraremos únicamente en el caso donde el Hamiltoniano no varía. Sin embargo, a partir de está observación en simple incorporar el caso de Hamiltoniano variable en el tiempo.

Capítulo 2

Teoría de Recursos en Termodinámica Cuántica

Information is physical

— Rolf Landauer

La teoría de recursos es un formalismo simple y elegante mediante el cual muchas teorías científicas pueden ser descriptas. En particular, una teoría de recursos intenta responder cuáles son las acciones que un agente externo puede aplicar sobre el sistema bajo ciertas restricciones [1][3]. A lo largo de este capítulo se introducen la nociones básicas de una teoría de recursos y se muestran los resultados más relevantes que surgen de su aplicación a la termodinámica cuántica.

2.1. Teoría de recursos

Una teoría de recursos queda definida por un conjunto de operaciones sobre un sistema que son consideradas gratuitas, es decir, que pueden ser usadas sin límite [16]. En el contexto de la mecánica cuántica, las operaciones gratuitas van a ser un subconjunto de operadores sobre los estados cuánticos del sistema. Por ejemplo, el subconjunto de operaciones locales y comunicación clásica (LOCC) definen la teoría de recursos del entrelazamiento [17]; los *noisy operators* definen la teoría de recursos de no-

uniformidad [16]; y los operadores termales definen la teoría de recursos de la termodinámica cuántica [1][4].

Formalmente, una teoría de recursos queda definida mediante el conjunto de operaciones $\mathcal{T}$ permitidas para un agente externo [18]. Por su parte, el sistema puede encontrarse en distintos estados de algún conjunto Ω. Cada uno de los posibles estados del sistema recibe el nombre de recurso. Dados dos recursos $U, V \in \Omega$, decimos que V es alcanzable a partir de U, y lo notamos $U \xrightarrow{\mathcal{T}} V$, si existe una operación $f \in \mathcal{T}$ tal que $f(U) = V$.

Dentro de una teoría de recursos existe el concepto de recursos gratis. Un recurso gratis es un sistema que se encuentra en un estado $G \in \Omega$ de manera tal que para cualquier otro recurso $U \in \Omega$ se tiene $U \xrightarrow{\mathcal{T}} G$. Otro elemento importante es el de los monótonos. Un monótono de una teoría de recursos es una función $\psi : \Omega \mapsto \mathbb{R}$ tal que $U \xrightarrow{\mathcal{T}} V$ implica que $\psi(U) \leq \psi(V)$ (o $\psi(V) \leq \psi(U)$), es decir, que ψ es una función monótona mediante operaciones permitidas.

Entre las preguntas que uno puede plantearse en el marco de una teoría de recursos destacamos:

- ¿Cuáles son las condiciones necesarias y suficientes para que un recurso U pueda ser transformado en otro V?.
- Bajo que condiciones las trasformaciones son reversibles, es decir, cuándo vale que $U \xrightarrow{\mathcal{T}} V \Rightarrow V \xrightarrow{\mathcal{T}} U$.
- ¿Es posible encontrar una familia $\mathcal{F}$ de monótonos $\psi : \Omega \mapsto \mathbb{R}$ tales que $U \xrightarrow{\mathcal{T}} V \Leftrightarrow \psi(V) \leq \psi(U) \quad \forall \psi \in \mathcal{F}$?
- Dadas N copias de un recurso U, cuántas copias del recurso V es posible obtener mediante operaciones permitidas?

Para entender mejor cómo esta constituida una teoría de recursos, veamos un ejemplo concreto. Una teoría de recursos sencilla pero que está fuertemente ligada con la termodinámica cuántica es la teoría de recursos de los *noisy operators*.

2.1.1. Teoría de recursos de no uniformidad

Como ya mencionamos anteriormente, además de los operadores termales, existen distintas familias de operadores a partir de las cuales es posible construir una teoría de recursos. Entre ellas destacamos la de los operadores con ruido (*noisy operators* a partir de ahora). Un *noisy operator* consiste

en acoplar al sistema con cualquier estado auxiliar (ancila) que consista en un estado máximamente mixto η de dimensión arbitraria d, realizar una operación unitaria sobre ambos sistemas y por último trazar sobre el sistema auxiliar [16][19]. De esta manera, dado un estado ρ del sistema, todo *noisy operator* es de la forma

$$\mathcal{N}(\rho) = \mathrm{tr}_A \left(U \left(\rho \otimes \left(\frac{1}{d}, \frac{1}{d}, \ldots, \frac{1}{d} \right) \right) U^\dagger \right) \tag{2.1}$$

Luego, dados dos estados ρ y σ del sistema, decimos que σ es alcanzable a partir de ρ si existe un *noisy-operator* $\mathcal{N}$ tal que $\mathcal{N}(\rho) = \sigma$.

Si en vez del estado máximamente mixto para la ancila se permite cualquier otro estado γ distinto, entonces la teoría se vuelve trivial y se obtiene que cualquier estado es alcanzable a partir de cualquier otro. Si la ancila está en un estado máximamente mixto, entonces no introduce información sobre el sistema. La teoría de no uniformidad es un caso particular de la teoría de recursos de la atermalidad, donde los Hamiltonianos son triviales y por lo tanto los niveles de energía son todos degenerados. Notemos que la definición de *noisy operator* y operador termal coinciden cuando el Hamiltoniano es proporcional a la identidad.

En general, nos preguntamos que relación deben guardar los estados ρ y σ para que sea posible transformar uno en el otro. La respuesta a esta pregunta se encuentra en el concepto de mayorización, que vamos a definir en la siguiente sección. La condición para que se pueda dar la transformación está dada por el siguiente resultado [19].

Proposición 2.1.1

Es posible transformar un estado ρ en otro σ por medio de noisy operators si y sólo si $\sigma \prec \rho$, donde $\prec$ es la relación de mayorización.

Tanto en el caso de la teoría de recursos de no-uniformidad [19] como en la teoría de recursos del entrelazamiento [17] se encuentra que la relación de mayorización es la que gobierna las transformaciones permitidas. Vamos a ver más adelante que algo similar sucede pero en el marco de los operadores termales.

2.2. Condición necesaria y suficiente para las transformaciones térmicas

Los operadores termales son un conjunto de transformaciones que operan sobre los estados de un sistema. Dados dos estados ρ y σ de un sistema con Hamiltoniano H_S, decimos que es posible transformar ρ en σ a través de operaciones termales si existe un operador termal $\mathcal{E}$ tal que $\mathcal{E}(\rho) = \sigma$, y lo notamos

$$(\rho_S, H_S) \xrightarrow{\mathcal{E}} (\sigma_S, H_S)$$

o simplemente $\rho \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma$. Naturalmente, buscar sobre el conjunto de operadores termales un operador que transforme ρ en σ es sumamente complicado, debido a que los operadores termales representan un conjunto de operadores muy genérico. Sin embargo, existe una equivalencia entre las transformaciones mediante operadores termales y la mayorización.

La mayorización es una herramienta matemática muy estudiada y que aparece en problemas desde la matemática hasta la economía [20]. La mayorización se puede pensar como una relación de orden parcial en el espacio de distribuciones de probabilidad, en principio de dimensión finita, si bien se puede generalizar a distribuciones continuas [21]. Es inmediato extender la definición de mayorización a conjuntos de estados cuánticos a través de la distribución de probabilidad inducida. Formalmente, la relación de mayorización se define de la siguiente manera[1].

Definición 2.2.1 (*Mayorización*)

Dados dos estados ρ y σ de un mismo sistema decimos que ρ es mayorado por σ (o que σ mayoriza a ρ) y lo notamos por $\rho \prec \sigma$ si se cumple

$$\sum_{j=1}^{k} \lambda_j^{\downarrow} \leq \sum_{j=1}^{k} \mu_j^{\downarrow} \quad \forall k = 1, 2, \ldots, d \tag{2.2}$$

donde $\lambda^{\downarrow}$ e $\mu^{\downarrow}$ son los autovalores de ρ y σ ordenados de mayor a menor, respectivamente.

A partir de la definición de mayorización es posible encontrar condiciones necesarias y suficientes para la existencia de un operador termal que transforme un estado ρ en otro σ.

[1] Consultar Apéndice A por más información acerca de la definición y propiedades de la relación de mayorización.

Teorema 2.2.1 (*Transformación Térmica*)

Sean ρ_S y σ_S dos estados diagonales a bloques en la base del Hamiltoniano H_S, es decir $[\rho_S, H_S] = [\sigma_S, H] = 0$. Entonces la transformación

$$(\rho_S, H_S) \xrightarrow{\mathcal{E}} (\sigma_S, H_S) \tag{2.3}$$

es posible mediante operadores termales si y sólo si para toda energía E suficientemente grande vale

$$\bigoplus_{E_S} P_{E_S}\sigma_S P_{E_S} \otimes \eta^R_{E-E_S} \quad \prec \quad \bigoplus_{E_S} P_{E_S}\rho_S P_{E_S} \otimes \eta^R_{E-E_S} \tag{2.4}$$

donde P_{E_S} es el proyector sobre el subespacio de energía E_S y la suma se realiza sobre todos los niveles de energía E_S del Hamiltoniano H_S. [5]

Demostración : La demostración se incluye en el Apéndice C. ■

Es posible generalizar este resultado para estados que no necesariamente conmuten con el Hamiltoniano. Para hacerlo es necesario definir el operador de decoherencias (*dephasing*). El operador de decoherencias borra todas las coherencias entre los distintos niveles de energías, transformando cualquier estado a un estado semiclásico.

Definición 2.2.2 (*Estado decoherente y dephasing*)

Dada la matriz densidad ρ se define su estado decoherente respecto a un Hamiltoniano H como

$$\mathcal{D}_H(\rho) = \sum_E P_E \rho P_E = \sum_{E,g} |E,g\rangle\langle E,g| \, \rho \, |E,g\rangle\langle E,g| \tag{2.5}$$

donde $|E,g\rangle$ es una base de autoestados de H y $\mathcal{D}_{\mathrm{H}}$ es el operador de dephasing. [5][22]

Es fácil probar que los operadores termales y el operador de dephasing conmutan, es decir [23]

$$[\mathcal{D}_{H_S}, \mathcal{E}] = 0 \quad \forall\, \mathcal{E} \text{ operador termal} \tag{2.6}$$

Con este resultado en mente, supongamos que $\rho \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma$, entonces existe $\mathcal{E}$ operador termal tal que $\mathcal{E}(\rho) = \sigma$. Aplicando $\mathcal{D}_{H_S}$ en ambos términos de la

igualdad obtenemos

$$\mathcal{D}_{H_S}(\mathcal{E}(\rho)) = \mathcal{E}(\mathcal{D}_{H_S}(\rho)) = \mathcal{D}_{H_S}(\sigma)$$

por lo tanto también es posible transformar los estados decoherentes entre sí mediante la misma operación termal. Por otro lado, si los estados decoherentes de ρ y σ pueden transformarse uno en otro, es decir, existe otro operador termal $\mathcal{E}$ tal que $\mathcal{E}(\mathcal{D}_{H_S}(\rho)) = \mathcal{D}_{H_S}(\sigma)$, nuevamente tenemos que

$$\mathcal{D}_{H_S}(\mathcal{E}(\rho)) = \mathcal{D}_{H_S}(\sigma)$$

Esto último no implica que sea posible transformar ρ en σ por medio de operadores termales, dado que el operador $\mathcal{D}_{\mathrm{H}}$ no es inyectivo. Sin embargo, podemos concluir que existe algún estado $\tilde{\sigma}$ tal que $\mathcal{D}_{H_S}(\tilde{\sigma}) = \mathcal{D}_{H_S}(\sigma)$ y ρ puede trasformase en $\tilde{\sigma}$, lo que se resume en el siguiente corolario.

Corolario 2.2.1

Más aún, si la mayorización vale para los estados ρ_S y σ_S no necesariamente diagonales en bloques en la base del Hamiltoniano, entonces existe σ'_S tal que para toda energía E_S vale $P_{E_S}\sigma_S P_{E_S} = P_{E_S}\sigma'_S P_{E_S}$ y la transformación $(\rho_S, H_S) \mapsto (\sigma'_S, H_S)$ es posible.

Dado que la relación de mayorización busca determinar cual de dos distribuciones de probabilidad es más ordenada respecto de la otra, no es de extrañar que esté vinculada con la noción de entropía. De la teoría de la información sabemos que las distribuciones de probabilidad con menor y mayor entropía de von Neumann son la distribución que toma un único valor con probabilidad uno y la distribución uniforme, respectivamente. De la misma manera, dado cualquier vector de probabilidad $x \in \mathbb{R}^d$ se tiene:

$$\left(\frac{1}{d}, \frac{1}{d}, \ldots, \frac{1}{d}\right) \prec x \prec (1, 0, \ldots, 0)$$

Una buena pregunta que se hace Nielsen en [24] es por qué es necesaria la noción de mayorización cuando magnitudes como la entropía cuantifican lo mismo. Sin embargo, el Teorema 2.2.1 establece que en el régimen cuántico la mayorización es la que gobierna las transformaciones, y no la entropía como sucede en termodinámica clásica. El concepto de entropía es más débil que el de mayorización y sólo son equivalentes cuando el tamaño del sistema es lo suficientemente grande.

2.2.1. Termomayorización

El Teorema 2.2.1 representa una gran simplificación al problema de responder cuáles transformaciones pueden ser realizadas mediante operaciones termales. Esto se lleva a cabo a través de la relación de mayorización entre el estado del sistema y del reservorio al inicio y al final de la transformación. Sin embargo, resulta complicado y poco cómodo trabajar con los autovalores del reservorio. Buscamos condiciones que sólo dependan del estado del sistema. Así es que surge el concepto de termomayorización.

Sean $p_1, p_2, \ldots, p_D$ los autovalores del sistema S con Hamiltoniano H_S y energías asociadas $E_1, E_2, \ldots, E_D$, respectivamente, tales que se cumple

$$p_1 e^{\beta E_1} \geq p_2 e^{\beta E_2} \geq \ldots \geq p_D e^{\beta E_D}$$

y definimos la curva de termomayorización cómo la curva que resulta de unir los puntos $(0,0)$, $(e^{-\beta E_1}, p_1)$, $(e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}, p_1 + p_2), \ldots, (Z_S, 1)$ por medio de rectas. Luego, decimos que un estado ρ_S termomayoriza a otro estado σ_S si la curva de termomayorización asociada al estado ρ_S queda completamente por encima de la curva de termomayorización asociada al estado σ_S

Definición 2.2.3 (*Termomayorización*)

Sea $\mathbf{g}$ *la distribución termal del sistema S dada por* $g_i = e^{-\beta E_i}/Z_S$*. Dados dos estados* ρ_S *y* σ_S *de dimensión* D *diagonales a bloques en la base del hamiloniano* H_S *(i.e* $[\rho_S, H_S] = [\sigma_S, H_S] = 0$*) y con autovalores* $\mathbf{p}$ *y* $\mathbf{q}$*, respectivamente, decimos que* ρ_S *termomayoriza a* σ_S*, y lo notamos por* $\sigma_S \prec_T \rho_S$*, si la curva que une los puntos* $\left(\sum_{i=1}^{k} g_{\pi(i)}, \sum_{i=1}^{k} p_{\pi(i)}\right)$ *queda por encima de la curva que une los puntos* $\left(\sum_{i=1}^{k} g_{\hat{\pi}(i)}, \sum_{i=1}^{k} q_{\hat{\pi}(i)}\right)$*, con* $k = 0, 1, 2, \ldots, D$*, donde* $\pi(\cdot)$ *(* $\hat{\pi}(\cdot)$ *) es la permutación que aseguran que los términos* $p_{\pi(i)}/g_{\pi(i)}$ *(*$q_{\hat{\pi}(i)}/g_{\hat{\pi}(i)}$*) estén ordenados de mayor a menor [14].*

La pendiente de la curva de termomayorización a partir de cada punto de quiebre α_i va a estar dada por $\alpha_i = \tan^{-1}(p_i e^{\beta E_i})$. Como los términos $p_i e^{\beta E_i}$ se ordenan de mayor a menor, las pendientes α_i también lo van a estar. La consecuencia es que las curvas de termomayorización son siempre funciones cóncavas.

A partir de esta construcción, es posible probar que la relación de mayorización establecida por el Teorema 2.2.1 es equivalente a pedir que la curva de termomayorización asociada al estado ρ quede completamente por

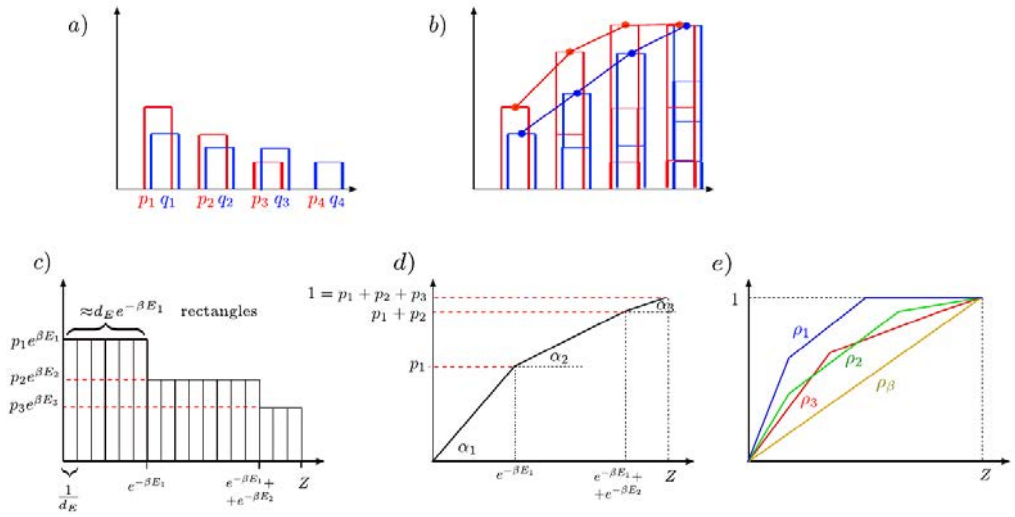


Figura 2.1: *La termomayorización surge a partir de la aplicación de la relación de mayorización sobre los autovalores del sistema SR. Dados los autovalores de ambos estados ordenados de mayor a menor (a), si todas las sumas parciales de uno de ellos supera a la del otro (b), entonces existe una relación de mayorización definida entre ambos. En el caso del sistema y el reservorio procedemos de la misma manera, con la única diferencia de que ahora los autovalores tienen degeneración mucho mayor (c). Al realizar las sumas parciales, dado que el paso es muy chico, obtenemos curvas lineales a trozos (d). Luego, un estado termomayoriza al otro si su curva asociada queda completamente por encima de la otra. De esta manera, puede suceder que entre dos estados ninguno de ellos mayorice al otro debido a que sus curvas se crucen entre sí (e). Figura extraída de [5]*

encima de la curva de termomayorización asociada al estado σ, es decir[2]:

Proposición 2.2.1

Sean ρ_S y σ_S dos estados semiclásicos. Entonces

$$\rho_S \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma_S \quad \Leftrightarrow \quad \sigma_S \prec_T \rho_S$$

Notemos que cualquier estado del sistema mayoriza al estado térmico τ_S del sistema. Esto quiere decir que todo estado puede ser transformado por medio de operadores termales a su estado térmico. Análogamente, a partir del estado térmico no se puede llegar a ningún otro estado del sistema, como ya se mencionó anteriormente. Es decir, cualquier estado térmico de un sistema representa un recurso gratuito. Por otro lado, puede suceder que entre dos estados no exista relación de termomayorización definida. Esto se debe a que sus curvas de termomayorización se crucen, en vez de ir una por encima de la otra. Sin embargo, la inclusión de un sistema auxiliar que funcione como catalizador permitirá definir una relación de termomayorización más general.

2.2.2. Segundas leyes de la termodinámica cuántica

Es posible encontrar ejemplos donde la relación de termomayorización entre dos estados ρ_S y σ_S no se cumple pero sin embargo existe una operación termal y un estado γ_A de un estado auxiliar A tal que la transformación

$$\rho_S \otimes \gamma_A \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma \otimes \gamma_A$$

es posible. De esta manera, el sistema A funciona como un catalizador de la transformación. Notemos que esta es la transformación más general que se puede dar por medio de operadores termales sin permitir pequeños errores, dado que el estado γ_A no se ve modificado al final de la trasformación. En tal caso, es posible derivar una familia de energías libres dadas por [6]

$$F_\alpha(\rho) = -k_B T \log Z_S + k_B T D_\alpha(\rho||\tau)$$

[2]Para mayor detalle de la equivalencia entre la termomayorización y el Teorema 2.2.1 consultar Apéndice C.

donde $\alpha \in [-\infty, \infty]$ y $D_\alpha(\cdot||\cdot)$ son las divergencias de Renyi [3]

$$D_\alpha(\rho||\sigma) = \frac{\mathrm{sgn}(\alpha)}{1-\alpha} \log \mathrm{tr}\, \rho^\alpha \sigma^{1-\alpha}$$

donde los casos $\alpha = -\infty, 0, 1, \infty$ se definen por continuidad. En el caso de transformaciones con catalizadores, se puede probar que es posible transformar un estado ρ en otro σ con fidelidad tan grande como se quiera, es decir, permitiendo un pequeño error, si y sólo si se cumple

$$F_\alpha(\sigma) \leq F_\alpha(\rho) \quad \forall \alpha \in [-\infty, \infty] \tag{2.7}$$

Para $\alpha = 1$ la energía libre F_1 coincide con la energía libre estándar (ecuación (1.1)), que es la cantidad que gobierna las transiciones en termodinámica estándar. Sin embargo, para sistemas microscópicos y con correlaciones fuertes entre sus partes se encuentra que existe toda una familia de energías libres F_α. El hecho de que F_α sea no decreciente a lo largo de las transformaciones termales impone más restricciones para las transiciones entre estados a escala microscópica.

Es importante destacar que para estados no necesariamente semiclásicos, es decir, estados con coherencias entre sus distintos niveles de energías, la familia de segundas leyes representan sólo una parte de las restricciones que las transformaciones deben cumplir. Es necesario incluir nuevos monótonos que establezcan que a lo largo de una operación termal las coherencias del sistema no pueden aumentar [23]. Dado $\alpha \in \mathbb{R}$ y un estado ρ cualquiera con Hamiltoniano H_S, se definen la familia de coherencias libres A_α como

$$A_\alpha(\rho) = D_\alpha(\rho||\mathcal{D}_{H_S}(\rho))$$

Las coherencias libres cuantifican que tan distinto es el estado ρ de su estado decoherente $\mathcal{D}_{H_S}(\rho)$. Es posible demostrar que una condición necesaria para que se de la transformación de un estado ρ a otro estado σ por medio de operadores termales con catalizadores es que se cumpla

$$A_\alpha(\sigma) \leq A_\alpha(\rho) \quad \forall \alpha \in [-\infty, \infty]$$

[3] En el Apéndice B se desarrollan más en profundidad las definiciones y propiedades de las distintas divergencias y entropías de Renyi.

2.3. Trabajo en termodinámica cuántica

Conocida la condición necesaria y suficiente para la transformación de estados por medio de operaciones termales, es posible caracterizar el trabajo que se puede extraer de un determinado estado y la cantidad de trabajo necesario para formarlo. La manera de hacer esto es introduciendo el sistema auxiliar del *work qubit*, el cual va a estar a cargo de introducir o almacenar energía proveniente del sistema. Vamos a diferenciar el trabajo que podemos extraer de un estado del trabajo que necesitamos introducir al sistema para formarlo. Clásicamente, ambas cantidades coinciden y están dadas por la diferencia de energía libre F_1. Sin embargo, en el marco de la termodinámica cuántica no sucede lo mismo. Notemos que las transformaciones de estados que se dan por medio de operaciones termales (sin el sistema *wit*) son transformaciones gratuitas en las cuales la energía del sistema no varía.

2.3.1. Trabajo de formación

Sea ρ_S el recurso que queremos formar. Dado que el estado térmico siempre representa un recurso gratuito, partimos del estado térmico del sistema τ_S para realizar la transformación. Buscamos los valores $w \in R_{\geq 0}$ tales que la transformación

$$\tau_S \otimes |w\rangle\langle w| \xrightarrow{\mathcal{E}} \rho_S \otimes |0\rangle\langle 0| \tag{2.8}$$

es posible. Luego, el trabajo de formación va a ser la mínima cantidad de energía que es necesaria introducir al sistema a través del *wit* tal que la transformación puede ser efectuada por medio de operadores termales.

Definición 2.3.1 (*Trabajo de Formación*)

Dado un estado ρ_S del sistema con Hamiltoniano H_S y una temperatura T, definimos el trabajo de formación del estado ρ_S, y lo notamos W_∞, como

$$W_\infty(\rho) = \inf\left\{w \in \mathbb{R}_{\geq 0} : \tau_S \otimes |w\rangle\langle w| \xrightarrow{\mathcal{E}} \rho_S \otimes |0\rangle\langle 0|\right\} \tag{2.9}$$

Es de gran importancia obtener una expresión cerrada para el trabajo de formación. El siguiente resultado muestra la relación que existe entre el trabajo de formación y la noción de divergencia.

Proposición 2.3.1 (*Trabajo de Formación*)

Dado un estado semiclásico ρ y una temperatura T, el trabajo de formación está dado por:

$$W_\infty(\rho) = k_B T D_\infty(\rho||\tau) \tag{2.10}$$

donde $D_\infty(\cdot||\cdot)$ es la divergencia infinito definida para distribuciones de probabilidad como[4]

$$D_\infty(p||q) = \log \max_i \left\{ \frac{p_i}{q_i} \right\} \tag{2.11}$$

Demostración : La demostración de este resultado es una consecuencia de la termomayorización de estados. Comencemos analizando el estado input. El estado $\tau_S \otimes |w\rangle\langle w|$ tiene autovalores no nulos iguales a $e^{-\beta E_i}/Z_S$ con autovector $|E_i\rangle \otimes |w\rangle$ y energía $E_i + w$, donde E_i son las distintas energías permitidas del sistema S. Al multiplicar los autovalores por el término de Gibbs asociado $e^{\beta(E_i+w)}$, la dependencia con E_i desaparece y la curva de termomayorización resulta ser la recta que une los puntos $(0,0)$, $(Z_S e^{-\beta w}, 1)$ y $(Z_S Z_R, 1)$ (Figura 2.2a).

Por otro lado, el estado output $\rho_S \otimes |0\rangle\langle 0|$ tiene los autovalores del estado ρ_S dados por p_i, con autoestado $|E_i\rangle \otimes |0\rangle$ y energía E_i. Una condición necesaria y suficiente para que el estado input termomayorice al estado output es que la pendiente a partir del origen de la primera sea mayor o igual que el de la segunda (Figura 2.2a). Es decir:

$$\max_{i=1,\ldots,D} \left\{ \frac{p_i}{e^{\beta E_i}} \right\} \leq \frac{1}{Z_S e^{-\beta w}}$$

Operando un poco sobre esta expresión se llega a que w está acotado de la siguiente manera

$$\log \max_{i=1,\ldots,D} \left\{ p_i Z_S e^{\beta E_i} \right\} \leq \beta w$$

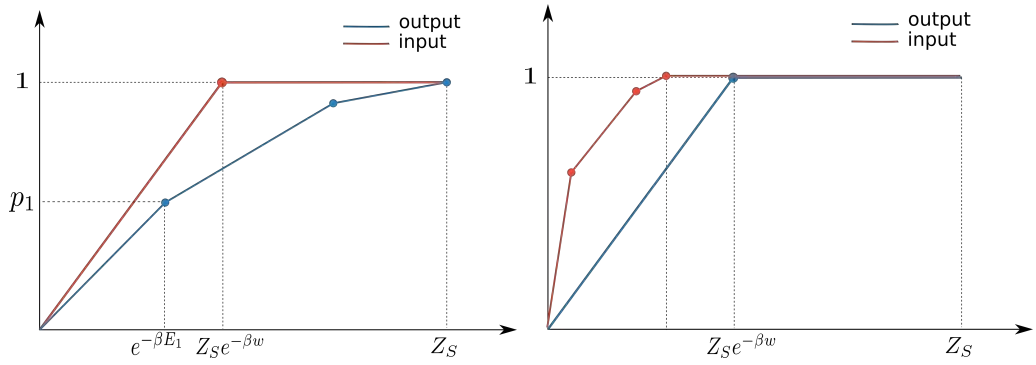
De donde se obtiene que el trabajo de formación esta dado por la fórmula (2.10) ■

Al igual que en termodinámica clásica, es posible definir una energía libre para procesos de formación de recursos. La energía libre de formación F_∞ se define como

$$F_\infty(\rho) = F_\beta + k_B T D_\infty(\rho||\tau) \tag{2.12}$$

donde $F_\beta = -k_B T \log Z_S$ es la energía libre estándar del estado térmico del

[4]La divergencia infinito $D_\infty(\cdot||\cdot)$ coincide con la divergencia de Renyi $D_\alpha(\cdot||\cdot)$ cuando se toma el límite $\alpha \to \infty$.



(a) *Proceso de formación.* ***(b)*** *Proceso de extracción.*

Figura 2.2: *Curvas de termomayorización para los procesos de formación (a) y extracción (b) de recursos.*

sistema. El trabajo de formación puede calcularse a partir de la diferencia de energía libre:

$$W_\infty(\rho) = F_\infty(\rho) - F_\infty(\tau) \tag{2.13}$$

2.3.2. Trabajo de extracción

Estudiemos ahora los procesos de destilación o de extracción. De la misma manera, para saber cuánta energía es posible extraer de un estado ρ_S analizamos la transformación

$$\rho_S \otimes |0\rangle\langle 0| \xrightarrow{\mathcal{E}} \tau_S \otimes |w\rangle\langle w| \tag{2.14}$$

y el trabajo de extracción se define como

Definición 2.3.2 (*Trabajo de Extracción*)

Dado un estado ρ_S del sistema con Hamiltoniano H_S y una temperatura T, definimos el trabajo de extracción del estado ρ_S, y lo notamos W_0, como

$$W_0(\rho) = \sup\left\{ w \in \mathbb{R}_{\geq 0} : \rho_S \otimes |0\rangle\langle 0| \xrightarrow{\mathcal{E}} \tau_S \otimes |w\rangle\langle w| \right\} \tag{2.15}$$

Al igual que como sucede con el trabajo de formación, el trabajo de extracción se relaciona con una medida de divergencia.

Proposición 2.3.2 (*Trabajo de Extracción*)

Dado un estado ρ y una temperatura T, el trabajo de extracción esta dado por:

$$W_0(\rho) = k_B T D_0(\rho||\tau) \tag{2.16}$$

donde[5]

$$D_0(p||q) = -\log \sum_{i:p_i \neq 0} q_i \tag{2.17}$$

Demostración : En este caso los autovalores del estado input son de la forma p_i con energía igual a E_i mientras que los autovalores del output son $e^{-\beta E_i}/Z_S$ con energía $E_i + w$. La curva de mayorización del output va a ser nuevamente la recta que une los puntos $(0,0)$, $(Z_S e^{-\beta w}, 1)$ y $(Z_S Z_R, 1)$. Dado que la curva de termomayorización del input tiene más pendiente en $(0,0)$ que el output, la condición necesaria y suficiente para que la curva de termomayorización del estado input esté por encima del output es que a partir del $Z_S e^{-\beta w}$ la curva de termomayorización del estado input sea idénticamente 1 (Figura 2.2b). Para que esto suceda debe cumplirse

$$\sum_{i:p_i \neq 0} e^{-\beta E_i} \leq Z_S e^{-\beta w}$$

de donde se llega fácilmente a

$$w \leq -\log \sum_{i:p_i \neq 0} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z_S}$$

■

La energía libre en el caso de los procesos de extracción está dada por

$$F_0(\rho) = F_\beta + k_B T D_0(\rho||\tau) \tag{2.18}$$

y el trabajo de extracción está dado por

$$W_0(\rho) = F_0(\rho) - F_0(\tau) \tag{2.19}$$

A modo de resumen, en la Tabla 2.1 se comparan el proceso de formación y el de extracción. Es importante observar que las expresiones para el trabajo de formación y extracción para el caso de transformaciones con catalizadores no se ven modificadas [6].

[5] La divergencia $D_0(\cdot||\cdot)$ coincide con la divergencia de Renyi $D_\alpha(\cdot||\cdot)$ cuando se toma el límite $\alpha \to 0$.

	Extracción o destilación	Formación
Transformación	$\rho_S \otimes \tau_W \mapsto \sigma_S \otimes \lvert w\rangle\langle w\rvert$	$\tau_S \otimes \lvert w\rangle\langle w\rvert \mapsto \rho_S \otimes \rho_W$
Divergencia asociada	$D_0(p\|\|q) = -\log \sum_{i:p_i \neq 0} q_i$	$D_\infty(p\|\|q) = \log \text{máx}_i \left\{ \frac{p_i}{q_i} \right\}$
Condición	$D_0(\rho_S\|\|\tau_S) \geq D_0(\lvert w\rangle\langle w\rvert \,\|\|\tau_W)$	$D_\infty(\lvert w\rangle\langle w\rvert \,\|\|\tau_W) \geq D_\infty(\rho_S\|\|\tau_S)$
Energía Libre	$F_0(\rho) = F_\beta + k_B T D_0(\rho\|\|\tau)$	$F_\infty(\rho) = F_\beta + k_B T D_\infty(\rho\|\|\tau)$
Trabajo	$W_0 = k_B T D_0(\rho\|\|\tau)$	$W_\infty = k_B T D_\infty(\rho\|\|\tau)$

Cuadro 2.1: *Tabla comparativa entre las cantidades más relevantes involucradas en los procesos de extracción de trabajo y de formación de recursos.*

2.3.3. Reversibilidad en termodinámica cuántica

Los resultados anteriores nos permiten calcular la cantidad máxima de energía que podemos extraer de un estado ρ y la cantidad mínima de energía que es necesaria introducir en un sistema para formarlo a partir de un estado térmico. A diferencia de lo que sucede en termodinámica clásica, en general en termodinámica cuántica ambas cantidades son distintas. Se puede probar que[6]

$$D_0(\rho||\tau) \leq D_\infty(\rho||\tau) \tag{2.20}$$

donde la desigualdad es estricta salvo para una familia muy particular de estados ρ. Es decir que en general el trabajo de formación es estrictamente mayor que el trabajo de extracción, lo cual implica que hay parte de la energía que se introduce al sistema S que no puede ser recuperada. Por otro lado, esto nos dice que a escala nanoscópica los transformaciones termodinámicas no son reversibles. En general, la energía libre estándar $F_1(\rho)$ es estrictamente menor que la energía libre de formación y mayor que la de extracción, es decir $F_0(\rho) < F_1(\rho) < F_\infty(\rho)$ para casi todo estado ρ. Sin embargo, más adelante veremos que es posible encontrar estados reversibles para los cuales vale la igualdad.

2.4. Energía libre estándar en teoría de recursos

Una propiedad que debe cumplir toda teoría que generalice la termodinámica es la de recuperar los resultados estándar en el límite adecuado. Sin embargo, si hacemos tender la dimensión del sistema a infinito sin ninguna hipótesis extra, no recuperamos el límite termodinámico. Por

[6]Para más detalle, consultar Apéndice B

un lado, para todo estado mixto ρ distinto al estado de Gibbs se tiene $W_0(\rho) < W_1(\rho) < W_\infty(\rho)$. A su vez, para el estado separable $\rho^{\otimes N}$ se cumple $W_{0,1,\infty}(\rho_N) = NW_{0,1,\infty}(\rho_1)$. Por lo tanto, cuando $N \to \infty$ no se recuperan los resultados de termodinámica estándar. De la misma manera que la mecánica estadística resulta ser una teoría compatible con la termodinámica, bajo ciertas condiciones y en el límite correcto se puede recuperar la termodinámica a partir de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica.

A continuación se comentan brevemente distintas alternativas. Sin embargo, a lo largo de los siguientes capítulos vamos a explorar una nueva posibilidad. La misma incluye permitir pequeñas correlaciones entre las N copias del sistema S. Como veremos más adelante, admitir correlaciones entre las partes del sistema permite recuperar el límite termodinámico de una manera natural y elegante.

2.4.1. Transformaciones con infinitas copias

Una forma simple de recuperar el límite termodinámico es estudiando cuantas copias m del estado output σ es posible destilar u obtener a partir de n copias del estado input ρ por medio de operaciones termales. Definimos la tasa óptima de transformación del proceso $R(\rho \mapsto \sigma)$ como

$$R(\rho \mapsto \sigma) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sup \left\{ m \in \mathbb{N} : \text{es posible destilar } \sigma^{\otimes m} \text{ a partir de } \rho^{\otimes n} \right\}$$

Luego, es posible demostrar que [4]

$$R(\rho \mapsto \sigma) = \frac{W_1(\rho)}{W_1(\sigma)}$$

Para $n \gg 1$, esperamos que la energía que se puede extraer del estado $\rho^{\otimes n}$ sea asintóticamente igual a $nW_1(\rho)$. A partir de esa energía es posible construirse m copias de otro sistema σ si se cumple $mW_1(\sigma) \leq nW_1(\rho)$, lo cual es exactamente lo que establece este resultado. Es importante observar que esté resultado es válido cuando se permite un error de orden menor que $\mathcal{O}(N)$ en la transformación.

Si bien esta manera de recuperar la termodinámica es simple y directa, no queda claro desde el formalismo de los trabajos de formación y extracción cómo recuperar este resultado. Dado que estos últimos describen correctamente el comportamiento de sistemas físicos de dimensiones nanoscópicas, es deseable poder recuperar el mismo resultado a partir de ellos.

2.4.2. Transformaciones con error

Otra manera de recuperar el límite termodinámico es permitiendo un pequeño error ϵ en el estado ρ [5]. Notemos de la ecuación (2.16) que para todo estado de rango completo (es decir, con $p_i \neq 0$) el trabajo de formación va a ser cero. Esto resulta muy desfavorable, dado que la familia de estados que no son de rango completo es mucho más chica que la otra. Por lo tanto, si se elige un estado al azar del sistema es casi seguro que el trabajo que se puede extraer sea nulo.

Dado un $\epsilon > 0$ definimos el trabajo de extracción con error ϵ como

$$F_0^\epsilon(\rho) = \inf_{\rho_\epsilon : ||\rho - \rho_\epsilon||_1 < \epsilon} F_0(\rho_\epsilon)$$

donde el ínfimo esta tomado sobre todos los estados ρ_ϵ que están a distancia menor que ϵ del estado ρ, donde la distancia esta dada por la norma 1 entre operadores. Podemos definir la misma cantidad para el trabajo de formación

$$F_\infty^\epsilon(\rho) = \inf_{\rho_\epsilon : ||\rho - \rho_\epsilon||_1 < \epsilon} F_\infty(\rho_\epsilon)$$

Permitiendo un pequeño error, es posible recuperar en el límite donde hay muchas copias del sistema que $F_0^\epsilon(\rho) \approx F_\infty^\epsilon(\rho)$.

2.4.3. Transformaciones con catalizadores

La teoría de transformaciones con catalizadores es un área de investigación que ha sido muy estudiada en los últimos años. Uno de estos trabajos propone realizar transformaciones con varios sistemas auxiliares sirviendo de catalizadores [25]. Para recuperar la condición estándar de que la transformación $\rho \mapsto \sigma$ es posible sí y sólo si $F_1(\sigma) \leq F_1(\rho)$, la clave se encuentra en permitir la creación de correlaciones entre los sistemas anciliarios durante la operación termal. Formalmente, sea γ_i, $i = 1, 2, \ldots, n$ el estado de cada uno de los n sistemas anciliarios y sea la transformación

$$\rho \otimes \gamma_1 \otimes \cdots \otimes \gamma_n \xrightarrow{\mathcal{E}} \sigma_\epsilon \otimes \gamma_{1,2,\ldots,n} \tag{2.21}$$

donde σ_ϵ es un estado arbitrariamente cercano a σ y $\gamma_{1,2,\ldots,n}$ es un estado de los n sistemas catalizadores tal que la traza parcial sobre todos los sistemas salvo el sistema i es γ_i. En este contexto, se puede probar que la transformación dada por la ecuación (2.21) es posible si y sólo si $F_1(\sigma) \leq F_1(\rho)$.

Capítulo 3

Correlaciones en Termodinámica Cuántica

Habiendo sido introducidos los resultados fundamentales dentro de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica, pasaremos a explicar el problema concreto que se trabaja en esta tesis, a la vez que se muestran los resultados más importantes respecto de su resolución.

En esta tesis proponemos abordar el problema del estudio de las correlaciones y su relación con el trabajo de extracción y formación. Existen varios trabajos donde analizan la posibilidad de extraer trabajo a partir de las correlaciones y el trabajo necesario para formar las mismas. Sin embargo, ninguno de estos trabajos trata el problema a partir de la teoría de recursos. Este problema es amplio y difícil de tratar en el caso general, por lo que nos centraremos en el caso más simple que es el de analizar lo que sucede con estados multipartitos localmente equivalentes.

Como fue explicado anteriormente, existe una diferencia entre el trabajo necesario para formar un recurso y el trabajo que es posible extraer del mismo. Esta diferencia es de gran importancia debido a que implica que la mayoría de las transformaciones son irreversibles. Sin hipótesis auxiliares sobre el sistema físico, se tiene que aún en el límite termodinámico esto sigue siendo válido. Es en este contexto en el cual estas hipótesis auxiliares comienzan a adquirir mayor importancia.

Por otro lado, es de gran interés comprender cuál es el rol que juegan las correlaciones entre las distintas partes de un sistema en su comporta-

miento termodinámico. Por ejemplo, un interrogante muy interesante que proponemos abordar es si las correlaciones permiten disminuir el trabajo de formación de un sistema o aumentar el trabajo extraíble del mismo. Supongamos que se desean formar dos estados ρ_1 y ρ_2 que van a ser destinados a dos laboratorios distintos. La energía necesaria para formar ambos recursos está dada por:

$$W_\infty(\rho_1 \otimes \rho_2) = W_\infty(\rho_1) + W_\infty(\rho_2)$$

Si ambos experimentos son independientes, podríamos realizar la misma tarea a partir de un estado conjunto del sistema ρ_{12} que cumpla

$$\mathrm{tr}_2(\rho_{12}) = \rho_1 \qquad \mathrm{tr}_1(\rho_{12}) = \rho_2$$

siempre que el trabajo de formación del sistema ρ_{12} sea menor que el de las dos partes separadas:

$$W_\infty(\rho_{12}) < W_\infty(\rho_1) + W_\infty(\rho_2)$$

A su vez, debido a la subaditividad de la entropía de von Neumann, tendríamos que la entropía total del sistema disminuye respecto de la entropía marginal de los estados:

$$S(\rho_{12}) < S(\rho_1) + S(\rho_2)$$

o, equivalentemente, la entropía mutua es positiva. Por lo tanto, la idea es encontrar estados correlacionados que disminuyan el trabajo de formación disminuyendo la entropía global del sistema y conservado los estados locales de cada copia.

Sobre esta posibilidad es que se desarrolla la presente tesis. Vamos a responder preguntas tales como:

- ¿Cuál es la mínima cantidad de energía que es necesaria invertir para formar un estado de la forma ρ_{12}?
- ¿Es posible recuperar el límite termodinámico cuando permitimos correlaciones entre las distintas partes del sistema?
- ¿Es posible definir transformaciones reversibles para estos sistemas nanoscópicos?

En el presente capítulo se responden a estas preguntas. A su vez, vamos a ir viendo que las distintas respuestas abren nuevos interrogantes y delatan nuevas propiedades de los sistemas cuánticos. Se comienza trabajando con

sistemas formados por N copias de un sistema de dimensión dos (qubit) donde todas las copias son localmente equivalentes. Sin embargo, en el Capítulo 5 se muestra que los mismos resultados siguen siendo válidos para sistemas de dimensión arbitraria.

3.1. El problema

El sistema físico de estudio se encuentra compuesto por N sistemas S de dimensión D finita y Hamiltoniano H_S. Dado un estado semiclásico ρ del sistema S, vamos a estudiar la transformación por medio de operadores termales de la forma

$$\tau^{\otimes N} \xrightarrow{\mathcal{E}} \rho^{(N)} \tag{3.1}$$

donde $\rho^{(N)}$ es un estado correlacionado de las N partes localmente igual al estado ρ, es decir

$$\mathrm{tr}_{-i}\left(\rho^{(N)}\right) = \rho \quad \forall i = 1, 2, \ldots, N \tag{3.2}$$

donde tr_{-i} denota la traza sobre todos los sistemas excepto el sistema i:

$$\mathrm{tr}_{-i}(\cdot) = \mathrm{tr}_{1,2,\ldots,i-1,i+1,\ldots,N}(\cdot)$$

A lo largo de la tesis entenderemos por copia correlacionada a cada una de las partes del sistema con estado $\rho^{(N)}$. Por el contrario, las copias no correlacionadas son cada una de las partes del estado separable $\rho^{\otimes N}$. Notemos que el estado local de una copia correlacionada y no correlacionada es el mismo, pero la diferencia está en que en el primer caso el sistema está correlacionado con cada una de las otras partes del sistema.

El objetivo es hallar estados correlacionados $\rho^{(N)}$ que minimicen el trabajo de formación. El conjunto de estados factibles queda definido como el conjunto de todos los estados compuestos por los N sistemas que localmente son iguales a un estado ρ. Exceptuando al estado separable $\rho^{\otimes N}$, este conjunto va a estar formado por estados correlacionados de las N partes.

Definición 3.1.1 (*Estados factibles*)

Dado un estado ρ del sistema S y $N \in \mathbb{N}$, sea el conjunto $\mathcal{C}(\rho, N)$ de estados de las N partes del sistema S dado por

$$\mathcal{C}(\rho, N) = \left\{\rho^{(N)} : \mathrm{tr}_{-i}(\rho^{(N)}) = \rho \quad \forall i = 1, 2, \ldots, N\right\} \tag{3.3}$$

Definido el conjunto de estados correlacionados de las N partes, nos preguntamos cuál es el mínimo trabajo necesario para formar N copias correlacionadas del estado ρ. Para ello buscamos sobre todos los estados del conjunto $\mathcal{C}(\rho, N)$ aquel que tenga menor trabajo de formación.

Definición 3.1.2 (*Trabajo de formación correlacionado*)

Dado un estado ρ del sistema S y un número de copias N, definimos el trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$ como la mínima energía requerida para formar N copias del estado ρ correlacionadas entre si, es decir

$$\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho, N) = \min_{\rho^{(N)} \in \mathcal{C}(\rho, N)} W_\infty(\rho^{(N)}) \tag{3.4}$$

Dadas $E_1 \leq E_2 \leq \ldots \leq E_D$ las distintas energías permitidas del sistema S, es decir, los autovalores del Hamiltoniano H_S, y asumiendo que los estados ρ y $\rho^{(N)}$ son semiclásicos, es posible escribir a los estados ρ y $\rho^{(N)}$ como

$$\rho = \sum_{d=1}^{D} p_d \left|E_d\right\rangle\!\left\langle E_d\right|$$

$$\rho^{(N)} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{d_i=1}^{D} \lambda_{d_1, d_2, \ldots, d_N} \left|E_{d_1}, E_{d_2}, \ldots, E_{d_N}\right\rangle\!\left\langle E_{d_1}, E_{d_2}, \ldots, E_{d_N}\right|$$

donde p_d son los autovalores del estado ρ y $\lambda_{d_1, d_2, \ldots, d_N}$ representa la probabilidad de encontrar al i-ésimo sistema con energía E_{d_i} para cada $i = 1, 2, \ldots, N$. Si trazamos sobre todos los sistemas exceptuando la j-ésima copia se obtiene:

$$\mathrm{tr}_{-j}(\rho^{(N)}) = \sum_{i \neq j} \sum_{d_i=1}^{D} \lambda_{d_1, d_2, \ldots, d_N} \left|E_{d_j}\right\rangle\!\left\langle E_{d_j}\right|$$

Por lo tanto, se deduce que la condición de traza parcial dada por la

ecuación (3.2) se va a cumplir si y sólo si

$$p_d = \sum_{i \neq j} \sum_{d_i=1}^{D} \lambda_{d_1,\ldots,d_{j-1},d,d_{j+1},\ldots,d_N} \quad \forall d, j \tag{3.5}$$

Por otro lado, el estado térmico de las N copias está dado por

$$\tau^{\otimes N} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{d_i=1}^{D} \frac{e^{-\beta\left(E_{d_1}+E_{d_2}+\ldots+E_{d_N}\right)}}{Z_S^N} |E_{d_1}, E_{d_2}, \ldots, E_{d_N}\rangle\langle E_{d_1}, E_{d_2}, \ldots, E_{d_N}|$$

donde $\beta = k_B T$ es la temperatura inversa del reservorio y Z_S es la función del partición del sistema S

$$Z_S = \sum_{i=1}^{D} e^{-\beta E_i}$$

Estamos interesados en encontrar el estado $\rho^{(N)}$ con trabajo de formación mínimo dado por

$$W_\infty(\rho^{(N)}) = k_B T \log \max_{d_1,\ldots,d_N} \left\{ \lambda_{d_1,\ldots,d_N} e^{\beta\left(E_{d_1}+\ldots+E_{d_N}\right)} Z_S^N \right\} \tag{3.6}$$

Notemos que debido a que el término térmico sólo depende de la energía total $E_{d_1}+E_{d_2}+\ldots+E_{d_N}$ de cada configuración de las N partes del sistema, el estado $\rho^{(N)}$ que minimice el trabajo de formación va a quedar completamente caracterizado por su distribución de energía. La probabilidad de que el sistema de las N partes se encuentre en una configuración con energía total E está dada por

$$p_E = \sum_{d_1,\ldots,d_N : \sum_{i=1}^{N} E_{d_i} = E} \lambda_{d_1,d_2,\ldots,d_N}$$

Si observamos la distribución de energía p_E que induce algún estado $\rho^{(N)}$ que minimice el trabajo de formación y llamamos $g(E)$ a la degeneración, de la ecuación (3.6) es claro que la mejor manera de repartir la probabilidad p_E entre los $g(E)$ estados con esa energía es uniformemente. Fijada una energía, la manera de asegurar que el máximo sea lo más chico posible es que todos los elementos sean lo más homogéneos posibles. Podemos resumir esto de la siguiente manera

$$\sum_{i=1}^{D} E_{d_i} = \sum_{i=1}^{D} E_{\hat{d}_i} \Rightarrow \lambda_{d_1,\ldots,d_N} = \lambda_{\hat{d}_1,\ldots,\hat{d}_N} \tag{3.7}$$

lo cual es equivalente a decir

$$\lambda_{d_1,\ldots,d_N} = \frac{p_{E_{d_1}+\ldots+E_{d_N}}}{g_N(E_{d_1}+\ldots+E_{d_N})} = \lambda_{E_{d_1}+\ldots+E_{d_N}}$$

donde $g_N(\cdot)$ es la degeneración en energía del sistema de N partes. Por lo tanto podemos restringir el conjunto de búsqueda a los estados de la forma

$$\rho^{(N)} = \sum_E p_E \sum_{\psi:E(\psi)=E} \frac{1}{g_N(E)} |\psi\rangle\langle\psi| \tag{3.8}$$

Esto simplifica el problema de encontrar estados que minimicen el trabajo de formación. Dado un estado $\rho^{(N)} \in \mathcal{C}(\rho)$ que minimice el trabajo de formación y suponiendo que no cumple la ecuación (3.7) podemos construir un nuevo estado con mismo trabajo de formación que además es homogéneo dentro de cada subespacio de energía, es decir, que cumpla la ecuación (3.7). Más aun, esta transformación se puede realizar por medio de un operador termal. Por otro lado, esto implica que existe un estado con trabajo de formación correlacionado que es simétrico ante el intercambio de sistemas.

Luego, la condición (3.5) también se simplifica y obtenemos

$$\begin{aligned} p_d &= \sum_{i\neq j} \sum_{d_i=1}^{D} \lambda_{d_1,\ldots,d_{j-1},d,d_{j+1},\ldots,d_N} \\ &= \sum_{E\in\mathcal{E}_N} g_{N-1}(E-E_d)\lambda_E \quad \forall d = 1,2,\ldots,D \end{aligned} \tag{3.9}$$

donde la suma se realiza sobre todos las energías permitidas para el sistema de N partes $\mathcal{E}_N$, y λ_E denota a cualquiera de los autovalores de las configuraciones con energía total E. Notemos que cada uno de los términos $g_{N-1}(E-E_d)\lambda_E$ representa la probabilidad de que alguna de las copias correlacionadas se encuentre con energía local E_d condicionado a que la energía total del sistema es E. En la siguiente proposición se resume las observaciones previas.

Proposición 3.1.1

Dado un estado ρ y $N \in \mathbb{N}$, se tiene que

$$\min_{\rho^{(N)}\in\mathcal{C}(\rho)} W_\infty(\rho^{(N)}) = \min_{\rho^{(N)}\in\mathcal{C}^*(\rho)} W_\infty(\rho^{(N)}) \tag{3.10}$$

donde $\mathcal{C}^*(\rho)$ es el conjunto de estados de la forma (3.8) *que satisfacen la condición* (3.9).

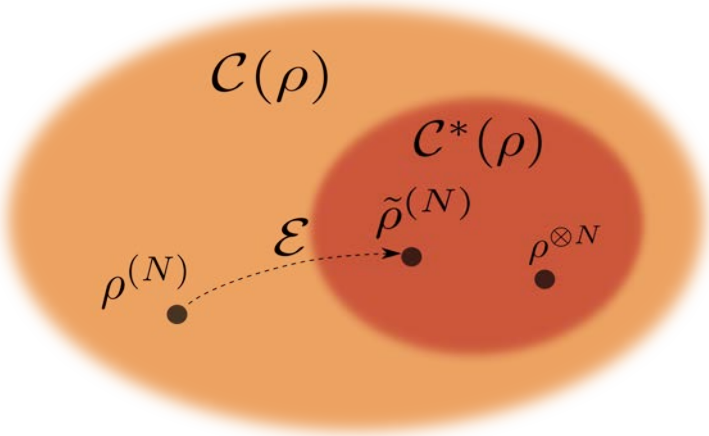


Figura 3.1: *Dado un estado correlacionado de las N partes $\rho^{(N)} \in \mathcal{C}(\rho)$ que minimice el trabaja de formación, es posible construirse un nuevo estado $\tilde{\rho}^{(N)} \in \mathcal{C}^*(\rho)$ que cumpla* (3.7) *y por lo tanto quede completamente caracterizado por su distribución de energía. A su vez, dado que cualquier operación unitaria sobre subespacios de energía contante es una operación termal, se tiene que $\rho^{(N)} \xrightarrow{\mathcal{E}} \tilde{\rho}^{(N)}$.*

De está manera, el problema de encontrar estados correlacionados de las N copias que minimicen el trabajo de formación se reduce a buscar sobre el conjunto de estados que son localmente equivalentes al estado microcanónico. En el mismo espíritu, para sistemas entrelazados con su entorno en un estado puro se puede probar que el sistema también debe ser localmente microcanónico [26]. En nuestro caso, son las correlaciones clásicas en vez del entrelazamiento las que llevan a estados localmente microcanónicos. En la Figura 3.1 se ilustra lo anteriormente mencionado.

La búsqueda del estado correlacionado con menor trabajo de formación se reduce a buscar soluciones del siguiente problema de optimización con restricciones:

$$\begin{aligned}
&\min_{\{\lambda_E\}_{E\in\mathcal{E}_N}} k_B T \log\left[\max_E \left\{\lambda_E e^{\beta E} Z_S^N\right\}\right] \\
&\text{sujeto a} \qquad \sum_{E\in\mathcal{E}_N} g_{N-1}(E-E_d)\lambda_E = p_d \qquad \forall d = 1,2,\ldots,D \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad \lambda_E \geq 0 \qquad\qquad \forall E \in \mathcal{E}_N
\end{aligned}$$

Antes de continuar, vamos a realizar un cambio de variables que va a simplificar un poco la notación y la interpretabilidad de los resultados. Definimos para todas las energías permitidas del sistema $E \in \mathcal{E}_N$ el cociente entre los autovalores del estado de N partes con los autovalores del estado

térmico:

$$q_E = \lambda_E e^{\beta E} Z_S^N \tag{3.11}$$

De esta manera el problema de optimización queda reescrito de la siguiente manera

$$\min_q \quad ||q||_\infty$$

$$\text{sujeto a} \qquad \sum_{E\in\mathcal{E}_N} \frac{g_{N-1}(E-E_d)}{Z_S^N} e^{-\beta E} q_E = p_d \qquad \forall d = 1,2,\ldots,D \tag{3.12}$$

$$q_E \geq 0 \qquad \forall E \in \mathcal{E}_N \tag{3.13}$$

donde $||\cdot||_\infty$ denota la norma infinito y hemos omitido el termino $k_B T$ y la función logaritmo debido a que no modifican el problema.

A continuación se muestra una caracterización completa de los estados que minimizan el trabajo de formación para el caso donde cada sistema consiste en un único qubit, es decir, para $D = 2$. El caso de dimensión D arbitraria se estudia con mayor detalle a lo largo del capítulo 5.

3.2. Caso $D = 2$

Para el caso donde $D = 2$, el Hamiltoniano del sistema puede ser escrito como $H_S = E_0 \left|E_0\right\rangle\!\left\langle E_0\right|$ y el estado local como

$$\rho = (1-p)\left|0\right\rangle\!\left\langle 0\right| + p\left|E_0\right\rangle\!\left\langle E_0\right|$$

con $p \in [0,1]$. A su vez, la degeneración $g_N(\cdot)$ esta dada por

$$g_N(mE_0) = \binom{N}{m} \quad m = 0,1,\ldots,N$$

Las restricciones (3.12) y (3.13) quedan escritas de una forma mucho más simple:

$$\sum_{m=0}^{N} \frac{1}{Z_S^N}\binom{N}{m} e^{-\beta m E_0} q_m = \sum_{m=0}^{N} g_m q_m = 1$$

$$\sum_{m=o}^{N} \frac{1}{Z_S^N}\frac{m}{N}\binom{N}{m} e^{-\beta m E_0} q_m = \sum_{m=0}^{N} \frac{m}{n} g_m q_m = p$$

donde

$$g_m = \frac{1}{Z_S^N}\binom{N}{m}e^{-\beta m E_0} \tag{3.14}$$

Luego, el siguiente teorema caracteriza al estado que minimiza el trabajo de formación, a la vez que da una expresión cerrada para el mismo.

Teorema 3.2.1 (*Solución exacta. Caso $D = 2$*)

Consideremos el problema de optimización dado por

$$\min_{q\in\mathbb{R}^{N+1}} \quad ||q||_\infty$$

$$\text{sujeto a} \quad \sum_{m=0}^{N} g_m q_m = 1 \tag{3.15}$$

$$\sum_{m=0}^{N} m g_m q_m = Np \tag{3.16}$$

$$q_m \geq 0 \tag{3.17}$$

donde $p \in [0,1]$, $N \in \mathbb{N}$ y g_m son números reales positivos. Entonces existe una única solución al problema y es de la forma

$$q_m^* = \begin{cases} Z & \text{si } m \in U \\ 0 & \text{si } m \in L \\ s & \text{si } m \in (U \cup L)^c \end{cases} \tag{3.18}$$

donde $Z, s \in \mathbb{R}_{\geq 0}$, $s < Z$ y U y L son dos intervalos de índices consecutivos tales $|(U \cup L)^c| \leq 1$, es decir, que la función óptima q^* vale cero o realiza su norma infinito en todos los índices salvo a lo sumo en un sólo índice c. Más aún, se tiene:

$$Z = \frac{c - Np}{\sum_U (c-m) g_m} \qquad s = \frac{1}{g_c}\frac{\sum_U (Np - m) g_m}{\sum_U (c-m) g_m} \tag{3.19}$$

Demostración : Dado que la norma infinito $||\cdot||_\infty$ define una distancia en $\mathbb{R}^{N+1}$ y que el conjunto de restricciones (3.15), (3.16) y (3.17) definen un conjunto convexo acotado en el mismo espacio, la existencia de una solución óptima queda garantizada. La unicidad de la solución la veremos luego.

Para ver que la solución óptima es de la forma (3.18), supongamos que existe otra solución $q^\dagger$ con norma infinito más chica. Es decir, existen índices

$a, b \in \{0, 1, \ldots, N\}$ tales que $0 < q_a^\dagger, q_b^\dagger < ||q^\dagger||_\infty$. Sean los conjuntos

$$U^\dagger = \left\{ m : q_m^\dagger = ||q^\dagger||_\infty \right\}$$
$$L^\dagger = \left\{ m : q_m^\dagger = 0 \right\}$$

Luego, dado que $q^\dagger$ cumple las restricciones (3.15) y (3.16) se tiene:

$$\begin{aligned}
\sum_{m=0}^{n} g_m q_m^\dagger &= ||q^\dagger||_\infty \sum_{m \in U^\dagger} g_m + \sum_{m \in (U^\dagger \cup L^\dagger)^c} g_m q_m^\dagger \\
&= (||q^\dagger||_\infty - \epsilon) \sum_{m \in U^\dagger} g_m + \sum_{m \in (U^\dagger \cup L^\dagger)^c} g_m q_m^\dagger + \epsilon \sum_{m \in U^\dagger} g_m \\
&= 1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{m=0}^{n} m g_m q_m^\dagger &= ||q^\dagger||_\infty \sum_{m \in U^\dagger} m g_m + \sum_{m \in (U^\dagger \cup L^\dagger)^c} m g_m q_m^\dagger \\
&= (||q^\dagger||_\infty - \epsilon) \sum_{m \in U^\dagger} m g_m + \sum_{m \in (U^\dagger \cup L^\dagger)^c} m g_m q_m^\dagger + \epsilon \sum_{m \in U^\dagger} m g_m \\
&= np
\end{aligned}$$

donde $\epsilon > 0$ es una constante. Veamos que en tal caso existe otra solución factible $q^{\dagger\dagger}$ tal que $||q^{\dagger\dagger}||_\infty < ||q^\dagger||_\infty$. Sea $q^{\dagger\dagger}$ de la forma

$$q_m^{\dagger\dagger} = \begin{cases} ||q^\dagger||_\infty - \epsilon & \text{si } m \in U^\dagger \\ q_a^{\dagger\dagger} & \text{si } m = a \\ q_b^{\dagger\dagger} & \text{si } m = b \\ 0 & \text{si } m \notin U^\dagger \cup \{a, b\} \end{cases}$$

donde $q_a^{\dagger\dagger}$, $q_b^{\dagger\dagger}$ y ϵ son constantes a determinar de manera tal que $q^{\dagger\dagger}$ cumpla las restricciones. Por otro lado si $q_a^{\dagger\dagger}, q_b^{\dagger\dagger} < ||q^\dagger||_\infty - \epsilon$ entonces se tiene que $q^{\dagger\dagger}$ es un mejor mínimo que $q^\dagger$. Para que $q^{\dagger\dagger}$ cumpla las restricciones (3.15) y (3.16) basta ver que existen $q_a^{\dagger\dagger}, q_b^{\dagger\dagger}, \epsilon > 0$ tales que

$$\begin{bmatrix} g_a & g_b \\ a g_a & b g_b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_a^{\dagger\dagger} \\ q_b^{\dagger\dagger} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_a q_a^\dagger + g_b q_b^\dagger + \epsilon \sum_{m \in U^\dagger} g_m \\ a g_a q_a^\dagger + b g_b q_b^\dagger + \epsilon \sum_{m \in U^\dagger} m g_m \end{bmatrix}$$

Dado que $g_a, g_b \neq 0$ y $a \neq b$, la matriz que aparece en el término izquierdo resulta ser inversible. Despejando se obtiene

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} q_a^{\dagger\dagger} \\ q_b^{\dagger\dagger} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} q_a^\dagger \\ q_b^\dagger \end{bmatrix} + \epsilon \frac{(g_a g_b)^{-1}}{b - a} \begin{bmatrix} b g_b \sum_{m \in U^\dagger} - g_b \sum_{m \in U^\dagger} m g_m \\ g_a \sum_{m \in U^\dagger} m g_m - a g_a \sum_{m \in U^\dagger} g_m \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} q_a^\dagger \\ q_b^\dagger \end{bmatrix} + \epsilon \begin{bmatrix} s_a \\ s_b \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Dado que $0 < q_a^\dagger, q_b^\dagger < ||q^\dagger||_\infty$ y que s_a, s_b no dependen de $q^{\dagger\dagger}$ va a existir $\epsilon > 0$ tal que se cumpla $0 < q_a^{\dagger\dagger}, q_b^{\dagger\dagger} < ||q^\dagger||_\infty - \epsilon$. Por lo tanto $q^{\dagger\dagger}$ cumple las restricciones (3.15), (3.16) y (3.17) y además $||q^{\dagger\dagger}||_\infty < ||q^\dagger||_\infty$. Concluimos que $q^\dagger$ no puede ser solución del problema de optimización, por lo tanto la solución debe ser necesariamente de la forma (3.18).

Por otra parte, los Z y s deben satisfacer el sistema de ecuaciones

$$\begin{bmatrix} \sum_{m\in U} g_m & g_c \\ \sum_{m\in U} m g_m & c g_c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z \\ s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ Np \end{bmatrix}$$

donde $(U \cup L)^c = \{c\}$, de lo que se deduce que Z y s son de la forma (3.19). Además la solución es única.

Para ver que U y L son intervalos de índices consecutivos, tenemos que ver que, fijado el c, se tiene $U = \{0, 1, \ldots, c-1\}$ y $L = \{c+1, c+2, \ldots, N\}$ o bien $U = \{c+1, c+2, \ldots, N\}$ y $L = \{0, 1, \ldots, c-1\}$. Sin embargo a partir de las restricciones y de la caracterización de la solución se obtiene que

$$Z = \frac{1 - s g_c}{\sum_U g_m}$$

Fijado el c y el s para cumplir la otra restricción, es claro que la manera de minimizar aún más el valor de Z es haciendo que U sea un conjunto de índices consecutivos que sea lo más grande posible. La manera de asegurar esto es que sea $U = \{0, 1, \ldots, c-1\}$ o $U = \{c+1, c+2, \ldots, N\}$. De igual manera, de la ecuación (3.19) fijado el U es claro que ver que c debe ser un índice consecutivo al intervalo U, para asegurar que Z sea positivo y lo más chico posible. ■

La distribución de energía del estado óptimo va a ser, salvo a lo sumo para una única energía, la distribución de Gibbs sobre un intervalo de energías y cero sobre otro conjunto, es decir:

$$\lambda_{mE_0} = \begin{cases} \frac{Z}{Z_S^N} e^{-\beta m E_0} & \text{si } m \in U \\ 0 & \text{si } m \in L \\ \hat{s} & \text{si } m \in (U \cup L)^c \end{cases} \tag{3.20}$$

donde la constante Z cumple el mismo rol de ser la constante de normalización de la distribución de probabilidad. Por otro lado, el trabajo de formación correlacionado esta dado por

$$\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho, N) = k_B T \log Z \tag{3.21}$$

Para ilustrar la forma de la solución, la Figura 3.2 muestra la distribución de energías del estado óptimo para un sistema con $N = 20$ copias

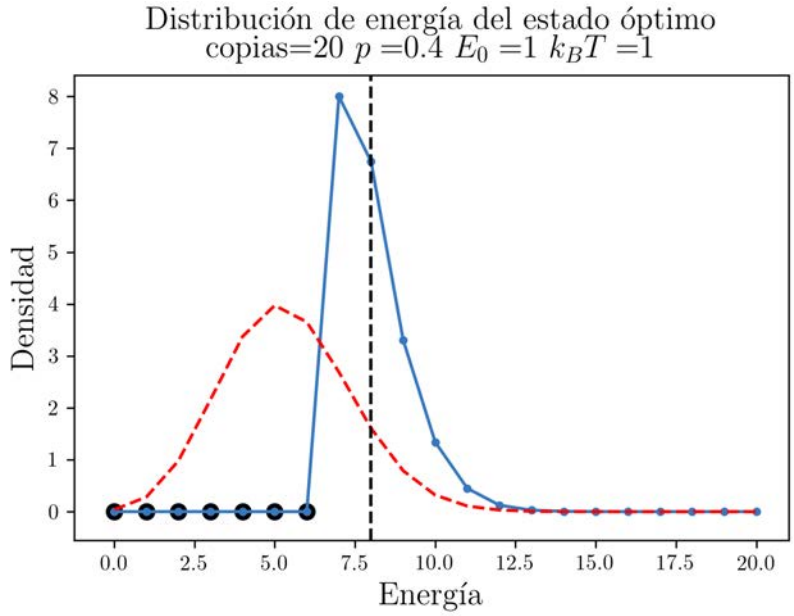


Figura 3.2: *Distribución de energía para el estado óptimo que realiza el trabajo de formación correlacionado (azul) comparado con la distribución de Gibbs del sistema (rojo). Los puntos en negro representan las energías para las cuales $\lambda_E = 0$. La linea negra representa el valor medio de energía. Se puede observar que la distribución de energía de la solución (azul) no es más que una renormalización de la distribución de Gibbs condicionado a que las energías permitidas se encuentran sobre un conjunto más chico (en este caso, para las energías más grandes que una determinada cota).*

correlacionadas.

El Teorema 3.2.1 es una caracterización completa de los estados que minimizan el trabajo de formación, a la vez que nos permite calcular el mínimo trabajo de formación correlacionado. Sin embargo, la expresión para $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$ y la forma de la solución resultan poco cómodas para trabajar. En la siguiente sección veremos que este resultado puede ser entendido de una manera más simple a partir de los que denominamos estados $\mathcal{R}^*$-críticos.

3.3. Familia de estados $\mathcal{R}^*$-críticos

Para comprender mejor la motivación de esta sección, comencemos viendo como dependen Z y s de las ecuaciones (3.19) para la solución óptima asociada a un estado local $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$. En la Figura 3.3 se muestran los valores de Z y s como función de p que se obtienen computacionalmente de la minimización, los cuales coinciden con los valores ha-

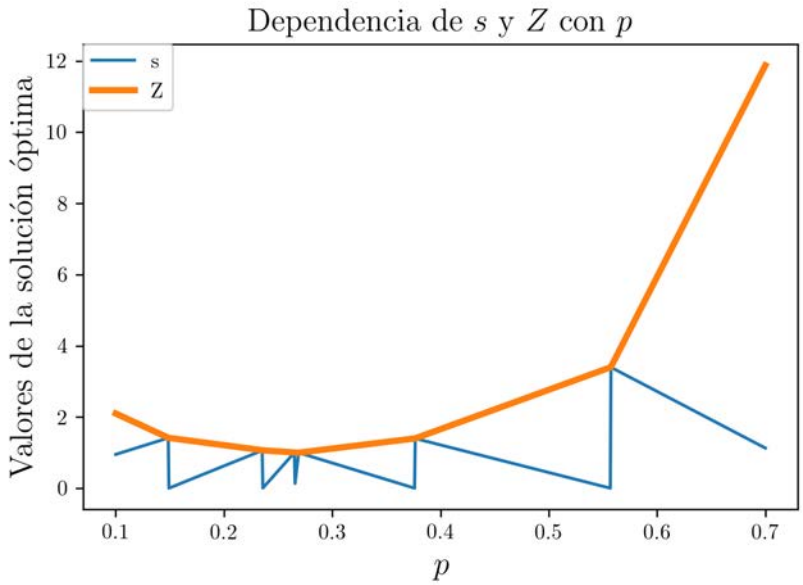


Figura 3.3: *Dependencia de los valores Z (naranja) y s (azul) con el valor p para $N = 4$ copias correlacionadas del sistema. La distribución de energía y los autovalores del estado correlacionado $\rho^{(N)}$ que minimizan el trabajo de formación quedan completamente caracterizadas por medio de estas dos cantidades. Sobre un conjunto de energías, la densidad es proporcional al estado de Gibbs asociado, donde la constante de proporcionalidad está dada por Z. Para una única energía la densidad es función de s. Para las demás energías, la probabilidad es nula.*

llados analíticamente. Recordemos que el estado óptimo está completamente caracterizado por el valor de estas dos cantidades.

Se puede observar que el valor de Z es lineal a trozos y que los puntos de quiebre se corresponden con los valores de p para los cuales el valor de s cambia de valor abruptamente de 0 a Z. Como es de esperar, la discontinuidad en la derivada de Z se traslada al trabajo de formación. La Figura 3.4 muestra cómo varía $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}/N$ como función de p para un número fijo de copias correlacionadas $N = 5$. A su vez, en la misma figura se lo compara con el trabajo de formación W_{∞} y con el trabajo de formación/extracción estándar W_1 de una única copia no correlacionada. Notemos que las correlaciones entre las partes del sistema disminuyen el trabajo de formación por copia.

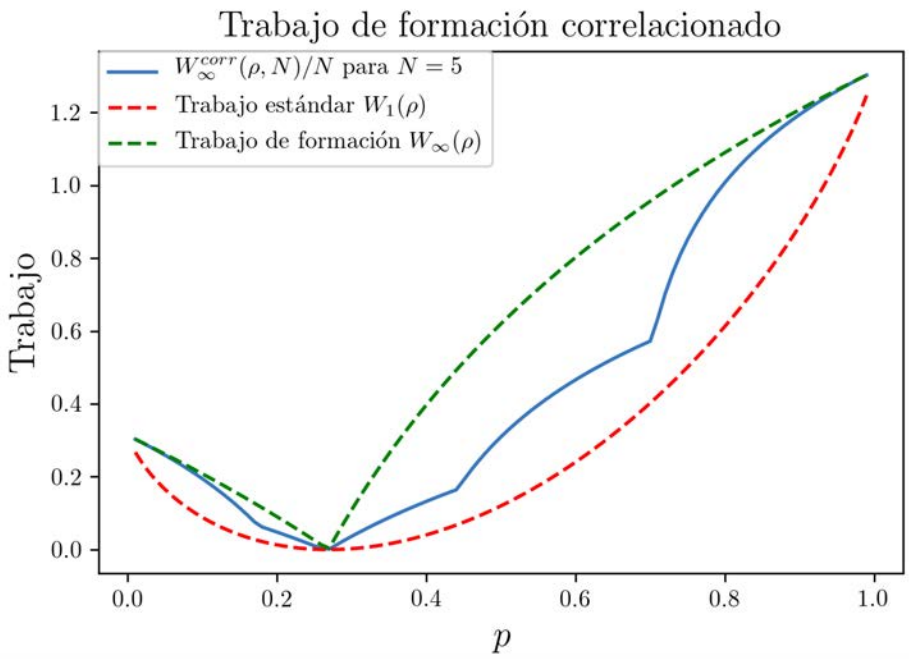


Figura 3.4: *Trabajo de formación correlacionado normalizado* $\mathrm{W}_\infty^{corr}(\rho, N)/N$ *como función del estado* $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$ *(azul). El trabajo de formación estándar* $W_1(\rho)$ *necesario para formar una copia no correlacionada del estado* ρ *(rojo) representa una cota inferior mientras que el trabajo de formación* $W_\infty(\rho)$ *(verde) es una cota superior.*

El conjunto de estados semiclásicos $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$ para los cuales el trabajo de formación correlacionado tiene un punto de discontinuidad en la primer derivada representa una familia de estados con propiedades de gran interés que nos van a permitir recuperar el límite termodinámico, simplificar la expresión del trabajo de formación correlacionado e incluso encontrar transformaciones reversibles en el régimen microscópico (de ahí su nombre).

Definición 3.3.1 (*Estados $\mathcal{R}^*$-críticos*)

Dadas N copias de un sistema de un qubit con estado local $\rho(p) = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$, decimos que $\rho(p)$ es un estado $\mathcal{R}^*$-crítico si la primer derivada de $\mathrm{W}_\infty^{corr}(\rho(r), N)$ respecto de r es discontinua en $r = p$. Notamos por $\mathcal{R}^*(N)$ al conjunto de todos los estados $\mathcal{R}^*$-críticos.

Es fácil caracterizar el conjunto $\mathcal{R}^*(N)$ buscando los valores de p para los cuales $s = 0$. A partir la ecuación (3.19) del Teorema 3.2.1 se deriva que

los p^* para los cuales esto sucede son de la forma

$$p^* = \frac{1}{N}\frac{\sum_U m g_m}{\sum_U g_m} \tag{3.22}$$

donde $U = \{c, c+1, \ldots, N\}$ ó $U = \{0, 1, \ldots, c\}$, con $c = 0, 1, \ldots, N$. Para el caso trivial donde $U = \{0, 1, \ldots, N\}$ recuperamos el estado de Gibbs del sistema, caracterizado por

$$p_G = \frac{1}{1 + e^{\beta E_0}} \tag{3.23}$$

El conjunto $\mathcal{R}^*(N)$ queda completamente caracterizado para el caso de dimensión $D = 2$ mediante la siguiente proposición.

Proposición 3.3.1

Dados N sistemas correlacionados formados por un único qubit, el conjunto de estados $\mathcal{R}^*$-críticos está dado por los estados de la forma

$$\rho(p^*) = (1 - p^*)\,|0\rangle\langle 0| + p^*\,|E_0\rangle\langle E_0| \tag{3.24}$$

donde

$$\begin{aligned} p^* \in & \left\{ \frac{1}{N}\frac{\sum_{m=a}^{N} m g_m}{\sum_{m=a}^{N} g_m} : a = 0, 1, \ldots, N \right\} \\ & \cup \left\{ \frac{1}{N}\frac{\sum_{m=0}^{b} m g_m}{\sum_{m=0}^{b} g_m} : b = 0, 1, \ldots, N \right\} \end{aligned}$$

El primer conjunto representa los estados con $\rho(p^*)$ con $p^* \geq p_G$ y el segundo conjunto los estados con $p^* \leq p_G$, donde p_G es el de la ecuación (3.23).

Por simplicidad vamos a trabajar con los estados con $p^* \geq p_G$, aunque el análisis es similar para los otros valores. Para los estados $\mathcal{R}^*$-críticos los autovalores y la distribución de energía se simplifican, resultando:

$$\begin{aligned} \lambda^*_{nE_0} &= \frac{Z}{Z_N} e^{-\beta n E_0} \mathbb{1}_{\{a \leq n\}} \\ \mathbb{P}(E = nE_0) &= \frac{Z}{Z_N} \binom{N}{n} e^{-\beta n E_0} \mathbb{1}_{\{a \leq n\}} \end{aligned}$$

donde $\mathbb{1}$ es la función indicadora y la constante Z está dada por

$$Z = \frac{1}{\sum_{m=a}^{N} g_m} = \frac{1}{\sum_{m=a}^{N} Z_S^{-N} \binom{N}{m} e^{-\beta m E_0}} \tag{3.25}$$

A su vez, el trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$ para los estados $\mathcal{R}^*$-críticos está dado por

$$\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho^*) = k_B T \log Z = k_B T \log \frac{1}{\sum_{m=a}^{N} g_m}$$

Para entender cómo a partir de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos es posible reconstruir las soluciones óptimas provistas por el Teorema 3.2.1, consideremos dos estados $\mathcal{R}^*$-críticos caracterizados por dos valores p_1^*, p_2^* consecutivos:

$$p_1^* = \frac{1}{N} \frac{\sum_{m=a}^{N} m g_m}{\sum_{m=a}^{N} g_m} \qquad p_2^* = \frac{1}{N} \frac{\sum_{m=a+1}^{N} m g_m}{\sum_{m=a+1}^{N} g_m}$$

$$q_n^{*1} = \frac{1}{\sum_{m=a}^{N} g_m} \mathbb{1}_{\{a \leq n\}} \qquad q_n^{*2} = \frac{1}{\sum_{m=a+1}^{N} g_m} \mathbb{1}_{\{a+1 \leq n\}}$$

Consideremos un valor de p, con $p_1^* < p < p_2^*$, de manera que existe $x \in (0,1)$ tal que $p = x p_1^* + (1-x) p_2^*$. Para este p la solución que minimiza el trabajo de formación está dada por

$$\begin{aligned} q_n &= \frac{a - Np}{\sum_{m=a+1}^{N} (a-m) g_m} \mathbb{1}_{\{a+1 \leq n\}} + \frac{1}{g_a} \frac{\sum_{m=a+1}^{N} (Np - m) g_m}{\sum_{a=m+1}^{N} (a-m) g_m} \mathbb{1}_{\{a=n\}} \\ &= x \frac{1}{\sum_{m=a}^{N} g_m} \mathbb{1}_{\{a \leq n\}} + (1-x) \frac{1}{\sum_{m=a+1}^{N} g_m} \mathbb{1}_{\{a+1 \leq n\}} \\ &= x q_n^{*1} + (1-x) q_n^{*2} \end{aligned}$$

Es decir, a partir de la misma suma convexa con la cual es posible construir el valor de p a partir de p_1^* y p_2^* es posible reconstruir la solución que minimiza el trabajo de formación para ese mismo p. Dado que p depende linealmente de x, se obtiene que el valor de Z y s dependen linealmente de p entre cada par de puntos $\mathcal{R}^*$-críticos consecutivos, que es lo que se observa en la Figura 3.3.

El conjunto de estados $\mathcal{R}^*$-críticos forma una familia de tamaño lineal en el número de copias N que permite caracterizar todos los estados que minimizan el trabajo de formación. En las siguiente secciones continuaremos estudiando más en profundidad estos estados, encontrando propiedades

que hacen que este conjunto de estados sea de gran interés.

3.3.1. Reversibilidad

Como ya discutimos el capítulo anterior, en general las transformaciones entre estados dentro de la termodinámica cuántica no son reversibles. Esto se refleja en el hecho de que el trabajo necesario para formar un estado a partir del estado térmico es estrictamente mayor que el trabajo que se puede extraer del mismo. La diferencia de energía se pierde en el reservorio y es imposible poder recuperarla.

Definición 3.3.2 (*Estados reversibles*)

Decimos que un estado σ es reversible si su trabajo de formación y su trabajo de extracción coinciden, es decir:

$$W_0(\sigma) = W_\infty(\sigma)$$

Denotamos por $\mathcal{R}$ al conjunto de todos los estados reversibles.

Sin embargo, para sistemas de baja dimensión es posible encontrar estados reversibles. La siguiente proposición establece la existencia de una familia de estados con una distribución de energía particular que cumplen la propiedad de ser reversibles.

Proposición 3.3.2

Sea un sistema S caracterizado por un Hamiltoniano H_S acoplado a un reservorio térmico a temperatura T. Sea τ_S el estado de Gibbs del sistema a temperatura T, el cual queda caracterizado por la distribución de energía

$$q_E = \frac{e^{-\beta E}}{Z_S}$$

donde Z_S es la función de partición del sistema. Sea σ un estado con $[\sigma, H_S] = 0$ caracterizado por una distribución de energía

$$p_E = Z q_E \mathbb{1}_{\{E \in \mathcal{E}\}}$$

donde $\mathcal{E}$ es un subconjunto de energías permitidas por el sistema y Z la constante de normalización.

Entonces se tiene que las divergencias de Renyi $\{D_\alpha(\rho||\tau_S)\}_{\alpha \geq 0}$ son independientes de α. En particular, el trabajo de formación y de extracción

para el estado σ coinciden.

Demostración : La demostración resulta de la misma definición de las divergencias de Renyi. Para $\alpha \geq 0$:

$$\begin{aligned} D_\alpha(\rho||\tau_S) &= \frac{1}{1-\alpha} \log \sum_E p_E^\alpha q_E^{1-\alpha} \\ &= \frac{1}{1-\alpha} \log \sum_{\mathcal{E}} Z^\alpha q_E \\ &= \frac{1}{1-\alpha} \log Z^\alpha \sum_{\mathcal{E}} q_E \\ &= \frac{1}{1-\alpha} \log Z^{\alpha-1} \\ &= -\log Z \end{aligned}$$

Luego, usando este resultado para $\alpha = 0$ y $\alpha = \infty$ obtenemos que los estados son reversibles. ■

A partir de este resultado, se deduce la reversibilidad de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos.

Corolario 3.3.1 (*Reversibilidad de estados $\mathcal{R}^*$-críticos*)

Todo estado $\mathcal{R}^*$-crítico es reversible, es decir, fijado un número de copias N se tiene:

$$\mathcal{R}^*(N) \subseteq \mathcal{R} \tag{3.26}$$

Notemos que en principio no había motivo para sospechar que un subconjunto de estados con trabajo de formación correlacionado mínimo pueda ser reversible. Esto resulta sorprendente, y ambas propiedades juntas son las que permiten recuperar los resultados clásicos en el límite termodinámico.

3.3.2. Densidad

Otra de las propiedades que cumplen los estados $\mathcal{R}^*$-críticos es la de densidad. Esto quiere decir que si consideramos la unión de todos los estados que son $\mathcal{R}^*$-críticos para algún N, la cual está dada por

$$\mathcal{R}^* = \bigcup_{N \in \mathbb{N}} \mathcal{R}^*(N) \tag{3.27}$$

y tomamos cualquier $\epsilon > 0$, entonces para todo estado ρ existe otro estado $\rho_\epsilon \in \mathcal{R}^*$ tal que

$$||\rho - \rho_\epsilon||_1 < \epsilon$$

La manera de probar este resultado es estudiando la distancia entre dos puntos p^* consecutivos correspondientes a estados $\mathcal{R}^*$-críticos como función del número de copias N. Sean $p^*_{m_0}$ y $p^*_{m_0+1}$ dos valores consecutivos del conjunto de valores para los cuales el estado $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$ resulta ser $\mathcal{R}^*$-crítico:

$$p^*_{m_0} = \frac{1}{N}\frac{\sum_{m=m_0}^{N} m g_m}{\sum_{m=m_0}^{N} g_m} \qquad p^*_{m_0+1} = \frac{1}{N}\frac{\sum_{m=m_0+1}^{N} m g_m}{\sum_{m=m_0+1}^{N} g_m}$$

El objetivo de esta sección es probar que para valores de m_0 adecuados se tiene que

$$N(p^*_{m_0+1} - p^*_{m_0}) \xrightarrow{N\to\infty} 1 \tag{3.28}$$

Para valores cercanos a p_G se observa que la densidad de puntos $\mathcal{R}^*$-críticos es mayor. En la Figura 3.5 se muestra la expresión (3.28) como función de $p^*_{m_0}$ para un número $N = 40$ de copias correlacionadas.

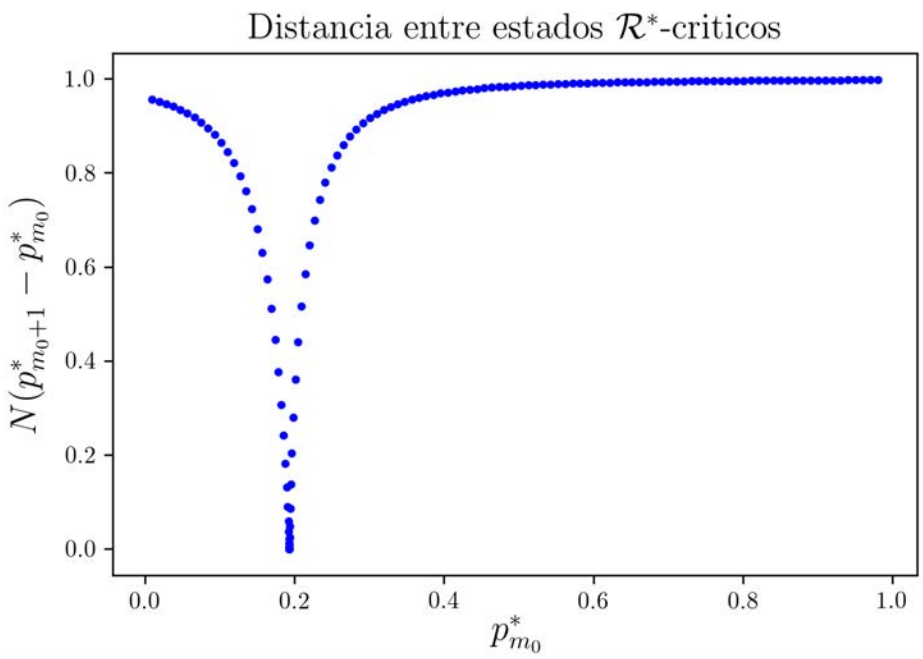


Figura 3.5: *Diferencia entre los valores de p^* consecutivos asociados a estados $\mathcal{R}^*$-críticos. Se puede observar que para un rango de valores de $p^*_{m_0}$ lo suficientemente alejados del valor de Gibbs p_G la diferencia va como $1/N$. Por otro lado, para valores cercanos a p_G la distancia es más chica, con lo cual los estados $\mathcal{R}^*$-críticos están más cerca entre sí.*

Para poder estimar las sumas de los factores g_m asociados con la distribución de energía del estado de Gibbs es necesario recurrir a aproximaciones asintóticas válidas para distribuciones de probabilidad binomiales. El siguiente lema es de crucial importancia para poder probar la densidad del conjunto de estados $\mathcal{R}^*$-críticos [27].

Lema 3.3.1

Sea X una variable aleatoria con distribución binomial con parámetros $n \in \mathbb{N}$ y $p \in [0,1]$ y consideremos la probabilidad de que $X \leq m$ dada por la suma

$$B_m(n,p) = \sum_{j=0}^{m} \binom{n}{m} p^j q^{n-j} \tag{3.29}$$

donde $q = 1-p$. Luego, para $0 \leq m \leq np - \phi(n)$ se tiene que

$$B_m(n,p) \approx \frac{1}{1-r} \binom{n}{m} p^m q^{n-m} \tag{3.30}$$

donde $r = qm/(p(n+1-m))$ y $\phi(n) = \mathcal{O}(\sqrt{n})$.

A partir de este resultado podemos demostrar la densidad de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos.

Proposición 3.3.3 (*Densidad*)

Sea N el número de copias de sistemas compuestos por un único qubit con estado local $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$. Luego, dados los valores $p^*_{m_0}$ y $p^*_{m_0+1}$ asociados a estados $\mathcal{R}^*$-críticos consecutivos tales que $|m - Np_G| \geq \phi(n)$, donde $\phi(n) = \mathcal{O}(\sqrt{n})$, se tiene que

$$N(p^*_{m_0+1} - p^*_{m_0}) \xrightarrow{N\to\infty} 1 \tag{3.31}$$

Demostración: A partir del Lema 3.3.1 se puede obtener la siguiente aproxi-

mación:

$$\begin{aligned}
\sum_{m=m_0}^{N} g_m &= \sum_{m=m_0}^{N} \frac{1}{Z_S^N}\binom{n}{m} e^{-\beta m E_0} \\
&= \sum_{m=m_0}^{N} \binom{n}{m} \left(\frac{e^{-\beta E_0}}{Z_S}\right)^m \left(\frac{1}{Z_S}\right)^{N-m} \\
&= \sum_{m=0}^{N-m_0} \binom{N}{m} \left(\frac{1}{Z_S}\right)^m \left(\frac{e^{-\beta E_0}}{Z_S}\right)^{N-m} \\
&= \binom{n}{m_0} \left(\frac{e^{-\beta E_0}}{Z_S}\right)^{m_0} \left(\frac{1}{Z_S}\right)^{N-m_0} \\
&= g_{m_0} \frac{1}{1-\hat{r}}
\end{aligned}$$

donde $\hat{r} = e^{-\beta E_0}(n-m_0)/(m_0+1)$. Luego, se obtiene fácilmente que

$$1 + \frac{g_{m_0}}{\sum_{m=m_0+1}^{N} g_m} \approx e^{\beta E_0} \frac{m_0+1}{N-m_0} \tag{3.32}$$

Por otro lado, notemos que podemos escribir al p^* mediante derivadas respecto de β:

$$p^*_{m_0} = \frac{1}{N} \frac{\sum_{m=m_0}^{N} m\binom{n}{m} e^{-\beta m E_0}}{\sum_{m=m_0}^{N} \binom{n}{m} e^{-\beta m E_0}} = -\frac{1}{E_0}\frac{\partial}{\partial \beta} \log \sum_{m=m_0}^{N} \binom{n}{m} e^{-\beta m E_0}$$

Finalmente obtenemos:

$$\begin{aligned}
N(p^*_{m_0+1} - p^*_{m_0}) &= \frac{1}{E_0}\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\frac{\sum_{m=m_0}^{N} g_m}{\sum_{m=m_0+1}^{N} g_m}\right] \\
&= \frac{1}{E_0}\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[1 + \frac{g_{m_0}}{\sum_{m=m_0+1}^{N} g_m}\right] \\
&\approx \frac{1}{E_0}\frac{\partial}{\partial \beta} \left[\beta E_0 + \log \frac{m_0+1}{N-m_0}\right] = 1
\end{aligned}$$

Donde asumimos que la aproximación (3.32) vale también para su primer derivada. ■

Notemos que la convergencia dada por la ecuación (3.31) se da a distintas velocidades dependiendo del m_0 que tomamos. Esto es realmente necesario, dado que el tamaño del conjunto de estados $\mathcal{R}^*$-críticos es $2N-1$, por lo tanto resulta imposible que todas las diferencias converjan como $1/N$ a la vez. A su vez, de la Figura 3.5 podemos inferir el resto de las diferencias entre estados $\mathcal{R}^*$-críticos consecutivos converge más rápido que $1/N$.

3.3.3. Estados cuasi-térmicos

La caracterización y el estudio del trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}$ a través de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos permite observar y explicar la existencia de estados muy parecidos al estado de Gibbs para los cuales es posible formar N copias correlacionadas con la misma cantidad de energía que requiere formar una única copia. Para ilustrar esto, en la Figura 3.6 se muestra el cociente entre el trabajo de formación de una única copia $W_{\infty}(\rho)$ y el trabajo de formación correlacionado necesario para formar N copias correlacionadas $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}(\rho, N)$.

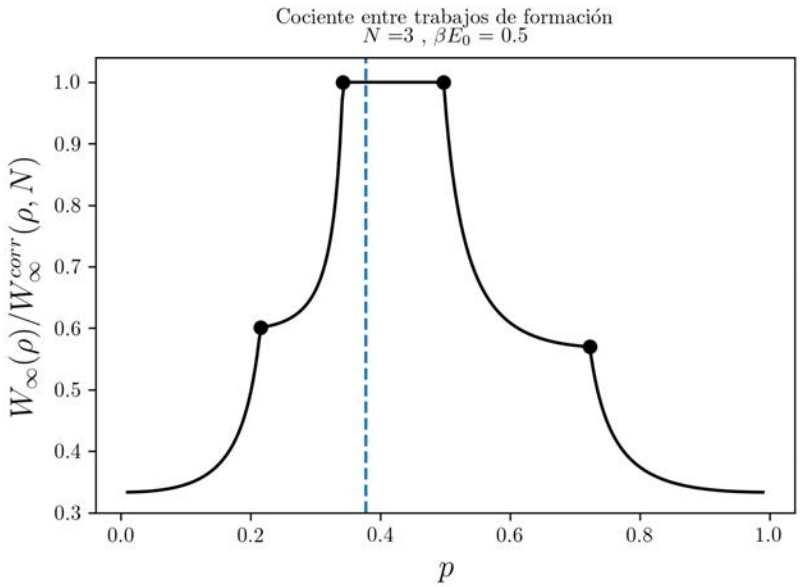
Se puede observar que existe un intervalo de estados $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$ alrededor de p_G para los cuales el costo energético necesario para formar una sola copia no correlacionada es el mismo que el necesario para formar N copias correlacionadas. A este conjunto de estados los denominamos estados cuasi-térmicos, dado que son estados parecidos al estado de Gibbs pero además poseen esta propiedad. Es inmediato notar que para el estado de Gibbs el trabajo de formación de una copia no correlacionada y de N copias correlacionadas coinciden, pues ambos son iguales a cero. Sin embargo, es sumamente extraño encontrar estados distintos al térmico para los cuales esta igualdad sigue siendo válida pero donde la cantidad de trabajo necesaria no es nula.

El intervalo alrededor de p_G de estados cuasi-térmicos está caracterizado por los estados $\mathcal{R}^*$-críticos más cercanos al estado de Gibbs por izquierda y por derecha. Por izquierda tenemos al estado definido por el estado $\mathcal{R}^*$-crítico con autovalor p_-^* dado por:

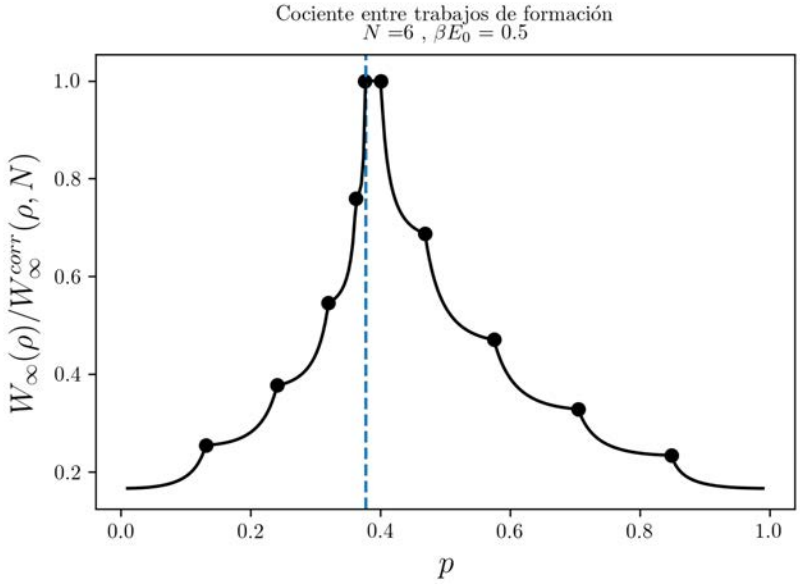
$$p_-^* = \frac{1}{N}\frac{\sum_{m=0}^{N-1} m g_m}{\sum_{m=0}^{N-1} g_m} = \frac{p_G - e^{\beta N E_0}/Z_N}{1 - e^{\beta N E_0}/Z_N}$$

Por derecha, el estado $\mathcal{R}^*$-crítico más cercano al estado de Gibbs está dado por

$$p_+^* = \frac{1}{N}\frac{\sum_{m=1}^{N} m g_m}{\sum_{m=1}^{N} g_m} = \frac{p_G}{1 - g_0}$$



(a)



(b)

Figura 3.6: *Cociente entre el trabajo de formación de una única copia no correlacionada del sistema $W_\infty(\rho)$ y el trabajo de formación correlacionado de N copias correlacionadas para $N = 3$ y $N = 7$. En ambos casos es posible observar una intervalo alrededor de p_G (linea punteada azul) donde ambas cantidades coinciden. Los puntos de quiebre de las curvas se corresponde con los estados $\mathcal{R}^*$-críticos.*

Proposición 3.3.4 (*Estados cuasi-térmicos*)

Dado un numero de copias N del sistema, se tiene que para todo estado local $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$ con $p \in [p_-^*, p_+^*]$ el trabajo de formación correlacionado de N copias es el mismo que el trabajo de formación de una única copia

$$\mathrm{W}_\infty^{corr}(\rho, N) = W_\infty(\rho) \tag{3.33}$$

Demostración : Por simplicidad, vamos a considerar únicamente el caso a derecha. El trabajo de formación del estado de la forma $\rho_+ = (1-p_+^*)\,|0\rangle\langle 0| + p_+^*\,|E_0\rangle\langle E_0|$ esta dado por

$$\begin{aligned} W_\infty(\rho_+) &= k_B T \log\left(\text{máx}\{p_+^* e^{\beta E_0} Z_1, (1-p_+^*) Z_1\}\right) \\ &= k_B T \log\left(p_+^* e^{\beta E_0} Z_1\right) \end{aligned}$$

donde el máximo se realiza en el primer término dado que $p_G < p_+^*$.

Por otro lado, el trabajo de formación correlacionado de N copias es

$$\begin{aligned} \mathrm{W}_\infty^{\text{corr}}(\rho_+, N) &= k_B T \log \frac{1}{\sum_{m=1}^N g_m} \\ &= k_B T \log \frac{1}{1-g_0} = k_B T \log \frac{p_+^*}{p_G} \\ &= k_B T \log p_+^*(1+e^{\beta E_0}) = k_B T \log p_+^* e^{\beta E_0}(1+e^{-\beta E_0}) \\ &= k_B T \log p_+^* e^{\beta E_0} Z_1 \end{aligned}$$

Es decir, para ambos casos el trabajo de formación coincide. Sin el término $k_B T \log$, el trabajo de formación correlacionado es lineal a trozos. Por lo tanto este resultado sigue siendo válido para todo $p \in (p_G, p_+^*)$. ■

Sin embargo, observemos que la longitud del intervalo para el cual esto es válido converge a cero exponencialmente en el número de copias N:

$$p_+^* - p_G = \frac{1}{Z_N - 1} p_G \xrightarrow{N\to\infty} 0 \tag{3.34}$$

Por lo tanto, la presencia de estados cuasi-térmicos se puede observar únicamente para un número de copias muy chico.

3.4. Límite termodinámico

En esta sección veremos cómo es posible recuperar los resultados estándar en el límite termodinámico a partir de los estados que minimizan el trabajo de formación. Vamos a ver que, para cualquier estado ρ del sistema de dimensión $D = 2$, cuando el número de partes N del sistema es muy grande recuperamos $W_1(\rho) \approx \mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho, N)/N$. En la Figura 3.7 se muestra el valor del trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$ por copia en función de N para distintos estados ρ. Por otro lado, en la Figura 3.8 se muestra el valor asintótico al cual converge los trabajos de formación correlacionados para $N = 100$ y para distintos valores de p. Podemos observar cómo el trabajo de formación correlacionado se corresponde muy bien con la curva asociada al trabajo clásico W_1.

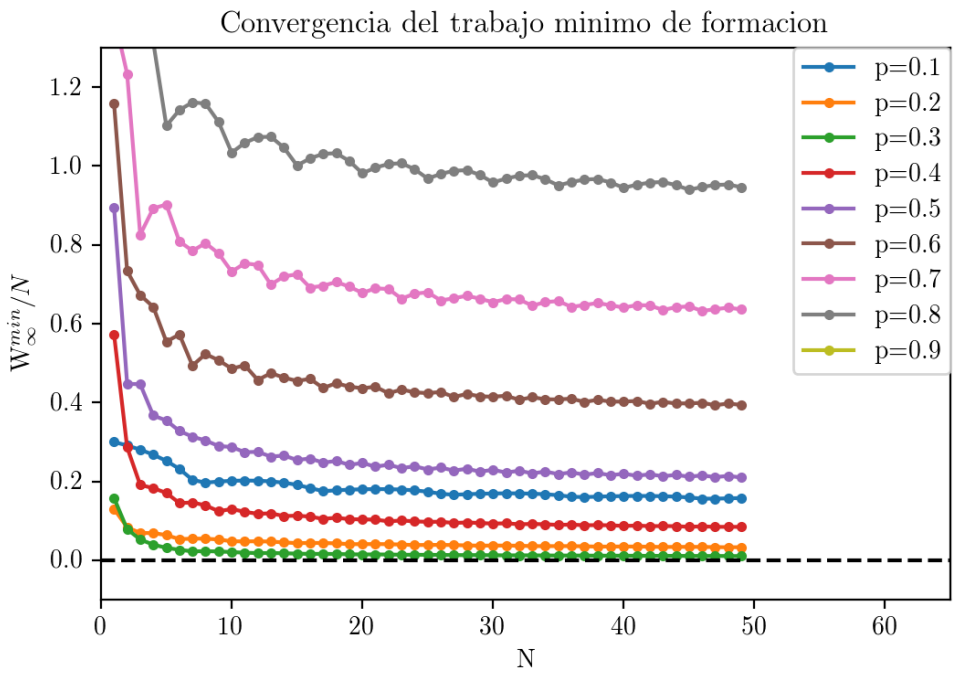


Figura 3.7: *Convergencia del trabajo de formación correlacionado normalizado para distintos estados locales* $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$.

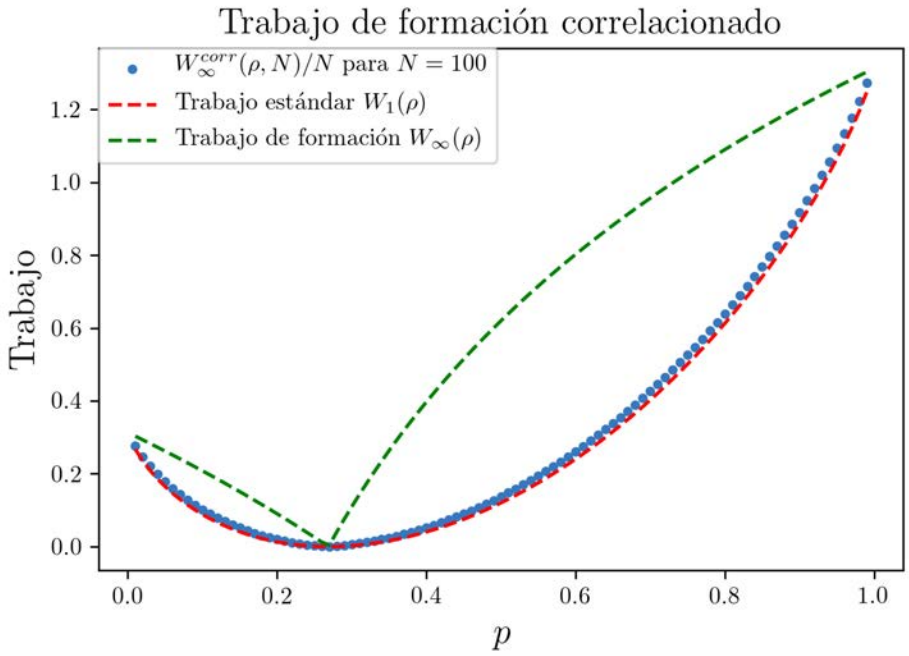


Figura 3.8: *Comparación del trabajo de formación correlacionado normalizado* $\mathrm{W}_\infty^{corr}(\rho, N)/N$ *para distintos estados* $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$ *y* $N = 100$*. Se puede observar que el valor asintótico al cual converge el trabajo de formación normalizado (Figura 3.7) coincide con el trabajo estándar* $W_1(\rho)$*, mientras que el trabajo de formación cuántico de una sola copia no correlacionada* $W_\infty(\rho)$ *da un valor mayor.*

Veamos cómo a partir de los resultados obtenidos hasta el momento es posible probar la convergencia del trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$. Recordemos que a partir de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos es posible calcular el trabajo de formación para cualquier otro estado. Por otro lado, los estados $\mathcal{R}^*$-críticos son una familia densa de estados. Por lo tanto, es suficiente con probar la convergencia para los estados $\mathcal{R}^*$-críticos. Recordemos que los mismos cumplen ser de la forma $\rho^* = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$, con

$$p^* = \frac{1}{N}\frac{\sum_{m\in U} m g_m}{\sum_{m\in U} g_m}$$

Como consecuencia de que U es un intervalo de índices consecutivos y de que la energía media del sistema Np^* está fija, necesariamente se va a tener que $\lceil Np^* \rceil \in U$ o bien $\lfloor Np^* \rfloor \in U$. Dado que esto no modifica la demostración y simplemente vuelve la notación menos clara, pondremos

directamente que $Np^* \in U$. Luego se tiene

$$\begin{aligned}
\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho^*, N) &= k_B T \log\left(\frac{1}{\sum_{m\in U} g_m}\right) \\
&\leq k_B T \log\left(\frac{1}{g_{Np^*}}\right) = k_B T \log\left(\frac{Z_S^N e^{\beta N p^* E_0}}{\binom{N}{Np^*}}\right) \\
&= Np^* E_0 + N k_B T \log Z_S - k_B T \log\binom{N}{Np^*}
\end{aligned}$$

A partir de este momento es conveniente recurrir a la aproximación de Stirling para el número combinatorio dada por

$$\log\binom{N}{Np^*} = NS(p^*) + \mathcal{O}(\log N) \tag{3.35}$$

donde $S(\cdot)$ es la entropía de von Neumann.

$$\begin{aligned}
\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho^*, N) &\leq Np^* E_0 - k_B T N S(p^*) + k_B T \log Z_S + \mathcal{O}(\log N) \\
&= N\left[F_1(\rho^*) - F_1(\tau)\right] + \mathcal{O}(\log N) \\
&= N W_1(\rho^*) + \mathcal{O}(\log N)
\end{aligned}$$

Por otro lado es fácil ver que $NW_1(\rho^*) \leq \mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho^*, N)$. Si llamamos ρ^{corr} al estado correlacionado de las N copias, dado que ρ^{corr} es reversible y debido a la subaditividad de la entropía ($S(\rho^{\mathrm{corr}}) \leq NS(\rho^*)$), tenemos que

$$\begin{aligned}
\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho^*, N) &= W_1(\rho^{\mathrm{corr}}) \\
&= \mathrm{tr}[H_{\mathrm{tot}}\rho^{\mathrm{corr}}] - k_B T S(\rho^{\mathrm{corr}}) + k_B T \log Z_S^N \\
&\geq N\,\mathrm{tr}[H_S \rho^*] - N k_B T S(\rho^*) + N k_B T \log Z_S \\
&= N W_1(\rho^*)
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Finalmente, estudiando el trabajo por unidad de copia se obtiene

$$W_1(\rho^*) \leq \frac{\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho^*, N)}{N} \leq W_1(\rho^*) + \mathcal{O}\left(\frac{\log N}{N}\right) \tag{3.37}$$

es decir, que el trabajo de formación correlacionado asintóticamente coincide con el trabajo de formación clásico.

Es interesante ver como escala la intensidad de las correlaciones de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos con el número N de copias correlacionadas. Una manera de cuantificar las correlaciones de un sistema es a partir de la generalización

de la información mutua para sistemas con N copias dada por [25]

$$I\left(\rho^{\text{corr}}\right) = D_1\left(\rho^{\text{corr}}||\rho^{*\otimes N}\right) = NS(\rho^*) - S(\rho^{\text{corr}}) \tag{3.38}$$

A partir de la reversibilidad de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos es posible reescribir la información mutua en función del trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_\infty^{\text{corr}}$ y del trabajo estándar W_1

$$\begin{aligned} I(\rho^{\text{corr}}) &= \beta[F_1(\rho^{(N)}) - NF_1(\rho^*)] \\ &= \beta[W_1(\rho^{(N)}) - NW_1(\rho^*)] \\ &= \beta[\mathrm{W}_\infty^{\text{corr}}(\rho^*, N) - NW_1(\rho^*)] = \mathcal{O}\left(\log N\right) \end{aligned}$$

Es decir, que la intensidad de las correlaciones es de orden $\log N$.

De esta manera, las correlaciones clásicas entre las partes de un sistema cuántico bajo la restricción de que localmente el estado sea conocido permiten recuperar el límite termodinámico. No solamente las energías libres coinciden asintóticamente, sino que también se tiene la reversibilidad de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos. A su vez, la intensidad de la correlaciones es de orden logarítmico en el número de copias, por lo que en el límite $N \to \infty$ las copias del sistema pasan a estar débilmente correlacionadas.

Sin embargo, este resultado es válido sólo para los estados con trabajo de formación mínimo, los cuales representan una familia muy particular de estados. Dentro del conjunto de estados factibles $\mathcal{C}(\rho, N)$, destacamos al estado separable $\rho^{\otimes N}$ por ser el único que no presenta correlaciones entre las partes y porque aún en el límite $N \to \infty$ el trabajo de formación no coincide con la diferencia de energía libre estándar. Por otro lado, los estados que minimizan el trabajo de formación, en particular los estados $\mathcal{R}^*$-críticos, representan una subclase de estados para los cuales el trabajo de formación converge al trabajo clásico. Por lo tanto, sería interesante saber qué sucede con el resto de los estados del conjunto $\mathcal{C}(\rho, N)$. De ser posible definir una medida en este conjunto, podríamos preguntarnos cuál es la medida de los estados $\rho^{(N)}$ para los cuales $W_\infty(\rho^{(N)}) < \mathrm{W}_\infty^{\text{corr}}(\rho, N) + \epsilon$, donde $\epsilon \ll 1$, es decir, la medida de aquellos estados para los cuales el trabajo de formación es muy parecido al trabajo de formación correlacionado.

Operacionalmente, la manera de interpretar $\mathrm{W}_\infty^{\text{corr}}(\rho, N)$ es como el trabajo mínimo que hay que invertir para generar un estado correlacionado de N partes localmente indistinguible del estado ρ.

Capítulo 4

Ciclo Térmico basado en Estados Correlacionados

Do or do not. There is no try

— Maestro Yoda

A partir del estudio del trabajo de formación correlacionado fue posible encontrar y caracterizar la familia de los denominados estados $\mathcal{R}^*$-críticos. Los mismos constituyen un conjunto de estados reversibles, con trabajo de formación mínimo y densos en el espacio de estados del sistema en el límite termodinámico. Veremos como es posible utilizar estos estados para definir ciclos de extracción de trabajo a escala nanoscópica.

En esta sección introduciremos la noción de ciclo térmico correlacionado y caracterizaremos el trabajo y la eficiencia del mismo. Para ello, es necesario estudiar los estados $\mathcal{R}^*$-críticos como función de la temperatura T del reservorio. Al igual que en el capítulo anterior, trabajaremos con sistemas formados por N copias de sistemas de dimensión $D = 2$.

4.1. Transformación cíclica

Para entender como es posible definir un ciclo térmico a partir de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos, comencemos observando cómo son las curvas de trabajo

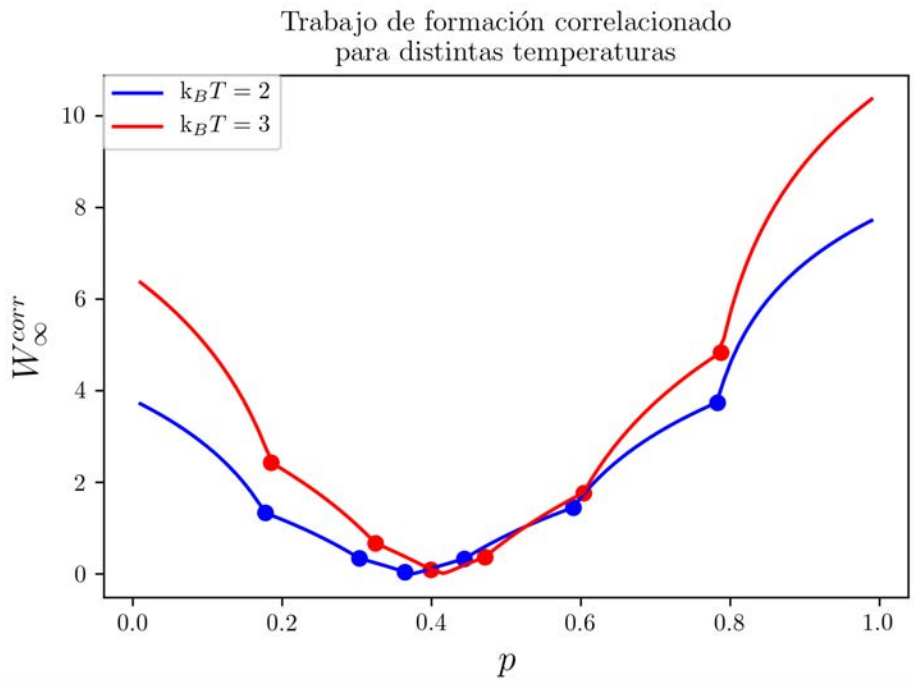


Figura 4.1: *Trabajo de formación correlacionado para dos temperaturas distintas como función del estado local* $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$ *para* $E_0 = 1$ *y un número de copias* $N = 4$.

de formación correlacionado $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$ para distintas temperaturas. Sean T_C y T_H las temperaturas de dos reservorios térmicos distintos, con $T_C < T_H$. Las Figuras 4.1 y 4.2 muestran la dependencia de $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$ con los distintos valores del estado local p para dos temperaturas distintas (en rojo curva asociada al reservorio caliente y en azul al reservorio frío). Como es de esperar, los valores p^* asociados a cada temperatura no coinciden. En general, cuanto mayor es la temperatura del reservorio, mayor es el trabajo de formación correlacionado.

Recordemos que el trabajo de formación correlacionado para los estados $\mathcal{R}^*$-críticos está dado por

$$\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(p^*, T) = -k_B T \log \sum_{m \in U} g_m(T) \tag{4.1}$$

donde $p^*(T)$ es de la forma

$$p^*(T) = \frac{1}{N} \frac{\sum_{m \in U} m g_m(T)}{\sum_{m \in U} g_m(T)}$$
$$g_m(T) = \binom{m}{N} \frac{e^{-\beta m E_0}}{Z_S^N}$$

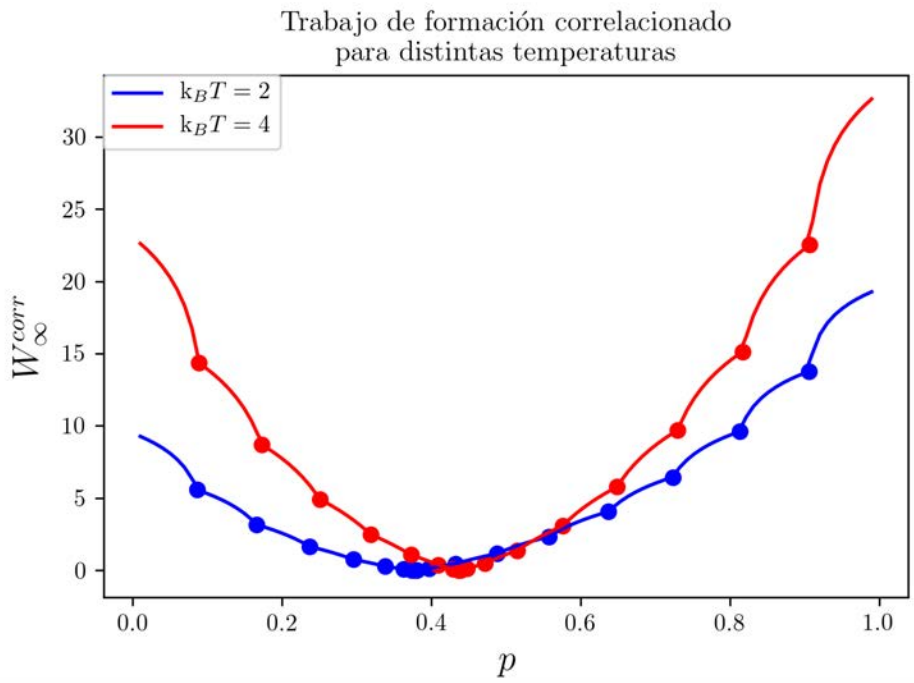


Figura 4.2: *Trabajo de formación correlacionado para dos temperaturas distintas como función del estado local* $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$ *para* $E_0 = 1$ *y un número de copias* $N = 10$.

Notemos que en ambas expresiones está explicitada la dependencia con la temperatura.

Fijado $m_0 \in 0, 1, 2, \ldots, N-1$, sean $p_A, p_B, p_C, p_D \in [0, 1]$ valores $\mathcal{R}^*$-críticos de la forma

$$p_A = \frac{1}{N} \frac{\sum_{m=m_0+1}^{N} m g_m(T_H)}{\sum_{m=m_0+1}^{N} g_m(T_H)} \tag{4.2}$$

$$p_B = \frac{1}{N} \frac{\sum_{m=m_0}^{N} m g_m(T_H)}{\sum_{m=m_0}^{N} g_m(T_H)} \tag{4.3}$$

$$p_C = \frac{1}{N} \frac{\sum_{m=m_0}^{N} m g_m(T_C)}{\sum_{m=m_0}^{N} g_m(T_C)} \tag{4.4}$$

$$p_D = \frac{1}{N} \frac{\sum_{m=m_0+1}^{N} m g_m(T_C)}{\sum_{m=m_0+1}^{N} g_m(T_C)} \tag{4.5}$$

Consideremos los cuatro estados locales A, B, C y D del sistema de la forma $\rho_X = (1 - p_X)\,|0\rangle\langle 0| + p_X\,|E_0\rangle\langle E_0|$ y sea ρ_X^{corr} el estado correlacionado de las N copias con trabajo de formación mínimo dado por W_X, donde X = A, B, C, D. Los estados A y B se corresponden a dos estados $\mathcal{R}^*$-críticos consecutivos a temperatura T_H, mientras que los estados C y D son los dos

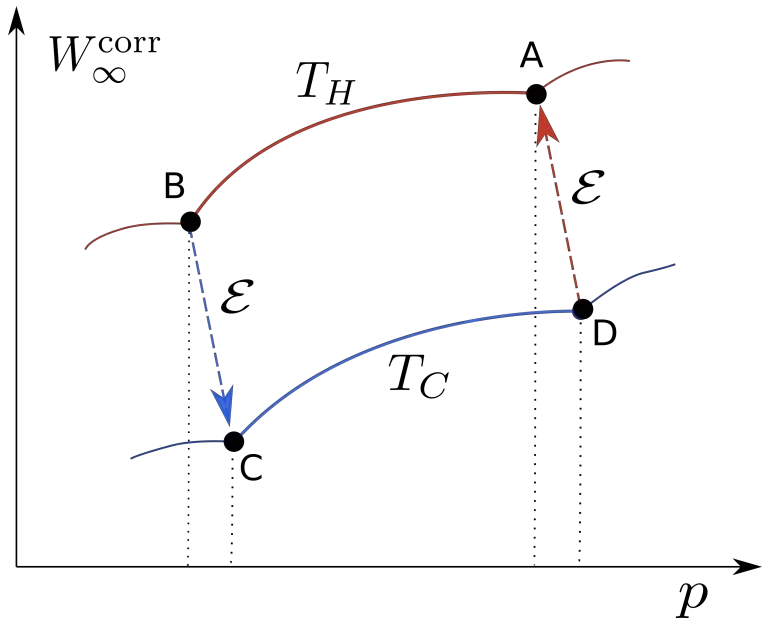


Figura 4.3: *Esquema del ciclo que realiza el sistema. La energía extraída durante la transformación A↦B se almacena en la batería. Parte de esa energía es posteriormente utilizada durante la transformación C↦D. La otra parte de la energía constituye el trabajo extraído a lo largo del ciclo. Por el contrario, las transformaciones B↦C y D↦A son realizadas por medio de operadores termales, por lo tanto no tienen ningún costo energético asociado.*

estados $\mathcal{R}^*$-críticos a temperatura T_C que se encuentran inmediatamente debajo de los anteriores en las Figuras 4.1 y 4.2.

Luego, definimos el *ciclo térmico correlacionado* como conjunto de transformaciones térmicas que permiten llevar al sistema a través de los estados correlacionados A, B, C y D reiteradas veces, siendo posible extraer una cantidad de trabajo no nula a lo largo de cada iteración. En la Figura 4.3 se ilustra la estructura del ciclo en un diagrama p vs $\mathrm{W}_\infty^{\text{corr}}$.

En vez de considerar muchos sistemas auxiliares formados por un único *wit* para almacenar el trabajo, podemos trabajar con un sistema auxiliar de dimensión infinita y con Hamiltoniano

$$H_W = \int_0^\infty w\,|w\rangle\langle w|\,dw$$

Veamos como son llevadas a cabo cada una de las transformaciones del ciclo:

- **A** $\mapsto$ **B**: A lo largo de esta transformación, el sistema se encuentra en contacto con el reservorio a temperatura T_H. Debido a que los estados ρ_A^{corr} y ρ_B^{corr} son reversibles, es posible transformarlos al estado térmico

del sistema extrayendo la misma cantidad de energía que es necesaria para formarlos. De esta manera, la transformación de A en B a través de operadores termales se realiza de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\rho_A^{\text{corr}} \otimes |0\rangle\langle 0|_W &\xrightarrow{\mathcal{E}} \tau_S \otimes |W_A\rangle\langle W_A|_W \\ &\xrightarrow{\mathcal{E}} \rho_B^{\text{corr}} \otimes |W_A - W_B\rangle\langle W_A - W_B|_W\end{aligned}$$

donde la diferencia de energía $W_A - W_B$ es almacenada en la batería.

- **B** $\mapsto$ **C**: Es posible transformar el estado ρ_B^{corr} en el estado ρ_C^{corr} por medio de operadores termales sin la necesidad de entregar energía al sistema. Para ello, se desacopla al sistema del reservorio caliente y se lo acopla al reservorio con temperatura T_C. Dado que los estados ρ_B^{corr} y ρ_C^{corr} tienen el mismo soporte y que el estado ρ_C^{corr} es exactamente igual al estado de Gibbs del sistema sobre ese soporte de energías, vale la relación de termomayorización $\rho_C^{\text{corr}} \prec_T \rho_B^{\text{corr}}$. Por lo tanto, la transformación
$$\rho_B^{\text{corr}} \xrightarrow{\mathcal{E}} \rho_C^{\text{corr}}$$
se puede llevar a cabo sin modificar el estado del *wit*.

- **C** $\mapsto$ **D**: Al igual que para la transformación A $\mapsto$ B, la transformación es llevada a cabo en dos instancias, pasando en el medio por el estado térmico del sistema:
$$\begin{aligned}&\rho_C^{\text{corr}} \otimes |W_A - W_B\rangle\langle W_A - W_B|_W \\ \xrightarrow{\mathcal{E}}\ &\tau_S \otimes |W_A - W_B + W_C\rangle\langle W_A - W_B + W_C|_W \\ \xrightarrow{\mathcal{E}}\ &\rho_D^{\text{corr}} \otimes |W_A - W_B + W_C - W_D\rangle\langle W_A - W_B + W_C - W_D|_W\end{aligned}$$

- **D** $\mapsto$ **A**: Desacoplamos al sistema del reservorio frío y lo volvemos a acoplar al reservorio con temperatura T_H. Al igual que en B $\mapsto$ C, los estados ρ_D^{corr} y ρ_A^{corr} tienen el mismo soporte y ρ_A^{corr} es el estado de Gibbs a temperatura T_H sobre ese soporte. Por lo tanto a temperatura T_H se cumple la relación de termomayorización $\rho_A^{\text{corr}} \prec_T \rho_D^{\text{corr}}$ y la transformación
$$\rho_D^{\text{corr}} \xrightarrow{\mathcal{E}} \rho_A^{\text{corr}}$$
se puede llevar a cabo por medio de operadores termales.

Concluimos que es posible llevar al sistema a lo largo de los estados A, B, C y D de manera cíclica y reversible, extrayendo una cantidad de trabajo $W_A - W_B + W_C - W_D$.

4.2. Trabajo extraíble y eficiencia del ciclo

La tasa con la que aumenta la energía del *wit* luego de cada iteración del ciclo basado en estados correlacionados está dado por

$$\mathrm{W}_{\text{motor}} = W_A - W_B + W_C - W_D \tag{4.6}$$

A partir de la ecuación (4.1) y de las definiciones de p_A, p_B, p_C y p_D se obtiene la siguiente expresión para el trabajo extraíble del motor

$$\begin{aligned}\mathrm{W}_{\text{motor}} = k_B T_H \log\left[1 + \frac{g_{m_0}(T_H)}{\sum_{m_0+1}^{N} g_m(T_H)}\right] \\ - k_B T_C \log\left[1 + \frac{g_{m_0}(T_C)}{\sum_{m_0+1}^{N} g_m(T_C)}\right]\end{aligned}$$

Notemos que $\mathrm{W}_{\text{motor}}$ depende únicamente de la elección de m_0 y de las temperaturas T_H y T_C.

Estamos interesados en estudiar la eficiencia del ciclo. La eficiencia de un motor térmico se define como el cociente entre el trabajo extraído y el calor entregado por la fuente caliente. Para poder establecer cuál es la eficiencia del ciclo basado en correlaciones, necesitamos primero obtener una expresión para el calor entregado por el reservorio a temperatura T_H. Sin embargo, en el formalismo de la teoría de recursos de la termodinámica cuántica no aparece el concepto de calor.

Una manera natural de definir el calor es a partir de conservación de la energía. Dado que el sistema se encuentra en contacto con la fuente caliente a lo largo de la transformación D $\mapsto$ A $\mapsto$ B, definimos calor entregado por la fuente caliente Q_H a partir de la relación

$$\Delta E_{\mathrm{D}\mapsto B} = Q_H - W_{\mathrm{D}\mapsto\mathrm{B}}$$

donde $\Delta E_{\mathrm{D}\mapsto B}$ es la variación de energía del sistema entre los estados D y B dada por

$$\Delta E_{\mathrm{D}\mapsto B} = N E_0 (p_B - p_D)$$

y $W_{\mathrm{D}\mapsto\mathrm{B}} = W_B - W_D$ es el trabajo extraído durante la transformación D $\mapsto$ B. Luego, el calor entregado por el reservorio caliente está dado por

$$Q_H = N E_0 (p_B - p_D) + k_B T_H \log\left[1 + \frac{g_{m_0}(T_H)}{\sum_{m_0+1}^{N} g_m(T_H)}\right]$$

y la eficiencia del motor basado en estados correlacionados

$$\eta_C = \frac{\mathrm{W}_{\text{motor}}}{Q_H} = 1 - \frac{k_B T_C \log\left[1 + \frac{g_{m_0}(T_C)}{\sum_{m_0+1}^{N} g_m(T_C)}\right] - N E_0(p_D - p_B)}{k_B T_H \log\left[1 + \frac{g_{m_0}(T_H)}{\sum_{m_0+1}^{N} g_m(T_H)}\right] - N E_0(p_D - p_B)} \tag{4.7}$$

El referente clásico de los ciclos térmicos es el ciclo de Carnot. Al igual que en nuestro caso, durante un ciclo de Carnot el sistema interactúa con dos fuentes, una fría y una caliente. La eficiencia de un ciclo de Carnot está dada por

$$\eta_{\text{Carnot}} = 1 - \frac{T_C}{T_H}$$

La segunda ley de la termodinámica establece que la máxima eficiencia a la cual puede trabajar un ciclo térmico está dada por la eficiencia del ciclo de Carnot. Naturalmente, surge la pregunta de cómo se comparan η_C y η_{Carnot}. La Figura 4.4 muestra como depende el cociente $\eta_C/\eta_{\text{Carnot}}$ del número de copias N para distintos valores de m_0. Se puede observar que la eficiencia de Carnot es una cota superior de η_C, aunque asintóticamente ambas cantidades coinciden cuando $N \to \infty$. Por otro lado, es importante destacar que incluso para un número de copias del sistema N chico, ambas eficiencias son muy parecidas. En la siguiente sección se estudiará en profundidad el límite asintótico de la eficiencia del ciclo, donde se muestra bajo que condiciones se obtiene $\eta_C \to \eta_{\text{Carnot}}$.

4.3. Límite asintótico de la eficiencia

En esta sección vemos a estudiar el comportamiento de η_C en el límite termodinámico, cuando el número de copias del sistema N tiende a infinito. Las Figuras 4.5 y 4.6 muestran el cociente entre la eficiencia del ciclo y la eficiencia de Carnot para valores de N grandes.

Utilizando la ecuación (3.32) es posible aproximar el numerador de la

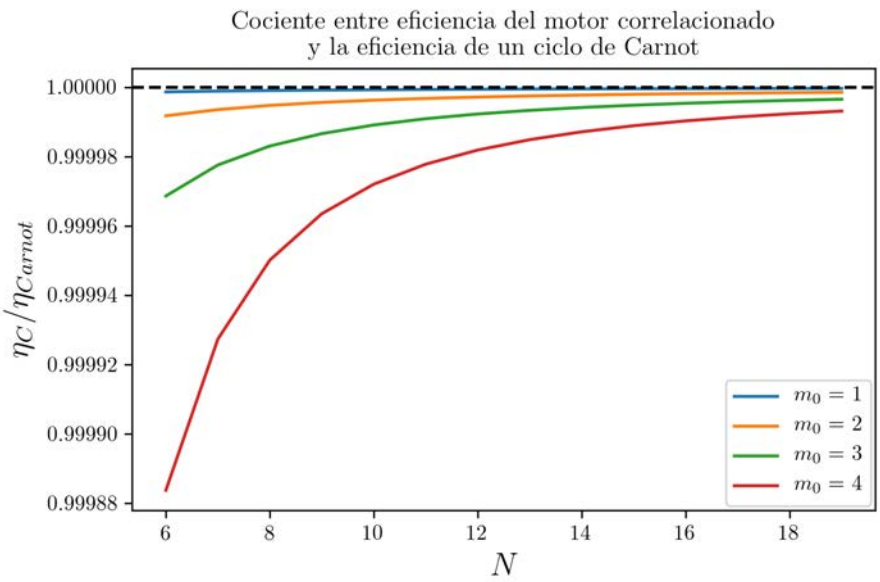


Figura 4.4: *Cociente entre la eficiencia del ciclo basado en estados correlacionados y la eficiencia del ciclo de Carnot clásico.*

ecuación (4.7) como

$$
\begin{aligned}
& k_B T_C \log\left[1 + \frac{g_{m_0}(T_C)}{\sum_{m_0+1}^{N} g_m(T_C)}\right] - N E_0(p_D - p_B) \\
& \approx k_B T_C \log\left[e^{E_0/k_B T_C}\frac{m_0+1}{N-m_0}\right] - N E_0(p_A - p_B) + N E_0(p_A - p_D) \\
& \qquad = k_B T_C \log\frac{m_0+1}{N-m_0} + E_0 \underbrace{\left[1 - N(p_A - p_B)\right]}_{\xrightarrow{N\to\infty} 0} + N E_0(p_A - p_D)
\end{aligned}
$$

donde usamos la Proposición 3.3.3 acerca de la densidad de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos para ver que el segundo término converge a cero cuando el número de copias tiende a infinito. Luego, la eficiencia del ciclo se puede aproximar como

$$
\eta_C \approx 1 - \frac{k_B T_C + C_{N,m_0} E_0(p_A - p_D)}{k_B T_H + C_{N,m_0} E_0(p_A - p_D)} \tag{4.8}
$$

donde

$$
C_{N,m_0} = N \log\frac{N - m_0}{m_0 + 1}
$$

Dependiendo de cómo escale m_0 en función de N, vamos a encontrar dos regímenes distintos.

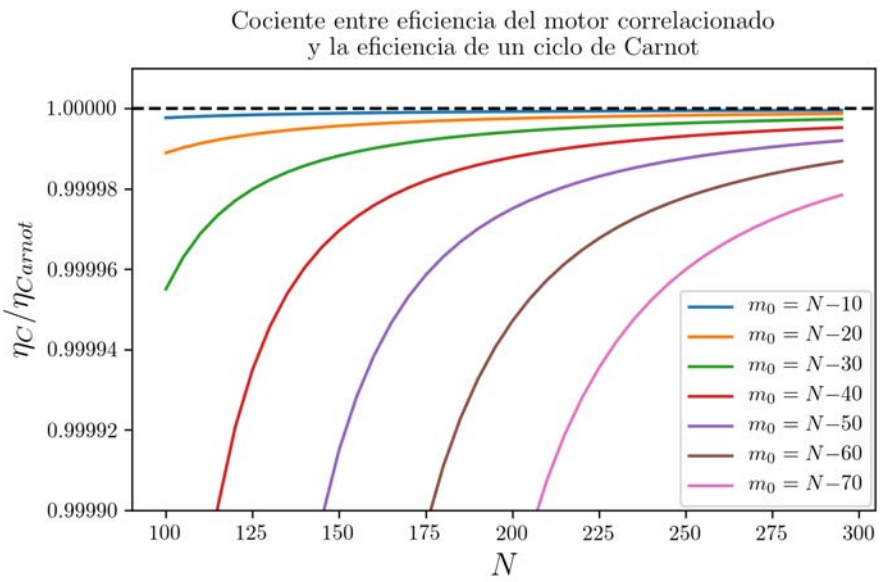


Figura 4.5: *Convergencia de la eficiencia del ciclo basado en estados correlacionados en el caso donde $N - m_0 = \mathcal{O}(1)$.*

4.3.1. Régimen $C_{N,m_0}E_0(p_A - p_D) \to 0$

El primer régimen se caracteriza por cumplir que $C_{N,m_0}E_0(p_A - p_D)$ converge a cero cuando $N \to \infty$. A partir de la definición de p_A, p_D y de la Proposición 3.3.3 es posible demostrar que

$$\frac{N - m_0}{N} \to 0 \quad \Rightarrow \quad C_{N,m_0}E_0(p_A - p_D) \to 0$$

En tal caso, de la ecuación (4.8) se deduce que la eficiencia del ciclo converge a la eficiencia de Carnot cuando el numero de copias tiende a infinito:

$$\eta_C \xrightarrow{N\to\infty} 1 - \frac{T_C}{T_H} \tag{4.9}$$

Esto sucede cuando, por ejemplo, vale $N - m_0 = \mathcal{O}(N^\alpha)$ con $\alpha < 1$. La Figuras 4.5 y 4.6 muestran el cociente $\eta_C/\eta_{\text{Carnot}}$ para los casos donde $N - m_0 = \mathcal{O}(1)$ y $N - m_0 = \mathcal{O}(N^{3/4})$. En ambos casos se observa la convergencia a la eficiencia de Carnot.

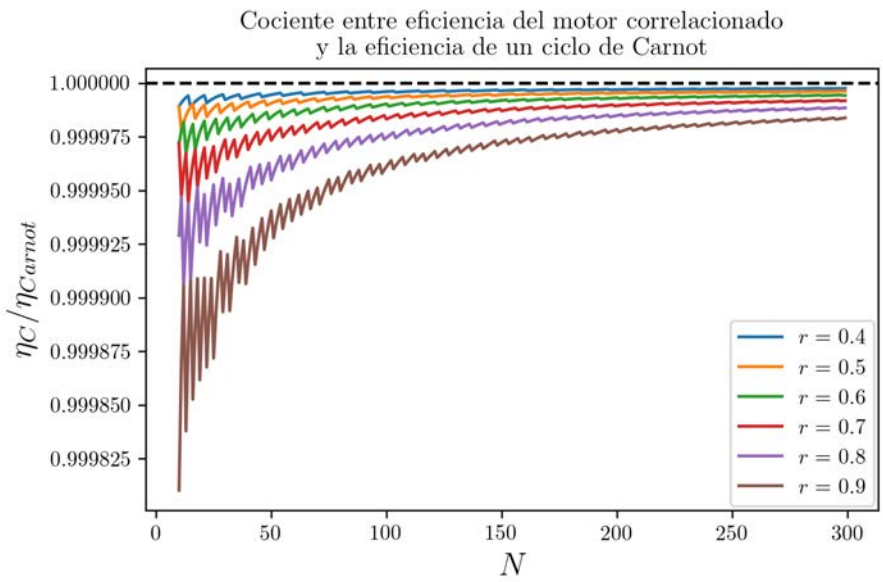


Figura 4.6: *Convergencia de la eficiencia del ciclo basado en estados correlacionados en el caso donde $N - m_0 = rN^{3/4}$ para distintos valores de r.*

4.3.2. Régimen $C_{N,m_0}E_0(p_A - p_D) \to \infty$

Supongamos, a diferencia del caso anterior, que $N - m_0 = rN$, con $r \in (0, 1)$. Computacionalmente se puede ver que para cualquier valor de r positivo se tiene $C_{N,m_0}E_0(p_A - p_D) \to \infty$. Por lo tanto, a partir de la aproximación (4.8) se obtiene que cuando el número de copias tiene a infinito la eficiencia del ciclo converge a cero:

$$\eta_C \xrightarrow{N\to\infty} 0 \tag{4.10}$$

En la Figura 4.7 se muestra el cociente $\eta_C/\eta_{\text{Carnot}}$ para distintos valores de r. En todos los casos se puede ver como la eficiencia disminuye con el número de copias. Para valores de r mayores, la convergencia es más rápida.

4.4. Trabajos anteriores

En esta sección mencionaremos algunos de los resultados obtenidos en trabajos relacionados con la extracción de trabajo de motores cuánticos y los compararemos con los resultados obtenidos en la presente tesis. La principal diferencia que encontramos entre el ciclo térmico correlacionado y

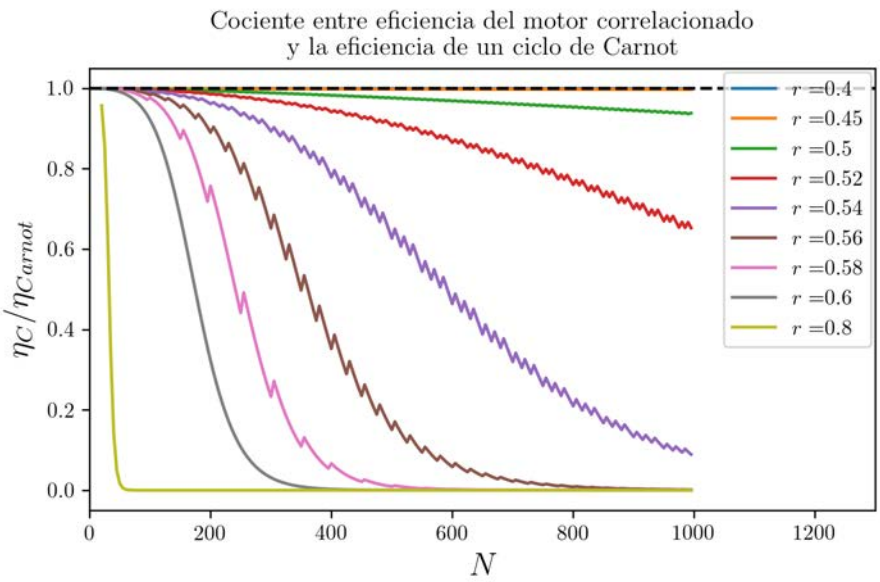


Figura 4.7: *Para $m_0 = \mathcal{O}(N)$ se obtiene que la eficiencia del ciclo térmico basado en estados correlacionados converge a cero.*

otros ciclos es que en la mayoría de los mismos se incluye una probabilidad $\epsilon > 0$ de que la extracción de trabajo falle [28][29]. Durante una iteración del ciclo, la batería evoluciona de la siguiente manera

$$|w_i\rangle\langle w_i| \to (1-\epsilon)\,|w_f\rangle\langle w_f| + \epsilon\,|w_i\rangle\langle w_i| \tag{4.11}$$

donde w_i y w_f son dos energías de la batería distintas con $w_i \leq w_f$. En [28] el reservorio frío está formado por un número finito de qubits y el motor está formado por los dos reservorios térmicos y la batería. Dentro de este contexto, se encuentra que la extracción de trabajo perfecta ($\epsilon = 0$) es imposible. Por otro lado, se observa que la eficiencia del motor tiene dos regímenes distintos. El primer régimen se corresponde al caso donde el gap de energía del reservorio frío es más chico que una determinada cota y la eficiencia coincide con la de Carnot. En el otro régimen, la eficiencia decae y pasa a depender no sólo de las temperaturas sino también del valor del gap.

Por otro lado, en [29] se incluye al sistema S como un catalizador de la transformación térmica. En este trabajo se entiende al reservorio frío como un recurso referido al reservorio caliente. Al igual que para el trabajo anterior, se demuestra que no es posible realizar la transformación (4.11) de manera tal que $\epsilon = 0$ y $w_i < w_f$. Sin embargo, pueden definirse procesos

de extracción cuasi-perfectos con $\epsilon > 0$ pero para los cuales se cumple

$$\frac{\Delta S_W}{w_f - w_i} \to 0$$

donde ΔS_W es el aumento de entropía de la batería. En tal caso se ve que la eficiencia de Carnot tampoco es superada. Sin embargo, cuando este límite es infinito se pueden hallar ciclos térmicos que superan la eficiencia de Carnot.

Otro enfoque distintos es trabajar con cantidades promedios en vez de con un teoría *single-shot*. En [12] se demuestra que es posible extraer de un sistema con estado ρ_S una cantidad promedio de trabajo igual a $F_1(\rho_S) - F_1(\tau_S)$. A su vez, si el sistema está en contacto con dos reservorios a distintas temperaturas, la eficiencia promedio del ciclo térmico coincide con la de Carnot.

A diferencia de estos trabajos, en nuestro caso ambos reservorios son de dimensión infinita. A su vez, las operaciones permitidas son unitarias que conservan la energía total del sistema pero sin permitir el intercambio de energía directo entre el reservorio frío y el reservorio caliente. En todo momento, el sistema se encuentra en contacto con un único reservorio y todo flujo de energía que pueda haber entre los reservorios se hace por medio del sistema.

Mientras que en todos los trabajos anteriores existe una probabilidad de fallar en la extracción de trabajo o se estudian cantidades promedio, nosotros encontramos que a lo largo de una iteración del ciclo se puede extraer una cantidad determinística de trabajo $\mathrm{W}_{\mathrm{motor}}$. A su vez, la eficiencia del ciclo basado en estados correlacionados se asemeja a la eficiencia de Carnot y asintóticamente coinciden.

Capítulo 5

Generalización a Sistemas de Dimensión Arbitraria

En este capitulo vamos a generalizar los resultados presentados a lo largo del Capítulo 3. Recordemos que tanto la forma de la solución al problema de minimizar el trabajo de formación, la definición y caracterización de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos como las propiedades de densidad, reversibilidad y límite termodinámico fueron demostradas únicamente para el caso $D = 2$, es decir, cuando cada uno de los sistemas consiste en un único qubit. Sin embargo, se obtienen resultados análogos para sistemas de dimensión D arbitraria. Notemos que esto incluye el caso de sistemas formados por qubits que interactúan entre ellos.

El problema de encontrar un estado correlacionado de las N copias del sistema con mínimo trabajo de formación se reduce a resolver el siguiente problema de optimización lineal

$$\begin{aligned} &\min_q \quad ||q||_\infty \\ \text{sujeto a} \quad &\sum_{E\in\mathcal{E}_N} \frac{g_{N-1}(E-E_d)}{Z_S^N} e^{-\beta E} q_E = p_d \qquad \forall d = 1,2,\ldots,D \\ &q_E \geq 0 \qquad \forall E \in \mathcal{E}_N \end{aligned}$$

donde E_d son las energía permitidas de cada copia; $\mathcal{E}_N$ son las energías permitidas por el sistema conjunto de las N copias; Z_S es la función de partición del sistema; $g_{N-1}(\cdot)$ es la degeneración del sistema de $N-1$ copias; p

es el vector de autovalores del estado local de cada una de las copias del sistema; y q está definido como el vector que resulta de dividir los autovalores del estado λ_E con los autovalores del estado térmico asociado:

$$q_E = \lambda_E e^{\beta E} Z_S^N$$

El problema de minimización puede ser escrito de una manera más compacta:

$$\begin{aligned} \min_q \quad & ||q||_\infty \\ \text{sujeto a} \quad & Aq = p \\ & q_E \geq 0 \quad \forall E \in \mathcal{E}_N \end{aligned} \tag{5.1}$$

donde $A \in \mathbb{R}^{D \times M}$, con M el tamaño del conjunto $\mathcal{E}_N$ de energías permitidas, es una matriz donde cada fila está asociada a una energía del sistema local E_d, cada columna a una energía E del sistema total y con entradas mayores o iguales a cero dadas por $g_{N-1}(E - E_d)e^{-\beta E}/Z_S^N$. Recordemos que el trabajo de formación correlacionado se calculaba cómo $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}} = k_B T \log ||q||_\infty$. A continuación nos encargaremos de caracterizar soluciones del problema (5.1).

5.1. Solución del problema

Para el caso de dimensión $D = 2$ el estado que minimizaba el trabajo de formación correlacionado tenía asociada una distribución de energía proporcional a la del estado de Gibbs sobre un conjunto U de energías e igual a cero para el resto de las energías. Esto valía siempre para los estados $\mathcal{R}^*$-críticos, mientras que para el resto de los estados valía excepto a lo sumo para una única energía donde la densidad podía ser distinta de cero. Esto es equivalente a haber encontrado una solución óptima $q \in \mathbb{R}^{N+1}$ igual a:

$$q_i = Z\mathbb{1}_{\{i \in U\}} + s\mathbb{1}_{\{i=n\}}$$

En el caso donde D es arbitrario vamos a encontrar una solución de la misma forma, pero donde hay a lo sumo $D - 1$ energías distintas donde q no realiza su norma infinito o es igual a cero. Por otro lado, a diferencia de lo que sucedía en el caso $D = 2$, esta solución no va a ser única. Esto se debe a que la norma infinito no es estrictamente convexa. Sin embargo, es posible caracterizar al menos una de las soluciones del problema. A partir de esta solución va a ser posible generalizar la noción de estados $\mathcal{R}^*$-críticos.

Teorema 5.1.1

Sea el problema de optimización dado por

$$\begin{aligned} \min_{q} \quad & ||q||_\infty \\ \textit{s.a} \quad & Aq = p \\ & q \geq 0 \end{aligned} \tag{5.2}$$

donde $q \in \mathbb{R}^M$, $p \in \mathbb{R}^D$ *y* $A \in \mathbb{R}^{D\times M}$. *Luego existe una solución, no necesariamente única, de la forma*

$$q_i = Z\mathbb{1}_{\{i\in U\}} + \sum_{j=1}^{D-1} s_j \mathbb{1}_{\{i=n_j\}} \tag{5.3}$$

donde $0 \leq s_1, s_2, \ldots, s_{D-1} < Z$, U *es el conjunto de índices donde* q *realiza su norma infinito y* $n_1, n_2, \ldots, n_{D-1} \in \{1, 2, 3, \ldots, M\}$.

Demostración : Definimos a $\mathcal{A}$ como el conjunto de soluciones del problema (5.2). Como $||\cdot||_\infty$ es una distancia y las restricciones $Aq = p$ y $q \geq 0$ definen un conjunto convexo cerrado en $\mathbb{R}^M$, se tiene que existe al menos una solución y por lo tanto el conjunto $\mathcal{A}$ es no vacío. Para cada estado q, sea

$$M(q) = \Big\{ i : q_i \neq 0 \quad \text{y} \quad q_i \neq ||q||_\infty \Big\}$$

y consideremos, para cada p

$$m(p) = \min \Big\{ |M(q)| : q \text{ es solución} \Big\}$$

Queremos probar que $m(p) \leq D-1$ para todo valor de p. Sea $q^\dagger$ una solución al problema tal que $|M(q^\dagger)| = m(p)$ y supongamos que $m(p) \geq D$. Sea un subconjunto $\{i_1, i_2, \ldots, i_D\} \subset M(q^\dagger)$ y consideremos la matriz

$$A_M = \left[\begin{array}{c|c|c|c} a_{i_1} & a_{i_2} & \cdots & a_{i_D} \end{array} \right]$$

donde $a_{i_1}, \ldots, a_{i_D}$ son las columnas $i_1, \cdots, i_D$ de la matriz A. Veamos que la matriz A_M no puede ser inversible. Si la matriz A_M es inversible se puede construir explícitamente una solución $q^{\dagger\dagger}$ con $||q^{\dagger\dagger}||_\infty < ||q^\dagger||_\infty$ de la siguiente

manera

$$q_m^{\dagger\dagger} = \begin{cases} ||q^*||_\infty - \epsilon & \text{si } q_m^\dagger = ||q^\dagger||_\infty \\ x_1 & \text{si } m = i_1 \\ \vdots & \\ x_D & \text{si } m = i_D \\ q_m^\dagger & \text{sino} \end{cases}$$

donde $\epsilon > 0$ y $x_1, \ldots, x_D$ son elegidos de tal forma que se cumplan las restricciones y $x_1, \ldots, x_D < ||q^\dagger||_\infty - \epsilon$. Para que $q^{\dagger\dagger}$ sea solución se debe cumplir:

$$\begin{aligned} p = Aq^{\dagger\dagger} &= A_U \begin{bmatrix} ||q^*||_\infty - \epsilon \\ \vdots \\ ||q^*||_\infty - \epsilon \end{bmatrix} + A_M \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix} \\ &= Aq^\dagger + A_M \begin{bmatrix} x_1 - q_{i_1}^\dagger \\ \vdots \\ x_D - q_{i_D}^\dagger \end{bmatrix} - \epsilon \sum_{m \in U} a_m \end{aligned}$$

donde A_U es la matriz A restringida a las columnas a_m para las cuales $q_m^\dagger = ||q^\dagger||_\infty$, Dado que $Aq^\dagger = p$ y que A_M es inversible, esto se va a cumplir siempre y cuando

$$\begin{bmatrix} x_1 - q_{i_1}^\dagger \\ \vdots \\ x_D - q_{i_D}^\dagger \end{bmatrix} = \epsilon A_M^{-1} \sum_{m \in U} a_m$$

Dado que el término de la derecha esta fijo y que $0 < q_{i_j}^\dagger < ||q^\dagger||_\infty$, existe un $\epsilon > 0$ suficientemente chico tal que $0 < x_i < ||q^\dagger||_\infty$. En tal caso $||q^{\dagger\dagger}||_\infty = ||q^\dagger||_\infty - \epsilon < ||q^\dagger||_\infty$, con lo cual $q^\dagger$ no sería solución, llegando a un absurdo. Por lo tanto concluimos que la matriz A_M no es inversible.

Dado que la matriz A_M no es inversible, existe una solución no trivial a la ecuación $A_M x = 0$. De esta manera, es posible definir otra nueva solución al problema $Aq = p$ pero que sea de la forma

$$q_m^{\dagger\dagger} = \begin{cases} ||q^*||_\infty & \text{si } q_m^\dagger = ||q^\dagger||_\infty \\ q_m^\dagger + \delta x_1 & \text{si } m = i_1 \\ \vdots & \\ q_m^\dagger + \delta x_D & \text{si } m = i_D \\ q_m^\dagger & \text{sino} \end{cases}$$

Luego es inmediato que existe un $\delta > 0$ y un índice i_k tal que $q_{i_k}^{\dagger\dagger} = 0$ ó $q_{i_k}^{\dagger\dagger} = ||q^\dagger||_\infty$ y $0 < q_m^{\dagger\dagger} < ||q^\dagger||_\infty$ para todo $m \neq i_k$. Por lo tanto $M(q^{\dagger\dagger}) = m(p) - 1$, lo cual contradice la definición de $m(p)$. Finalmente concluimos que $m(p) \leq D - 1$ para todo p. ■

Al igual que en el caso $D = 2$, este teorema establece que la distribución

en energía de los estados que tienen mínimo trabajo de formación es proporcional a la distribución del estado térmico del sistema sobre un conjunto de energías. Entre el resto de las energías, sólo $D-1$ de ellas tienen probabilidad no nula de ocurrir. Cuando el número de copias del sistema N es muy grande, las $D-1$ energías que escapan a la regla pasan a ser despreciables, por lo cual los estados que son solución se pueden aproximar directamente como el estado térmico normalizado sobre un nuevo conjunto de energías.

Dado que p es un vector de probabilidades, notemos que las constantes Z y $s_1, s_2, \ldots, s_{D-1}$ tienen que ser tales que se cumpla $||p||_1 = 1$, es decir

$$Z\left\|\sum_{m\in U} a_m\right\|_1 + \sum_{j=1}^{D-1} s_j \left\|a_{n_j}\right\|_1 = 1 \tag{5.4}$$

En la Figura 5.1 se muestra la forma de la solución óptima dada por el Teorema 5.1.1 para el caso $D = 3$. Dada una trayectoria en el espacio de estados locales caracterizados por la distribución de probabilidad $p = (p_1, p_2, p_3)$ (camino entre los estados Γ, X e Y de la Figura 5.1a) se muestran los valores obtenidos mediante la optimización computacional de las variables Z, s_1 y s_2. En todos los casos se corroboró que los estados que minimizan el trabajo de formación correlacionado son de la forma (5.3).

5.2. Generalización de estados $\mathcal{R}^*$-críticos

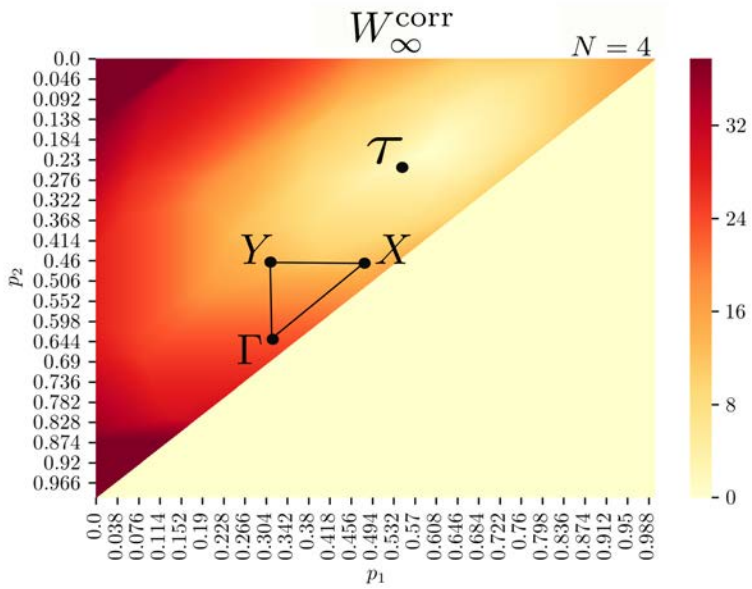
En esta sección veremos como es posible generalizar la noción de estado $\mathcal{R}^*$-crítico. A partir de este momento vamos a indexar a las coordenadas del vector q y las columnas de la matriz A por medio de la energía E asociada. Definimos los estados $\mathcal{R}^*$-críticos como el conjunto de soluciones al problema (5.1) que quedan caracterizados por un conjunto de energías permitidas $\mathcal{E} \subset \mathcal{E}_N$ y que son de la forma

$$(q^*_{\mathcal{E}})_E = Z_{\mathcal{E}} \mathbb{1}_{\{E\in\mathcal{E}\}} \tag{5.5}$$

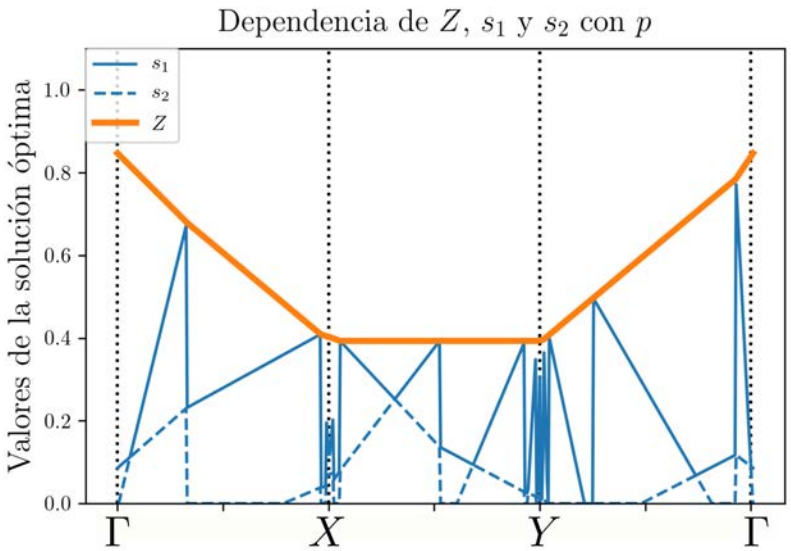
donde

$$Z_{\mathcal{E}} = \frac{1}{\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}} a_E\right\|_1} \tag{5.6}$$

o, equivalentemente, las soluciones que resultan del Teorema 5.1.1 que cumplen $s_1 = \ldots = s_{D-1} = 0$. Cada estado $\mathcal{R}^*$-crítico de la forma (5.5) tiene asociado un vector de probabilidades $p^*_{\mathcal{E}}$ para el cual $q^*_{\mathcal{E}}$ es solución



(a) *Trabajo de formación correlacionado.*



(b) *Valores de Z, s_1 y s_2.*

Figura 5.1: *Para el caso $D = 3$, el trabajo de formación correlacionado W_∞^{corr} y el estado que minimiza el trabajo de formación se pueden obtener resolviendo un problema de minimización con restricciones. Computacionalmente se pueden obtener ambas cantidades (a,b). Para el estado térmico del sistema τ el trabajo de formación es idénticamente cero. Consideramos la trayectoria $\Gamma - X - Y - \Gamma$ en el espacio de las distribuciones de probabilidad p que representan el estado local de cada una de las partes del sistema (a). Para estos estados, se muestra el valor de los parámetros Z, s_1 y s_2 (b). En todos los casos se observa que las soluciones del problema* (5.2) *quedan completamente caracterizadas por el valor de Z y los dos valores que toman s_1 y s_2.*

del sistema $Aq^*_{\mathcal{E}} = p^*_{\mathcal{E}}$ y además q^* es óptimo:

$$p^*_{\mathcal{E}} = \frac{1}{\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}} a_E\right\|_1} \sum_{E\in\mathcal{E}} a_E$$

Notemos que la proposición 3.3.2 sigue siendo válida para sistemas de dimensión D arbitraria. Por lo tanto, los estados de la forma (5.5) también resultan ser reversibles.

Como vimos en el Capítulo 3, para el caso $D = 2$ los únicos conjuntos de energías $\mathcal{E}$ para los cuales se obtienen estados $\mathcal{R}^*$-críticos son $\{E : E \geq aE_0, a = 0, 1, \ldots, N\}$ y $\{E : E \leq bE_0, b = 0, 1, \ldots, N\}$. Sin embargo, para $D > 2$ y energías $E_1, E_2, \ldots, E_D$ arbitrarias no es posible caracterizar los conjuntos $\mathcal{E}$, por lo tanto tampoco es posible obtener una expresión analítica de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos. A pesar de ello, podemos dar una construcción implícita de los mismos. Veamos como cualquier solución de la forma (5.3) puede ser escrita por medio una suma convexa de estados $\mathcal{R}^*$-críticos. Supongamos que $s_1, s_2, \ldots, s_{D-1}$ están ordenados de mayor a menor y tiene asociadas energías $\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots, \epsilon_{D-1}$, respectivamente. Notemos por $\mathcal{E}_j$ al conjunto formado por las primeras j energías $\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots, \epsilon_j$. Luego:

$$\begin{aligned}
q_E &= Z_{\mathcal{E}} \mathbb{1}_{\{E\in\mathcal{E}\}} + \sum_{j=1}^{D-1} s_j \mathbb{1}_{\{E=\epsilon_j\}} \\
&= (Z_{\mathcal{E}} - s_1)\mathbb{1}_{\{E\in\mathcal{E}\}} \\
&+ (s_1 - s_2)\mathbb{1}_{\{E\in\mathcal{E}\}\cup\{E\in\mathcal{E}_1\}} \\
&\quad \vdots \\
&+ (s_{D-2} - s_{D-1})\mathbb{1}_{\{E\in\mathcal{E}\}\cup\{E\in\mathcal{E}_{D-2}\}} \\
&+ s_{D-1}\mathbb{1}_{\{E\in\mathcal{E}\}\cup\{E\in\mathcal{E}_{D-1}\}} \\
&= \lambda_1 (q^*_{\mathcal{E}})_E + \lambda_2 (q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_1})_E + \ldots + \lambda_D (q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}})_E
\end{aligned}$$

donde $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_D$ son todos valores positivos que cumplen $\lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_D = 1$ dados por[1]:

$$\lambda_1 = (Z_{\mathcal{E}} - s_1)\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}} a_E\right\|_1 \quad , \quad \lambda_D = s_{D-1}\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} a_E\right\|_1$$

$$\lambda_j = (s_{j-1} - s_j)\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{j-1}} a_E\right\|_1 \quad j = 2, 3, \ldots, D-1$$

[1]Para que esto sea cierto es necesario pedir que la matriz A tenga todas entradas no negativas, lo cual en nuestro caso es cierto para cualquier sistema físico.

Por lo tanto, tenemos que cualquier solución como la del Teorema 5.1.1 puede ser escrita como una combinación convexa de estados de la forma (5.5):

$$q = \lambda_1 q^*_{\mathcal{E}} + \lambda_2 q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_1} + \ldots + \lambda_D q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} \tag{5.7}$$

Restaría ver que todos los sumandos de la combinación convexa están asociados a estados $\mathcal{R}^*$-críticos. Supongamos que $q^*_{\mathcal{E}}$ no es estado $\mathcal{R}^*$-crítico y por lo tanto existe $\tilde{q}$ con $||\tilde{q}||_\infty < ||q^*_{\mathcal{E}}||_\infty$ y $A\tilde{q} = Aq^*_{\mathcal{E}}$. Luego es claro que

$$q^\dagger = \lambda_1 \tilde{q} + \lambda_2 q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_1} + \ldots + \lambda_D q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}}$$

cumple la condición $Aq^\dagger = Aq$. Por otro lado:

$$\begin{aligned}
||q^\dagger||_\infty &\leq \lambda_1 ||\tilde{q}||_\infty + \ldots + ||q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}}||_\infty \\
&< \lambda_1 ||q^*_{\mathcal{E}}||_\infty + \ldots + ||q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}}||_\infty \\
&= \lambda_1 \frac{1}{\|\sum_{E\in\mathcal{E}} a_E\|_1} + \ldots + \lambda_D \frac{1}{\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} a_E\right\|_1} \\
&= Z_{\mathcal{E}} = ||q||_\infty
\end{aligned}$$

Es decir que $||q^\dagger|| < ||q||_\infty$, lo cual es un absurdo dado que partimos de que q era solución del problema de optimización. De la misma manera se deduce que $q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_1}, \ldots, q^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}}$ son estados $\mathcal{R}^*$-críticos. La siguiente proposición resume lo anteriormente dicho.

Proposición 5.2.1

Sean N copias de un sistema de dimensión D y sea p la distribución de probabilidad en energía del estado local de cada copia. Luego, existe un estado de las N copias correlacionado caracterizado por el vector $q(p)$ que minimiza el trabajo de formación. Más aún, existen $p^*_1, p^*_2, \ldots, p^*_D$ vectores de probabilidad asociados a estados $\mathcal{R}^*$-críticos $q(p^*_1), q(p^*_2), \ldots, q(p^*_D)$ reversibles tales que

$$p = \lambda_1 p^*_1 + \lambda_2 p^*_2 + \ldots + \lambda^*_D \tag{5.8}$$

$$q(p^*) = \lambda_1 q(p^*_1) + \lambda_2 q(p^*_2) + \ldots + \lambda_D q(p^*_D) p^*_D \tag{5.9}$$

donde $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_D$ son números reales positivos que cumplen $\lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_D = 1$.

5.2.1. Densidad y estados cuasi-térmicos

Como vimos en la sección anterior, es posible generalizar la noción de estados $\mathcal{R}^*$-críticos para dimensión D arbitraria. Hasta el momento, los estados $\mathcal{R}^*$-críticos generalizados representan una familia de estados de las N copias que cumplen ser reversibles, tener mínimo trabajo de formación y a partir de los cuales es posible reconstruir cualquier otra solución óptima que minimice el trabajo de formación para un valor de p arbitrario. Por lo tanto, conociendo el trabajo de formación correlacionado para los estados $\mathcal{R}^*$-críticos es posible calcular el trabajo de formación correlacionado para cualquier valor p del estado local del sistema. En esta sección nos encargaremos de ver qué sucede con la densidad de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos y con la existencia de estados cuasi-térmicos, tales como los que fueron definidos en la sección 3.3.3.

Al no contar con una expresión analítica de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos y los respectivos valores p^*, resulta imposible realizar una demostración explícita que establezca que la distancia entre valores p^* cercanos converge a cero cuando $N \to \infty$. Recordemos que para el caso $D = 2$ incluso fue necesario recurrir a un lema acerca del límite asintótico de la distribución binomial. Sin embargo, es fácil convencerse de que la distancia entre los valores p^* asociados a los estados $\mathcal{R}^*$-críticos que aparecen en la suma convexa (5.9) (lo cual es sería la generalización de los valores $p^*_{m_0}$ y $p^*_{m_0+1}$ consecutivos de la Proposición 3.3.3) converge a cero cuando el número de copias N tiende a infinito. En el peor de los casos, la distancia en norma 1 entre dos valores p^* va a estar dada por:

$$\begin{aligned}
\left\| p^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} - p^*_{\mathcal{E}} \right\|_1 &= \left\| \frac{1}{\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} a_E\right\|_1} \sum_{E\in\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} a_E - \frac{1}{\|\sum_{E\in\mathcal{E}} a_E\|_1} \sum_{E\in\mathcal{E}} a_E \right\|_1 \\
&= \left\| \frac{\sum_{E\in\mathcal{E}_{D-1}} a_E}{\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} a_E\right\|_1} - \frac{\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}_{D-1}} a_E\right\|_1 \sum_{E\in\mathcal{E}} a_E}{\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} a_E\right\|_1 \|\sum_{E\in\mathcal{E}} a_E\|_1} \right\|_1 \\
&\leq 2 \frac{\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}_{D-1}} a_E\right\|_1}{\left\|\sum_{E\in\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} a_E\right\|_1}
\end{aligned}$$

Notemos que la cantidad de sumandos que aparecen en el numerador es a lo sumo $D-1$, mientras que el tamaño de sumandos del denominador es función de que tan grande es el conjunto de energías $\mathcal{E}$ que definen al estado $\mathcal{R}^*$-crítico. Sin embargo, es de esperar que el tamaño de $\mathcal{E}$ aumente

con el número de copias, de manera tal que

$$\left\| p^*_{\mathcal{E}\cup\mathcal{E}_{D-1}} - p^*_{\mathcal{E}} \right\|_1 = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^\alpha}\right)$$

para algún $\alpha > 0$.

La existencia de estados cuasi-térmicos, es decir, estados para los cuales el trabajo de formación de una copia es igual al trabajo de formación correlacionado de N copias, para una dimensión D arbitraria resulta ser sumamente difícil de demostrar. Esto se debe a que los mismos dependen fuertemente de las energías $E_1, E_2, \ldots, E_D$ del sistema. Distintos niveles de energías hacen que ciertos valores de p admitan estados cuasi-térmicos y otros no. Por lo tanto, nos limitaremos a mostrar por medio de simulaciones numéricas qué sucede para el caso $D = 3$.

En las Figuras 5.2 y 5.3 se muestra el cociente entre el trabajo de formación de una única copia $W_\infty(\rho)$ y el trabajo de formación correlacionado de N copias como función de p para distintos N y distintas energías del sistema. Lo primero que se observa son los cambios abruptos del cociente $W_\infty(\rho)/\,\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho, N)$ asociados a las discontinuidades en la derivada de $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho, N)$ para los puntos $\mathcal{R}^*$-críticos. Esto mismo lo observábamos para $D = 2$, pero para dimensiones mayores la estructura de las regiones delimitadas por los estados $\mathcal{R}^*$-críticos resulta ser cada vez más compleja.

Por otro lado, se observa que existe una región (azul oscuro) donde $W_\infty(\rho) = \mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho, N)$. Esta región corresponde a valores de p cercanos al estado de Gibbs del sistema para los cuales el estado que minimiza el trabajo de formación correlacionado resulta ser cuasi-térmico.

5.3. Límite termodinámico

Para finalizar veremos para el caso de dimensión D arbitraria que el trabajo de formación correlacionado por copia converge al trabajo estándar de N copias, es decir:

$$\frac{\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho, N)}{N} \xrightarrow{N\to\infty} W_1(\rho) \tag{5.10}$$

Más aún, es posible demostrar que la tasa de convergencia no depende de D y es exactamente $\mathcal{O}(\log N/N)$. Dado que los estados $\mathcal{R}^*$-críticos son densos y aproximan a cualquier estado cuando $N \to \infty$, basta con probar (5.10) para estados ρ^* que sean $\mathcal{R}^*$-críticos. Para los mismos, el trabajo de

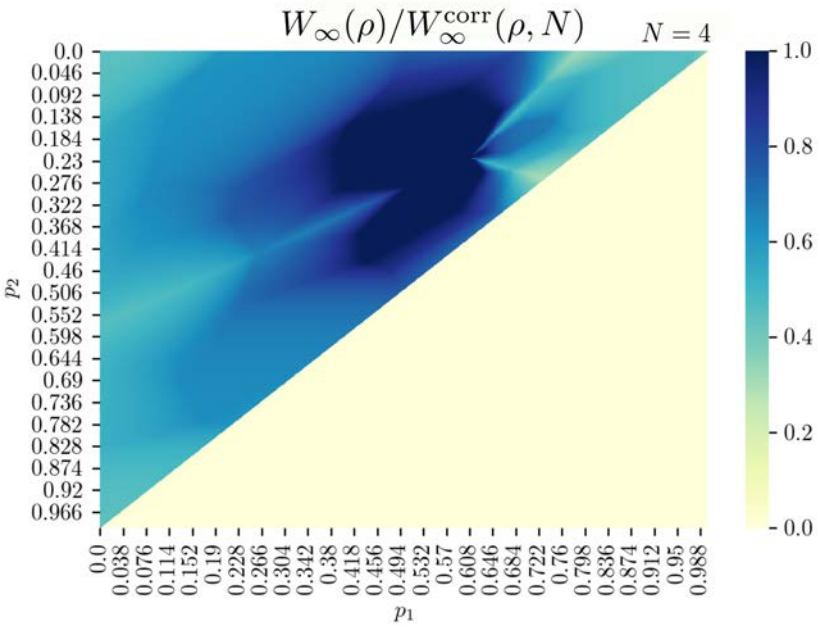


Figura 5.2: *Cociente entre la energía necesaria para formar una única copia del sistema y el trabajo de formación correlacionado de $N = 4$ copias para distintos valores de $p = (p_1, p_2, p_3)$. Las energías del sistema son tales que $E_1/k_BT = 0$, $E_2/k_BT = 1$, $E_3/k_BT = 1{,}3$.*

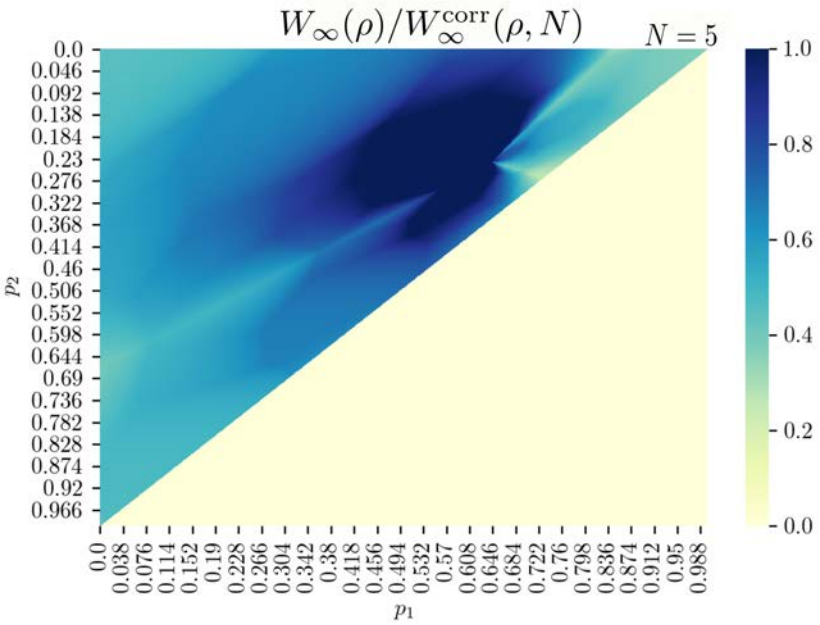


Figura 5.3: *Cociente entre la energía necesaria para formar una única copia del sistema y el trabajo de formación correlacionado de $N = 5$ copias para distintos valores de $p = (p_1, p_2, p_3)$. Las energías del sistema son tales que $E_1/k_BT = 0$, $E_2/k_BT = 1$, $E_3/k_BT = 1{,}7$.*

formación correlacionado esta dado por

$$\begin{aligned}
\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}(\rho^*, N) &= +k_B T \log Z_{\mathcal{E}} \\
&= -k_B T \log \left\| \sum_{E \in \mathcal{E}} a_E \right\|_1 \\
&= -k_B T \log \left[\sum_{E \in \mathcal{E}} \sum_{i=1}^{D} \frac{g_{N-1}(E - E_i)}{Z_S^N} e^{-\beta E} \right] \\
&= -k_B T \log \left[\sum_{E \in \mathcal{E}} \frac{1}{Z_S^N} e^{-\beta E} \sum_{i=1}^{D} g_{N-1}(E - E_d) \right] \\
&= -k_B T \log \left[\sum_{E \in \mathcal{E}} \frac{g_N(E)}{Z_S^N} e^{-\beta E} \right] \qquad (5.11)
\end{aligned}$$

donde usamos que

$$g_N(E) = \sum_{i=1}^{D} g_{N-1}(E - E_d)$$

En general, dados los niveles de energía y el número de copias N no es posible encontrar una expresión cerrada para la degeneración. Consideremos la energía media de una única copia no correlacionada dada por

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^{D} p_i E_i$$

y supongamos que, bajo las hipótesis adecuadas[2] se tiene que $N\langle E \rangle \in \mathcal{E}$ y $Np_1, Np_2, \ldots, Np_D \in \mathbb{N}$. En tal caso, podemos acotar la suma en (5.11) por el único sumando $N\langle E \rangle$ de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}(\rho^*, N) &= -k_B T \log \left[\sum_{E \in \mathcal{E}} \frac{g_N(E)}{Z_S^N} e^{-\beta E} \right] \\
&\leq -k_B T \log \left[\frac{g_N(N\langle E \rangle)}{Z_S^N} e^{-\beta N \langle E \rangle} \right] \\
&= N\langle E \rangle + N k_B T \log Z_S - k_B T \log \left[g_N(N\langle E \rangle) \right] \qquad (5.12)
\end{aligned}$$

Notemos ahora que la degeneración $g_N(N\langle E \rangle)$ es mayor o igual que el número de configuraciones del sistema de N copias correlacionadas con Np_1 copias con energía E_1, Np_2 copias con energía E_2 y así consecutivamente.

[2]Dichas hipótesis son explicitadas en el Apéndice D donde se prueba que si $p_1, p_2, \ldots, p_D$ son racionales entonces siempre se tiene $N\langle E \rangle \in \mathcal{E}$.

Es decir, vale la siguiente desigualdad:

$$\begin{aligned} g_N(N\langle E\rangle) &\geq \binom{N}{Np_1}\binom{N-Np_1}{Np_2}\cdots\binom{N-Np_1-\ldots-Np_{D-1}}{Np_D} \\ &= \frac{N!}{(Np_1)!(Np_2)!\ldots(Np_D)!} \end{aligned}$$

Luego, tomando logaritmo y utilizando la aproximación de Stirling se obtiene

$$g_N(N\langle E\rangle) \geq -\sum_{i=1}^{D} Np_i \log p_i = NS(\rho^*) + \mathcal{O}(\log N) \tag{5.13}$$

donde $S(\rho^*)$ es la entropía de von Neumann del estado local del sistema $\rho^* = \sum_{i=1}^{D} p_i \left|E_i\right\rangle\!\left\langle E_i\right|$. Volviendo a la ecuación (5.12) tenemos

$$\begin{aligned} \mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho^*, N) &\leq N\langle E\rangle + Nk_BT\log Z_S - k_BT\log\Big[g_N(N\langle E\rangle)\Big] \\ &\leq N\langle E\rangle + Nk_BT\log Z_S - k_BTS(\rho^*) + \mathcal{O}(\log N) \\ &= N\Big[\langle E\rangle - k_BTS(\rho^*)\Big] + Nk_BT\log Z_S + \mathcal{O}(\log N) \\ &= N\Big[F_1(\rho^*) - F_1(\tau)\Big] + \mathcal{O}(\log N) \end{aligned}$$

A partir de la misma cuenta que fue realizada en el capítulo 3 (ecuación (3.36)) se tiene la otra desigualdad y se obtiene

$$NW_1(\rho^*) \leq \mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho^*, N)$$

Dado que los estados $\mathcal{R}^*$-críticos son densos y que el trabajo de formación correlacionado de cualquier estado local ρ queda determinado por el trabajo de formación correlacionado de estados $\mathcal{R}^*$-críticos, finalmente se obtiene que para cualquier estado local ρ del sistema el trabajo de formación $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$ por copia correlacionada converge a la diferencia de energía libre estándar ΔF_1:

$$\frac{\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}(\rho, N)}{N} \xrightarrow{N\to\infty} \Delta F_1(\rho)$$

Conclusiones

En la presente tesis fue introducido el concepto de trabajo de formación correlacionado. El mismo responde a la necesidad operacional de averiguar cuál es la mínima cantidad de energía que es necesaria para formar un estado de N partes con estado local ρ fijo. Por un lado, es interesante saber qué sucede cuando el número de copias correlacionadas del sistema N está fijo, donde fueron encontrados caracterizados los estados $\mathcal{R}^*$-críticos. Por otra parte, es interesante estudiar qué ocurre en el límite termodinámico cuando $N \to \infty$.

A lo largo del capítulo 3 se estudió en profundidad el caso donde cada una de las copias correlacionadas del sistema está formada por un único qubit ($D = 2$). Se encontraron expresiones analíticas para el trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}$, así como la distribución de energía de los estados correlacionados que minimizan el trabajo de formación. Vimos que estos estados son esencialmente una distribución térmica sobre un subconjunto de energías.

Dentro de los estados locales $\rho = (1-p)\,|0\rangle\langle 0| + p\,|E_0\rangle\langle E_0|$ caracterizamos a los estados $\mathcal{R}^*$-críticos. Vimos que para ciertos valores p^*, el estado asociado ρ^* que minimiza el trabajo de formación cumple propiedades particularmente interesantes. En un primer lugar, a parir de estos estados es posible calcular el trabajo de formación correlacionado para cualquier otro valor de p. A su vez, el estado asociado con mínimo trabajo de formación se puede escribir como una combinación convexa de estados $\mathcal{R}^*$-críticos.

En un segundo lugar demostramos que los estados $\mathcal{R}^*$-críticos son una subfamilia de estados reversibles y densos en el espacio de estados. Para sistemas de dimensión chica, típicamente se tiene que el trabajo de formación es estrictamente mayor que el trabajo de extracción. Sin embargo, la misma energía que se puede extraer de los estados $\mathcal{R}^*$-críticos es la que es necesaria invertir para formarlo a partir del estado térmico del sistema. A

partir del estudio y caracterización del trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}$ surgió naturalmente la existencia de estos estados reversibles (de los cuales no sabíamos que existían hasta este momento). Por otro lado, la densidad se traduce en que dado cualquier estado local del sistema existe un número N y un estado $\mathcal{R}^*$-crítico correlacionado de las N partes tal que ambos estados difieren sólo en un pequeño error.

La combinación de las propiedades de reversibilidad y densidad constituyen una de las partes que son características del límite termodinámico. Ambas se traducen en que cuando el número de copias correlacionadas N tiende a infinito, todos los estados locales del sistema son reversibles. La otra parte del límite se completó viendo que el trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}(\rho, N)$ converge a la diferencia de energía libre $W_1(\rho)$ para todo estado ρ del sistema.

Además, fue posible encontrar una familia de estados para los cuales el trabajo de formación de una copia no correlacionada $W_{\infty}(\rho)$ coincide con el trabajo de formación correlacionado de N copias $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}(\rho, N)$. Denominamos a los mismos estados cuasi-térmicos debido a que difieren del estado térmico del sistema por un pequeño error que converge exponencialmente a cero cuando $N \to \infty$. Es sumamente interesante observar cómo el estudio del trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_{\infty}^{\mathrm{corr}}$ permitió encontrar esta subfamilia de estados.

En el capítulo 4 vimos que el estudio del trabajo de formación correlacionado permitió definir un nuevo ciclo térmico en el régimen cuántico. Estos motores térmicos son una aplicación directa de la teoría desarrollada en el capítulo 3 sobre los estados $\mathcal{R}^*$-críticos. A lo largo del ciclo, se lleva al sistema de las N copias correlacionadas a través de estados $\mathcal{R}^*$-críticos (y por lo tanto reversibles) estando en contacto con dos reservorios térmicos a distintas temperaturas de manera alternada.

Caracterizamos el trabajo $\mathrm{W}_{\mathrm{motor}}$ que se extrae en cada iteración del ciclo y definimos de manera consistente con la primera ley de la termodinámica el calor entregado por el reservorio caliente Q_H y calor absorbido por el reservorio frío Q_C. Un detalle importante es que el ciclo térmico correlacionado extrae una cantidad determinística de trabajo y no tiene probabilidad de fallar en la extracción de trabajo. A partir de las expresiones para $\mathrm{W}_{\mathrm{motor}}$ y Q_H, se puede obtener la eficiencia η_C del ciclo basado en correlaciones. Vimos que existe un régimen en el cual $\eta_C \to \eta_{\mathrm{Carnot}}$. Más aun, para valores de N chicos ya se tiene que $\eta_C \approx \eta_{\mathrm{Carnot}}$. Por ejemplo, para $N = 6$ se tiene que $0{,}9998 \leq \eta_C/\eta_{\mathrm{Carnot}}$.

Para finalizar, en el capítulo 5 fueron generalizados los resultados del ca-

pítulo 3 para sistemas de dimensión D arbitraria. Vimos que el mismo teorema que permitió encontrar los estados correlacionados con mínimo trabajo de formación puede generalizarse para encontrar estados correlacionados de las N copias de dimensión D con trabajo de formación mínimo. Sin hipótesis adicionales sobre los niveles de energía del sistema, no es posible probar la unicidad de la solución. Sin embargo, la solución hallada permite construir los estados $\mathcal{R}^*$-críticos, mostrar que los mismos son densos, que existen estados cuasi-térmicos y que en el límite termodinámico el trabajo de formación correlacionado $\mathrm{W}_\infty^{\mathrm{corr}}$ por copia coincide con la diferencia de energía libre estándar.

Dentro de este marco, mostramos que la diferencia de energía estándar de un estado es igual a la mínima energía que es necesaria invertir para crear un estado correlacionado localmente equivalente en el límite termodinámico. Por otro lado, en el límite termodinámico recuperamos la segunda ley de la termodinámica para sistemas correlacionados.

Apéndice A

Mayorización

La relación de mayorización es una herramienta matemática de gran utilidad y con múltiples aplicaciones [20]. En particular, recientes trabajos en las áreas de información cuántica [17] y termodinámica cuántica [5] [6] muestran como la mayorización es la cantidad que gobierna las transformaciones de estados.

La relación de mayorización permite determinar cual de dos distribuciones de probabilidad es más desordenada respecto de la otra. Formalmente, dados dos vectores $x, y \in \mathbb{R}^d$ tales que $\sum_{i=1}^d x_i = \sum_{i=1}^d y_i = 1$ decimos que x es mayorado por y (o que y mayoriza a x) y lo notamos como $x \prec y$ si se cumple

$$\sum_{j=1}^{k} x_j^{\downarrow} \leq \sum_{j=1}^{k} y_j^{\downarrow} \quad \forall k = 1, 2, \ldots, d \tag{A.1}$$

donde $x^{\downarrow}$ e $y^{\downarrow}$ son los vectores x e y ordenados de mayor a menor.

Si bien la ecuación A.1 permite chequear rápidamente si el vector y mayoriza a x, la misma resulta poco intuitiva y no tan fácil de generalizar. Sin embargo, el siguiente resultado muestra la conexión entre la definición anterior y el desorden de una distribución de probabilidad [20][30].

Proposición A.0.1

Dados dos vectores de probabilidad $x, y \in \mathbb{R}^d$, se tiene que $x \prec y$ si y sólo si existen una distribución en probabilidad p_j y matrices de permutación $P_j \in \mathbb{R}^{d \times d}$ tales que $x = \sum p_j P_j y$

La mayorización define un orden parcial en el espacio de vectores de

probabilidad. Por ejemplo, es fácil ver que

$$\left(\frac{7}{10}, \frac{1}{10}, \frac{1}{10}, \frac{1}{10}\right) \not\prec \left(\frac{6}{10}, \frac{3}{10}, \frac{1}{10}, 0\right)$$
$$\left(\frac{6}{10}, \frac{3}{10}, \frac{1}{10}, 0\right) \not\prec \left(\frac{7}{10}, \frac{1}{10}, \frac{1}{10}, \frac{1}{10}\right)$$

Funciones Schur convexas

La mayorización es un concepto estrechamente ligado al de convexidad de funciones. Decimos que una función $\phi : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ es Schur convexa si

$$x \prec y \quad \Rightarrow \quad \phi(x) \leq \phi(y)$$

En el contexto de funciones convexas y Schur convexas se obtiene el siguiente resultado

Proposición A.0.2

Dados dos vectores $x, y \in \mathbb{R}^d$

$$x \prec y \quad \Longleftrightarrow \quad \sum_{i=1}^{d} g(x_i) \leq \sum_{i=1}^{d} g(y_i) \quad \forall g \textit{ convexa}$$

Este resultado esta relacionado con las distintas energías libres que aparecen en termodinámica cuántica. Algunos ejemplos importantes de funciones Schur convexas son la entropía de Shannon dada por $S(p) = -\sum_{i=1}^{d} p_i \log p_i$ o el mapa $p \mapsto \sum_{i=1}^{d} p_i^k$, con $k \geq 1$.

Mayorización en mecánica cuántica

El concepto de mayorización se extiende de forma natural en el contexto de la mecánica cuántica, donde toda la información del sistema físico de estudio está contenida en el operador densidad. De la misma manera, decimos que un operador hermítico H es mayorizado por otro operador K si $\lambda(H) \prec \lambda(K)$, donde $\lambda(\cdot)$ representa el vector de autovalores del operador en cuestión.

De la misma manera que la proposición A.0.1 valia para vectores de probabilidad, para operadores se tiene un resultado similar conocido como el

teorema de Uhlmann [30], el cual es la raíz de muchos resultados importantes dentro de la teoría de recursos en termodinámica cuántica.

Teorema A.0.1 (*Uhlmann*)

Sean H y K dos operadores hermíticos de dimensión finita. Entonces $H \prec K$ si y sólo si existen una distribución de probabilidad p_j y operadores unitarios U_j tales que

$$H = \sum_j p_j U_j K U_j^\dagger$$

Apéndice B

Entropía y divergencia de Renyi

Las entropías de Renyi surgen como una generalización de la entropía de Shannon y son un concepto clave dentro de la termodinámica cuántica. Al igual que la entropía de Shannon, las entropías de Renyi cuantifican la incerteza o el nivel de desorden de una distribución de probabilidad. Las mismas quedan definidas de la siguiente manera:

Definición B.0.1 (*Renyi Entropies*)

Dado un vector de probabilidad $p = (p_1, p_2, \ldots, p_d)$ *y para* $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0, 1\}$*, se definen las entropías de Renyi como*

$$H_\alpha(p) = \frac{\operatorname{sgn}(\alpha)}{1-\alpha} \log \sum_{i=1}^{d} p_i^\alpha \tag{B.1}$$

donde $\operatorname{sgn}(\cdot)$ es la función signo. Para $\alpha \in \{-\infty, 0, 1, \infty\}$ las entropías de Renyi se definen por continuidad como

$$H_{-\infty}(p) = \log \operatorname{mín}\{p_i\} \qquad H_0(p) = \log \operatorname{rank} p$$

$$H_1(p) = S(p) = -\sum_{i=1}^{d} p_i \log p_i \qquad H_\infty(p) = -\log \operatorname{máx}\{p_i\}$$

Por lo tanto, las H_α definen una familia de entropías parametrizadas por $\alpha \in \mathbb{R}$. En el caso particular de $\alpha = 1$ se recupera la entropía de Shannon. Para un vector de probabilidad p fijo, las entropías de Renyi son monótonas

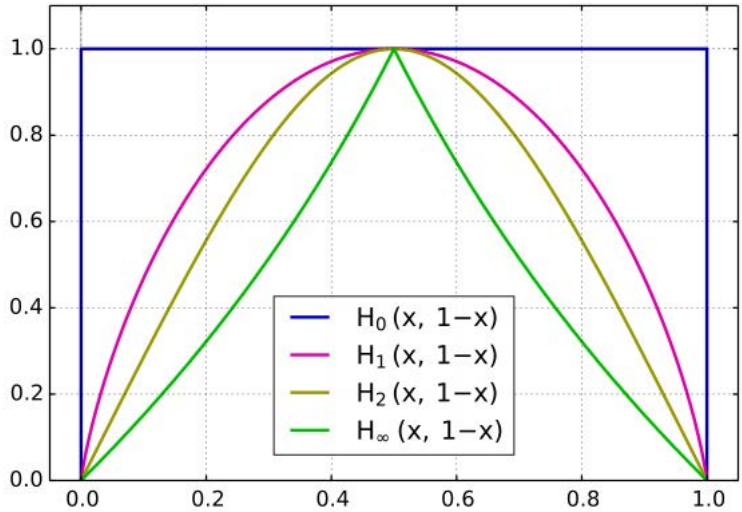


Figura B.1: *Entropías de Renyi para distintos valores de α de una distribución de probabilidad de dimensión dos. Fijada una distribución de probabilidad, las entropías de Renyi son decrecientes en α.*

decrecientes en función del parámetro α, es decir

$$H_{\alpha_1}(p) \leq H_{\alpha_2}(p) \Leftrightarrow \alpha_1 \geq \alpha_2 \tag{B.2}$$

En la Figura B.1 se representan varias entropías de Renyi para una distribución de probabilidad de dimensión 2.

Divergencias de Renyi

Dentro de la teoría de probabilidades, otro aspecto que es de gran interés es el de poder dotar al espacio de distribuciones con una distancia. Esto permite, entre otras cosas, definir vecindades y probar resultados de convergencia. Una noción más débil a la de distancia es la de divergencia. Las divergencias cuantifican que tan diferente es una distribución de probabilidad p respecto de otra q, pero a diferencia de una distancia no suelen ser simétricas o cumplir la desigualdad triangular.

Dentro de la estadística, la teoría de probabilidades y la inteligencia artificial, la divergencia de Kullback–Leibler (también llamada entropía mutua) es la más utilizada de todas. Dadas dos distribuciones de probabilidad finitas $p = (p_1, p_2, \ldots, p_d)$, $q = (q_1, q_2, \ldots, q_d)$, donde p_i y q_i representan las probabilidades del mismo evento i, la divergencia de Kullback-Leibler de p

respecto de q se define como

$$D_{KL}(p||q) = \sum_{j=1}^{d} p_j \log \frac{p_j}{q_j}$$

Así como las entropías de Renyi surgen como una generalización de la entropía de Shannon, las divergencias de Renyi $D_\alpha(\cdot||\cdot)$ son una generalización de la divergencia de Kullback-Leibler.

Definición B.0.2 (*Divergencias de Renyi*)

Sean $p = (p_1, p_2, \ldots, p_d)$ y $q = (q_1, q_2, \ldots, p_d)$ dos vectores de probabilidad. Dado $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0, 1\}$ se define la divergencia de Renyi de p respecto de q como

$$D_\alpha(p||q) = \frac{\operatorname{sgn}(\alpha)}{1-\alpha} \log \sum_{i=1}^{d} p_i^\alpha q_i^{1-\alpha}$$

Para $\alpha \in \{-\infty, 0, 1, \infty\}$ las divergencias de Renyi se definen por continuidad como

$$D_0(p||q) = -\log \sum_{i:p_i \neq 0} q_i \qquad D_1(p||q) = D_{KL}(p||q)$$

$$D_\infty(p||q) = \log \operatorname*{máx}_i \left\{ \frac{p_i}{q_i} \right\} \qquad D_{-\infty}(p||q) = D_\infty(q||p)$$

Las entropías y las divergencias de Renyi están relacionadas por medio de siguiente igualdad

$$D_\alpha(p||\eta) = \operatorname{sgn}(\alpha) \log n - H_\alpha(p) \tag{B.3}$$

donde $\eta = (1/d, 1/d, \ldots, 1/d)$. De las ecuaciones B.2 y B.3 se obtiene que, fijadas las distribuciones p y q, las divergencias de Renyi son monótonas crecientes, es decir:

$$D_{\alpha_1}(p||q) \leq D_{\alpha_2}(p||q) \Leftrightarrow \alpha_1 \leq \alpha_2$$

Caso cuántico

Las definiciones de la entropía y divergencia de Renyi pueden ser extendidas en el marco de la mecánica cuántica. La información de todo sistema físico puede ser representada mediante la matriz densidad ρ, la cual es un

operador hermítico definido sobre un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$. De esta manera, siempre van a existir una base $|\Psi_i\rangle$ de $\mathcal{H}$ y una distribución de probabilidad p de modo tal que

$$\rho = \sum_j p_j \, |\Psi_j\rangle\langle\Psi_j| \qquad \sum_j p_j = 1$$

Asociamos a la matriz densidad ρ con el vector de probabilidades definido por los p_j. Luego, la entropía de Renyi de un estado ρ se define como la entropía de Renyi de la distribución de probabilidad p. Las expresiones para la entropías de Renyi pueden ser reescritas directamente como función de ρ:

$$H_\alpha(\rho) = \frac{\operatorname{sgn}(\alpha)}{1-\alpha} \log \operatorname{tr} \rho^\alpha$$

$$\begin{aligned} H_0(\rho) &= \log \operatorname{rank} \rho & H_{-\infty}(\rho) &= \log \operatorname{mín}\{\langle\Psi| \, \rho \, |\Psi\rangle : \Psi \in \mathcal{H}\} \\ H_1(\rho) &= -\operatorname{tr} \rho \log \rho & H_\infty(\rho) &= -\log \operatorname{máx}\{\langle\Psi| \, \rho \, |\Psi\rangle : \Psi \in \mathcal{H}\} \end{aligned}$$

La extension de la definición de las divergencias de Renyi para el caso cuántico es igual de simple. Sean ρ y σ estados del mismo sistema físico. Supongamos que los estados conmutan y en tal caso existe una base común de autovectores $|\Psi_i\rangle$ tal que

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i p_i \, |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| & \sum_i p_i &= 1 \\ \sigma &= \sum_i q_i \, |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| & \sum_i q_i &= 1 \end{aligned}$$

En tal caso, definimos la divergencia de Renyi de ρ respecto de σ como

$$D_\alpha(\rho||\sigma) := D_\alpha(p||q)$$

lo cual es equivalente a

$$D_\alpha(\rho||\sigma) = \frac{\operatorname{sgn}(\alpha)}{1-\alpha} \log \operatorname{tr} \rho^\alpha \sigma^{1-\alpha}$$

$$D_0(\rho||\sigma) = -\log \operatorname{tr} \Pi_\rho \sigma \qquad D_1(\rho||\sigma) = \operatorname{tr}(\rho \log \rho - \rho \log \sigma)$$

donde Π_ρ representa el proyector sobre el soporte del operador ρ. Sin embargo, el caso general donde $[\rho, \sigma] \neq 0$ las divergencias de Renyi pueden ser

definidas de varias maneras. Por ejemplo, otra propuesta es [6]

$$\hat{D}_\alpha(\rho||\sigma) = \frac{\mathrm{sgn}(\alpha)}{1-\alpha} \log \mathrm{tr} \left(\sigma^{\frac{1-\alpha}{2\alpha}} \rho \sigma^{\frac{1-\alpha}{2\alpha}} \right)^\alpha$$

Apéndice C

Demostraciones de termodinámica cuántica

Condiciones necesarias y suficientes para las transformaciones térmicas

En esta sección mostraremos la demostración rigurosa del Teorema 2.2.1 presentado en el capítulo 2. Sin embargo, antes es necesario introducir un teorema auxiliar sobre el comportamiento asintótico del estado del sistema y del reservorio:

Teorema C.0.1

Sea ρ_S el estado del sistema S y τ_R el estado del reservorio. Sea el conjunto de energías dado por

$$\mathcal{E} = \{E : E - E_S \in \mathcal{E}_R\}$$

donde $\mathcal{E}_R$ cumple las hipótesis (i), (ii), (iii). Entonces $\forall E \in \mathcal{E}$ se tiene que

$$\| \frac{1}{p_E} P_E(\rho_S \otimes \tau_R) P_E - \bigoplus_{E_S} P_{E_S} \rho_S P_{E_S} \otimes \eta^R_{E-E_S} \|_1 \leq 2\delta$$

y

$$\sum_{E \in \mathcal{E}} p_E \geq 1 - 2\delta$$

donde P_E es el proyector sobre el subespacio de energía E, $p_E = \mathrm{tr}(P_E \rho_R \otimes \tau_S)$ y la suma $\oplus_{E_S}$ se hace sobre todos los valores de energia posibles E_S del sistema [5].

Luego, se tiene:

Teorema C.0.2 (*Transformación Térmica*)

Sean ρ_S y σ_S dos estados diagonales a bloques en la base del Hamiltoniano H_S, es decir $[\rho_S, H_S] = [\sigma_S, H] = 0$. Entonces la transformación

$$(\rho_S, H_S) \xrightarrow{\mathcal{E}} (\sigma_S, H_S)$$

es posible mediante operadores termales si y sólo si para toda energía E suficientemente grande vale

$$\bigoplus_{E_S} P_{E_S}\sigma_S P_{E_S} \otimes \eta^R_{E-E_S} \quad \prec \quad \bigoplus_{E_S} P_{E_S}\rho_S P_{E_S} \otimes \eta^R_{E-E_S} \tag{C.1}$$

donde P_{E_S} es el proyector sobre el subespacio de energía E_S y la suma se realiza sobre todos los niveles de energía E_S del Hamiltoniano H_S. [5]

Demostración : En primer lugar, usando el Teorema C.0.1 tenemos que sobre cada uno de los subespacios con energía E fija podemos escribir

$$\frac{1}{p_E} P_E(\rho_S \otimes \rho_R)P_E \quad \approx \quad \bigoplus_{E_S} P_{E_S}\rho_S P_{E_S} \otimes \eta_{E-E_S} \tag{C.2}$$

donde sólo interviene la parte diagonal del estado ρ. Por otro lado, las operaciones que podemos realizar sobre el conjunto del sistema S y el reservorio R son operaciones unitarias en cada subespacio de energia E constante, de forma tal que es estado evoluciona de la siguiente forma

$$\rho_S \mapsto \mathrm{tr}_R \left(U_E \left(P_E \rho_S \otimes \rho_R P_E \right) U_E^\dagger \right)$$

Sin embargo se puede probar que si ρ_R cumple con las hipótesis de un baño térmico, entonces para E suficientemente grande esta transformación se puede aproximar por la acción de una mezcla de operaciones unitarias sobre el estado de la ecuación (C.2). Para ver esto lo que hacemos es dividir el reservorio R en dos partes R_1 y R_2. Para cada E_S, escribimos

$$\eta_{E-E_S} = \frac{\mathbb{I}_K^{R_1}}{K} \otimes \frac{\mathbb{I}_{K'_{E_S}}^{R_2}}{K'_{E_S}}$$

donde $K'_{E_S} = g(E - E_S)/K$ y tanto K como K'_{E_S} son exponencialmente grandes respecto de la energía E. De esta manera, dado que K no depende

de la energía del sistema E_S podemos reescribir

$$\frac{1}{p_E} P_E(\rho_S \otimes \rho_R) P_E \quad \approx \quad \frac{\mathbb{I}_K^{R_1}}{K} \otimes \left(\bigoplus_{E_S} P_{E_S} \rho_S P_{E_S} \otimes \frac{\mathbb{I}_{K'_{E_S}}^{R_2}}{K'_{E_S}} \right) \tag{C.3}$$

$$\frac{1}{p_E} P_E(\rho_S \otimes \sigma_R) P_E \quad \approx \quad \frac{\mathbb{I}_K^{R_1}}{K} \otimes \left(\bigoplus_{E_S} P_{E_S} \sigma_S P_{E_S} \otimes \frac{\mathbb{I}_{K'_{E_S}}^{R_2}}{K'_{E_S}} \right) \tag{C.4}$$

Luego cualquier mezcla de unitarias que se aplique sobre SR_2 se puede pensar como una única operación unitaria operando sobre SR_1R_2.

Dado que las transformaciones permitidas son mezclas de unitarias operando sobre SR_2 usando el Teorema de Uhlmann (Apéndice A, Teorema A.0.1) tenemos que la transformación es posible si y sólo si se cumple la siguiente relación de mayorización:

$$\bigoplus_{E_S} P_{E_S} \sigma_S P_{E_S} \otimes \frac{\mathbb{I}_{K'_{E_S}}^{R_2}}{K'_{E_S}} \quad \prec \quad \bigoplus_{E_S} P_{E_S} \rho_S P_{E_S} \otimes \frac{\mathbb{I}_{K'_{E_S}}^{R_2}}{K'_{E_S}}$$

Dado que K esta fijo tanto para el estado inicial como para el estado final, esta relación de mayorización sobre SR_2 se da si y sólo si se da la relación de mayorización sobre SR de la ecuación (C.1), como queríamos probar.

Una demostración alternativa se puede dar usando la familia de *noisy operators* y a partir del siguiente resultado [19]

Proposición C.0.1

Dados dos estados ρ y σ de d niveles, la transformación $\rho \mapsto \sigma$ es posible por medio de Noisy Operators si y sólo si $\sigma \prec \rho$.

La clase de *noisy operators* está dada por cualquier operación que consista en agregar una ancila que sea un estado máximamente mixto, es decir proporcional a la identidad, realizar cualquier operación unitaria sobre el sistema y la ancila y luego remover la ancila. Con este resultado y partiendo de la ecuación C.4, es posible llegar a la misma conclusión. ■

Termomayorización

En esta sección veremos como se deduce la equivalencia entre el Teorema 2.2.1 y la relación de termomayorización. Sean $p(E_S, g)$ y $q(E_S, \tilde{g})$ los autovalores de los estados ρ y σ, respectivamente, donde E_S son los niveles de energía del Hamiltoniano H_S y g y $\tilde{g}$ indexan la degeneración. Para saber si se cumple la relación de mayorización dada por la ecuación

(2.4), primero se deben conocer los autovalores de los estados de la forma $\bigoplus_{E_S} P_{E_S}\rho_S P_{E_S} \otimes \eta^R_{E-E_S}$ para todo E suficientemente grande. Sin embargo, por la ecuación (1.7) esto es equivalente encontrar los autovalores del estado

$$\frac{1}{p_E} P_E(\rho_S \otimes \tau_R) P_E$$

$$\approx \frac{1}{p_E} \sum_{E_S,g} p(E_S, g)\, |E_S, g\rangle\langle E_S, g| \otimes \frac{e^{-\beta(E-E_S)}}{Z_R}\, |E - E_S\rangle\langle E - E_S|$$

donde Z_R es la función de partición del reservorio térmico. Por lo tanto, los autovalores son de la forma

$$\frac{e^{-\beta E}}{p_E Z_R} e^{\beta E_S} p(E_S, g) \tag{C.5}$$

con degeneración $g_R(E - E_S) \approx g_R(E)e^{-\beta E_S}$. Es posible obtener el valor de p_E a partir de la condición de traza igual a 1:

$$\sum_{E_S} g_S(E_S) g_R(E - E_S) \frac{e^{-\beta E}}{p_E Z_R} p(E_S, g) = \frac{g_R(E)e^{-\beta E}}{p_E Z_R} \sum_{E_S} g_S(E_S) p(E_S, g)$$
$$= \frac{g_R(E)e^{-\beta E}}{p_E Z_R} \qquad \Rightarrow \qquad p_E = \frac{g_R(E)e^{-\beta E}}{Z_R}$$

Por lo tanto, los autovalores del estado $\bigoplus_{E_S} P_{E_S}\rho_S P_{E_S} \otimes \eta^R_{E-E_S}$ son

$$\frac{p(E_S, g)}{g_R(E)} e^{\beta E_S} \tag{C.6}$$

con degeneración igual a $g_R(E)e^{-\beta E_S}$. La ventaja de haber hecho esto último es que la ecuación (C.6) depende sólo de las energías y autovalores del sistema S, y la energía total E aparece simplemente por medio de una constante común a todos los autovalores. Los términos térmicos $e^{\beta E_S}$ definen un nuevo orden entre los autovalores del sistema S dado por

$$\frac{p_1 e^{\beta E_1}}{d_E} \geq \frac{p_2 e^{\beta E_2}}{d_E} \geq \cdots \tag{C.7}$$

donde $d_E = g_R(E)$. Sobre estos valores es que se aplica la condición de mayorización. Considerando que $d_E \gg 1$, los autovalores van a ser muy chicos pero su degeneración va a ser grande también. Por lo tanto, las sumas parciales de la ecuación (2.2) pueden ser representadas mediante curvas lineales a tramos como la integral de una función constante a trozos (Figura 2.1). El resultado de esto son las curvas de termomayorización, que resul-

tan de unir los puntos $(0,0)$, $(e^{-\beta E_1}, p_1)$, $(e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}, p_1 + p_2), \ldots, (Z_S, 1)$ por medio de rectas. A través de esta construcción, la relación de mayorización del Teorema 2.2.1 va a cumplirse siempre y cuando la curva de termomayorización del estado ρ se encuentre por encima de la curva termomayorización del estado σ.

Apéndice D

Demostración $N\langle E\rangle \in \mathcal{E}$

Lo único que quedó por demostrar en el Capítulo 5 es que $N\langle E\rangle \in \mathcal{E}$, es decir, que la energía media del sistema siempre pertenece al soporte de energías que caracterizan los estados $\mathcal{R}^*$-críticos. El siguiente lema establece bajo que hipótesis esto es cierto.

Lema D.0.1

Sea $\rho^* = \sum_{i=1}^{D} p_i \left|E_i\right\rangle\!\left\langle E_i\right|$ un estado $\mathcal{R}^*$-crítico con $p_1, p_2, \ldots, p_D$ números racionales y sea $N_0 \in \mathbb{N}$ tal que $p_1 N_0, p_2 N_0, \ldots, p_D N_0 \in \mathbb{N}$. Luego sea $\rho^{corr}(N_0)$ el estado correlacionado que minimiza el trabajo de formación $\mathrm{W}_\infty^{corr}(\rho^*, N_0)$ de un sistema formado por N_0 copias correlacionadas. Luego se tiene que la energía media del sistema dada por $N\langle E\rangle$ pertenece al soporte $\mathcal{E}_{N_0}$ del estado $\mathcal{R}^*$-crítico ρ^{corr}.

En general, dado que los números racionales son densos en los reales, estas hipótesis no representan un gran problema para la teoría. Más aún, es importante destacar que si bien tanto los estados $\mathcal{R}^*$-críticos como los estados ρ con autovalores racionales son ambos densos en el conjunto de estados, su intersección puede ser vacía y por lo tanto el lema no aplica para ningún estado posible del sistema. Sin embargo, esto es fácil de salvar comparando el trabajo de formación de cualquier estado con el trabajo de formación de estados $\mathcal{R}^*$-críticos y estados con autovalores racionales y no representa ningún problema salvo un mayor cuidado en las demostraciones.

Demostración : Para demostrar el lema, supongamos que $N\langle E\rangle \notin \mathcal{E}_{N_0}$ y lleguemos a un absurdo. Consideremos el estado σ dado por

$$\sigma = \frac{1}{C} \sum_{\text{combinaciones}} \underbrace{\left|E_1\right\rangle\!\left\langle E_1\right| \otimes \ldots \otimes \left|E_1\right\rangle\!\left\langle E_1\right|}_{N_0 p_1 \text{veces}} \otimes \ldots \otimes \underbrace{\left|E_D\right\rangle\!\left\langle E_D\right| \otimes \ldots \otimes \left|E_D\right\rangle\!\left\langle E_D\right|}_{N_0 p_D \text{veces}}$$

donde la suma se realiza sobre todas las combinaciones posibles distintas y C es la constante de normalización dada por

$$C = \frac{N_0!}{(N_0 p_1)!(N_0 p_2)! \ldots (N_0 p_D)!}$$

Luego, es inmediato observar que σ es un autoestado del Hamiltoniano del sistema con autovalor $N_0 p_1 E_1 + \ldots + N_0 p_D E_D = N\langle E\rangle$ y que cumple que el estado local es idénticamente igual a ρ^*, es decir

$$\mathrm{tr}_{-j}(\sigma) = \rho^* = \sum_{i=1}^{D} p_i \left|E_i\right\rangle\!\left\langle E_i\right| \quad \forall j = 1, 2, \ldots, N_0$$

Por lo tanto, dado $\epsilon > 0$ podemos construir un nuevo estado correlacionado del sistema $\tilde{\rho}^{\text{corr}}$ que cumple la condición de ser localmente igual a ρ^* dado por

$$\tilde{\rho}^{\text{corr}} = (1-\epsilon)\rho^{\text{corr}} + \epsilon\sigma$$

Veamos que el trabajo de formación del estado $\tilde{\rho}^{\text{corr}}$ es estrictamente menor que el trabajo de formación de ρ^{corr}. Dado que el estado σ tiene soporte sólo sobre el subespacio de energía $N\langle E\rangle$, el cual no está incluido en el soporte del estado ρ^{corr}, se tiene que el trabajo de formación se calcula a partir del máximo de los cocientes entre los autovalores de energía pe

$$W_\infty(\tilde{\rho}^{\text{corr}}) = k_B T \log \text{máx}\left\{(1-\epsilon)\frac{\lambda_E^{\text{corr}} Z_S^N}{e^{-\beta E}}, \frac{\epsilon Z_S^N}{C e^{-\beta N\langle E\rangle}}\right\}$$

donde λ_E^{corr} son los autovalores del estado ρ^{corr}. Luego, existe un $\epsilon > 0$ suficientemente chico tal que el máximo se realiza sobre el primer elemento y por lo tanto

$$\begin{aligned} W_\infty(\tilde{\rho}^{\text{corr}}) &= k_B T \log\left[(1-\epsilon)\frac{\lambda_E^{\text{corr}} Z_S^N}{e^{-\beta E}}\right] \\ &= W_\infty(\rho^{\text{corr}}) + k_B T \log(1-\epsilon) < W_\infty(\rho^{\text{corr}}) \end{aligned}$$

lo cual es un absurdo porque partimos de que ρ^{corr} era el estado que minimizaba el trabajo de formación correlacionado y terminamos encontrando otro estado $\tilde{\rho}^{\text{corr}}$ con menor trabajo de formación. El absurdo provino de suponer que $N\langle E\rangle$ no pertenecía al soporte de energías del estado con mínimo trabajo de formación. ■

Bibliografía

[1] J. Goold, M. Huber, A. Riera, L. del Rio, and P. Skrzypczyk, "The role of quantum information in thermodynamics—a topical review," *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 49, no. 14, p. 143001, 2016.

[2] D. Janzing, P. Wocjan, R. Zeier, R. Geiss, and T. Beth, "Thermodynamic cost of reliability and low temperatures: Tightening landauer's principle and the second law," *International Journal of Theoretical Physics*, vol. 39, pp. 2717–2753, Dec 2000.

[3] B. Coecke, T. Fritz, and R. W. Spekkens, "A mathematical theory of resources," *Information and Computation*, vol. 250, pp. 59–86, 2016.

[4] F. Brandao, M. Horodecki, J. Oppenheim, J. Renes, and R. Spekkens, "The resource theory of quantum states out of thermal equilibrium. 2011," *Physical Review Letters*, vol. 111, 12 2013.

[5] M. Horodecki and J. Oppenheim, "Fundamental limitations for quantum and nano thermodynamics," *Nature communications*, vol. 4, no. May, p. 2059, 2013.

[6] F. Brandao, M. Horodecki, N. Ng, J. Oppenheim, and S. Wehner, "The second laws of quantum thermodynamics," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 112, no. 11, pp. 3275–3279, 2015.

[7] W. Pusz and S. L. Woronowicz, "Passive states and kms states for general quantum systems," *Communications in Mathematical Physics*, vol. 58, pp. 273–290, Oct 1978.

[8] E. T. Jaynes, "Information theory and statistical mechanics," *Phys. Rev.*, vol. 106, pp. 620–630, May 1957.

[9] M. J. Donald, "Free energy and the relative entropy," *Journal of statistical physics*, vol. 49, no. 1-2, pp. 81–87, 1987.

[10] C. Sparaciari, J. Oppenheim, and T. Fritz, "Resource theory for work and heat," *Physical Review A*, vol. 96, no. 5, p. 052112, 2017.

[11] R. Pathria and P. Beale, *Statistical Mechanics*. Elsevier Science, 1996.

[12] P. Skrzypczyk, A. J. Short, and S. Popescu, "Work extraction and thermodynamics for individual quantum systems.," *Nature communications*, vol. 4, no. May, p. 4185, 2014.

[13] M. Lostaglio, *The resource theory of quantum thermodynamics*. PhD thesis, Imperial College London, 2016.

[14] M. Lostaglio, "Elementary thermal operations and the universality of thermodynamic constraints," *arXiv preprint arXiv:1607.00394*, 2017.

[15] P. Faist, J. Oppenheim, and R. Renner, "Gibbs-preserving maps outperform thermal operations in the quantum regime," *New Journal of Physics*, vol. 17, 2015.

[16] G. Gour, M. P. Müller, V. Narasimhachar, R. W. Spekkens, and N. Y. Halpern, "The resource theory of informational nonequilibrium in thermodynamics," *Physics Reports*, vol. 583, pp. 1–58, 2015.

[17] M. A. Nielsen, "Conditions for a class of entanglement transformations," *Physical Review Letters*, vol. 83, no. 2, p. 436, 1999.

[18] L. del Rio, L. Kraemer, and R. Renner, "Resource theories of knowledge," *arXiv preprint arXiv:1511.08818*, 2015.

[19] M. Horodecki, P. Horodecki, and J. Oppenheim, "Reversible transformations from pure to mixed states and the unique measure of information," *Physical Review A*, vol. 67, no. 6, p. 062104, 2003.

[20] A. W. Marshall, I. Olkin, and B. C. Arnold, *Inequalities: theory of majorization and its applications*, vol. 143. Springer, 1979.

[21] R. Pereira and S. Plosker, "Dirichlet polynomials, majorization, and trumping," *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 46, no. 22, p. 225302, 2013.

[22] K. Korzekwa, M. Lostaglio, J. Oppenheim, and D. Jennings, "The extraction of work from quantum coherence," *New Journal of Physics*, vol. 18, no. 2, p. 023045, 2016.

[23] M. Lostaglio, D. Jennings, and T. Rudolph, "Description of quantum coherence in thermodynamic processes requires constraints beyond free energy," *Nature communications*, vol. 6, 2015.

[24] M. A. Nielsen, "An introduction to majorization and its applications to quantum mechanics," *Lecture Notes, Department of Physics, University of Queensland, Australia*, 2002.

[25] M. Lostaglio, M. P. Müller, and M. Pastena, "Stochastic independence as a resource in small-scale thermodynamics," *Physical review letters*, vol. 115, no. 15, p. 150402, 2015.

[26] W. A. Popescu S, Short A, "Entanglement and the foundations of statistical mechanics," *Nat Phys*, vol. 2, pp. 754 – 758, 2016.

[27] H.-K. Hwang, "Asymptotic estimates of elementary probability distributions," *Studies in Applied Mathematics*, vol. 99, no. 4, pp. 393–417, 1997.

[28] M. P. Woods, N. Ng, and S. Wehner, "The maximum efficiency of nano heat engines depends on more than temperature," *arXiv preprint arXiv:1506.02322*, pp. 1–58, 2015.

[29] N. H. Y. Ng, M. Woods, and S. Wehner, "Surpassing the Carnot Efficiency by extracting imperfect work," *New Journal of Physics*, pp. 1–20, 2017.

[30] M. Nielsen and I. Chuang, "Quantum computation and quantum information," *Science*, pp. 1–710, 2010.