

Semigrupos dinámicos y las ecuaciones de Bloch en sistemas abiertos finitos

Joseph C. Várilly

Escuela de Matemática, Universidad de Costa Rica, San José 11501, Costa Rica

Cienc. Tec. (CR) **5** (1981), 107–121

Resumen

En la Mecánica Estadística sin equilibrio, se suele derivar las ecuaciones de transporte de un sistema abierto del requisito que tal sistema forma parte de un gran sistema dinámico conservativo cerca del equilibrio. Las ecuaciones “fenomenológicas” de Bloch para espín $\frac{1}{2}$ ya han sido derivadas por esta vía: aquí analizamos el caso de espines mayores. Mostramos que los tiempos de relajación del sistema satisfacen la restricción $T_1 \geq T_2/P$ donde $P = 2$ para espín $\frac{1}{2}$, $P = 4$ para espín 1, y para espines mayores P depende de la temperatura.

Abstract

In non-equilibrium statistical mechanics, one often derives the transport equations for an open system from the requirement that such a system be part of a larger conservative dynamical system close to equilibrium. The “phenomenological” equations of Bloch for a $\frac{1}{2}$ -spin have already been derived by this method: here we analyze the case of higher spins. We show that the relaxation times of the system satisfy the restriction $T_1 \geq T_2/P$ where $P = 2$ for spin $\frac{1}{2}$, $P = 4$ for spin 1, and for higher spins P is temperature-dependent.

1. Introducción

En años recientes se ha desarrollado una teoría bastante extensa sobre evoluciones irreversibles en la mecánica estadística sin equilibrio. Por lo general, se parte del supuesto de que un sistema que evoluciona irreversiblemente es una *descripción parcial* de otro sistema más grande o complejo regido por leyes de movimiento *reversibles*. Este punto de vista comprende dos aspectos: un sistema macroscópico considerado como una descripción reducida del sistema microscópico subyacente, o bien un sistema abierto que interactúa con su ambiente. En ambos casos, se plantea el problema de caracterizar las posibles evoluciones irreversibles que son consistentes con el proceso de reducción de un sistema reversible.

En este trabajo investigamos este problema en el caso de un *sistema de N niveles*: específicamente, consideramos el comportamiento de un j -espín (con $2j + 1 = N$) cuya polarización longitudinal S_3 tiene N autovalores distintos. Para simplificar la discusión, haremos dos supuestos que se cumplen para la gran mayoría de los sistemas observados experimentalmente: primero, que la evolución del sistema reducido es *markoviano*, vale decir que se describe mediante ecuaciones

diferenciales de primer orden en el tiempo; segundo, que tanto el sistema reducido como el sistema reversible subyacente están a temperatura finita.

En la actualidad se considera que la formulación matemática más adecuada para describir un *sistema dinámico a temperatura finita* consiste de un triple $\{\mathfrak{N}, \gamma(\mathbb{R}^+), \phi\}$ donde $\mathfrak{N}$ es un álgebra de von Neumann (los observables globales del sistema) actuando sobre un espacio de Hilbert separable; ϕ es un *estado fiel normal* de $\mathfrak{N}$ (una forma lineal positiva sobre $\mathfrak{N}$ tal que $\phi(1) = 1$, $\phi(x) > 0$ si $x \neq 0$ es un elemento positivo de $\mathfrak{N}$, $\phi(\sup x_i) = \sup \phi(x_i)$ si x_i son elementos positivos de $\mathfrak{N}$); $\gamma(\mathbb{R}^+)$ es una colección de aplicaciones lineales de $\mathfrak{N}$ en $\mathfrak{N}$ tales que $\gamma_0 = \text{id}$ y $\phi \circ \gamma_t = \phi$, $\gamma_t(1) = 1$ para todo $t \geq 0$. Dado un número real $\beta \neq 0$, se sabe que existe un único grupo de automorfismos de $\mathfrak{N}$, $\{\sigma_t : t \in \mathbb{R}\}$ tal que se cumple la siguiente condición: si $A, B \in \mathfrak{N}$ son tales que la función $t \mapsto \sigma_t(A)$ se extiende a una función entera $z \mapsto \sigma_z(A)$, tenemos

$$\phi(\sigma_{t+i\beta}(A) B) = \phi(B \sigma_t(A)) \quad \text{para todo } t \in \mathbb{R}. \quad (1.1)$$

Se dice que el estado ϕ tiene *temperatura* β^{-1} con respecto a $\sigma(\mathbb{R})$.

Debemos notar que esta formulación comprende sistemas dinámicos clásicos definidos por transformaciones T_t que preservan una medida μ sobre un espacio X , al poner $\mathfrak{N} := L^\infty(X, \mu)$, $\phi(f) := \int f d\mu$, $\gamma_t(f) := f \circ T_t$; en este caso $\sigma_t = \text{id}$ para todo t real. Si $\mathfrak{N}$ no es conmutativa (como en el caso de un sistema cuántico) y si ϕ no es una traza, los automorfismos no son todos triviales: en la mecánica estadística, $\sigma(\mathbb{R})$ recibe el nombre de “evolución libre” pues representa la dinámica sin interacción de los componentes del sistema. Para comprender el uso de la palabra “temperatura”, consideramos el caso donde $\mathfrak{N}$ es de dimensión finita; entonces $\sigma_t(A) = \exp(itH) A \exp(-itH)$ donde $H = H^*$; es claro que $\phi(X) := \text{tr}(e^{\beta H} X) / \text{tr}(e^{\beta H})$ cumple (1.1) con respecto a $\sigma(\mathbb{R})$, pues

$$\begin{aligned} \phi(\sigma_{t+i\beta}(A) B) &= \phi(e^{itH-\beta H} A e^{-itH+\beta H} B) = \frac{\text{tr}(e^{itH} A e^{-itH+\beta H} B)}{\text{tr}(e^{\beta H})} \\ &= \frac{\text{tr}(e^{\beta H} B e^{itH} A e^{-itH})}{\text{tr}(e^{\beta H})} = \phi(B \sigma_t(A)) \quad \text{para } t \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Luego el “estado de Gibbs” a temperatura β^{-1} cumple (1.1); este fenómeno también ocurre en dimensión infinita, vea por ejemplo [1].

En la segunda sección, se usa esta formulación para investigar las posibles evoluciones sobre un sistema de N niveles. En la tercera sección, se plantea una relación general entre los tiempos de relajación longitudinal y transversal de un j -espín, y en las secciones 4 y 5 se analiza en detalle los casos de espín 1 y de espín $\frac{3}{2}$.

2. El generador de la evolución

De aquí en adelante, $\mathfrak{N}$ denotará el álgebra de matrices $N \times N$, donde $N = 2j + 1$. En $\mathfrak{N}$ se distinguen tres elementos S_1, S_2, S_3 que son autoadjuntos, satisfacen $[S_i, S_j] = S_k$ para (i, j, k) una permutación cíclica de $(1, 2, 3)$, y tienen autovalores $j, j-1, j-2, \dots, -j$. Podemos escoger una base para el espacio (de Hilbert) $\mathbb{C}^N$ tal que S_3 es diagonal con sus autovalores en orden decreciente. Poniendo $S_- := S_1 + iS_2$, $S_+ := S_1 - iS_2$, S_+ es una matriz con entradas no ceros que denotamos por $a_1, a_2, \dots, a_{N-1}$ sobre la subdiagonal superior.

Definimos la “evolución libre” $\sigma(\mathbb{R})$ por

$$\sigma_t(A) := U_t A U_t^* \quad \text{donde } U_t := e^{itS_3}.$$

Para β un número real, introducimos el estado “de Gibbs” ϕ mediante

$$\phi(A) := \text{tr}(RA) \quad \text{donde} \quad R := \frac{\exp(\beta S_3)}{\text{tr} \exp(\beta S_3)}.$$

La hipótesis de que el sistema es markoviano puede ser formulada como la condición de que la evolución $\gamma(\mathbb{R}^+)$ sea un *semigrupo*: $\gamma_{t+s} = \gamma_t \circ \gamma_s$ para $t, s \geq 0$. En este caso, se puede escribir $\gamma_t = \exp(tL)$ para todo $t \geq 0$, donde L es una aplicación lineal de $\mathfrak{N}$ en $\mathfrak{N}$, llamado el *generador* del semigrupo $\gamma(\mathbb{R}^+)$. Vemos que $\gamma(\mathbb{R}^+)$ es la restricción a $\mathbb{R}^+$ de un grupo de automorfismos de $\mathfrak{N}$ si y solo si L tiene la forma $L(X) = i[H, X]$ para una matriz autoadjunto H .

Para determinar la forma de L , utilicemos la hipótesis enunciada arriba: que el sistema $\{\mathfrak{N}, \gamma(\mathbb{R}^+), \phi\}$ es un subsistema de un sistema conservativo $\{\mathfrak{M}, \alpha(\mathbb{R}), \psi\}$ donde $\{\alpha_t : t \in \mathbb{R}\}$ es un grupo uniparamétrico de automorfismos del álgebra de von Neumann $\mathfrak{M}$ tal que $\psi \circ \alpha_t = \psi$ para todo $t \in \mathbb{R}$; aquí $\mathfrak{N}$ es una subálgebra de $\mathfrak{M}$, ϕ es la restricción de ψ a $\mathfrak{N}$, y hay una proyección única de norma uno $\mathcal{E} : \mathfrak{M} \rightarrow \mathfrak{N}$ tal que $\phi \circ \mathcal{E} = \psi$ y $\mathcal{E} \circ \alpha_t = \gamma_t$ para todo $t \geq 0$. Bajo esta hipótesis, se sabe [3, 4, 7] que el generador L del semigrupo $\mathcal{E} \circ \alpha_t$ tiene la forma:

$$L(A) = i[H, A] + \sum_{r,s} d_{rs} F_s^* A F_r - \frac{1}{2}(F_s^* F_r A + A F_s^* F_r), \quad (2.1)$$

donde $\{F_r : r = 1, 2, \dots, N^2 - 1\}$ es un sistema de matrices $N \times N$ tales que $\text{tr} F_r = 0$, $\text{tr}(F_s^* F_r) = 0$ para todo $r \neq s$; $H = H^*$ con $\text{tr} H = 0$; $D = [d_{rs}]$ es una matriz *positiva* $(N^2 - 1) \times (N^2 - 1)$; y además:

$$L_*(R) := -i[H, R] + \sum_{r,s} d_{rs} \{[F_r, R F_s^*] + [F_r R, F_s^*]\} = 0 \quad (2.2)$$

como consecuencia de la invarianza de ϕ bajo $\gamma_t = e^{tL}$.

El grupo de automorfismos $\sigma(\mathbb{R})$ de $\mathfrak{N}$ se puede extender a $\mathfrak{M}$ tal que su extensión preserva ψ y en consecuencia [6] conmuta con $\alpha(\mathbb{R})$; al proyectar otra vez hasta $\mathfrak{N}$, $\sigma(\mathbb{R})$ conmuta con $\gamma(\mathbb{R}^+)$: para los detalles véase [2]. Esto implica que H es invariante bajo $\sigma(\mathbb{R})$ y por lo tanto es diagonal, luego tenemos $[H, R] = 0$.

Podemos tomar los F_r como las unidades matriciales E_{ij} para $i \neq j$ (hemos fijado la base de $\mathbb{C}^N$ para que S_3 sea diagonal), junto con las matrices diagonales $E_k = \text{diag}(0, \dots, 0, 1, -1, 0, \dots, 0)$ con el 1 en el k -ésimo lugar, para $k = 1, 2, \dots, N - 1$. Entonces $\sigma_t(E_{ij}) = e^{(j-i)t} E_{ij}$, $\sigma_t(E_k) = E_k$; la conmutatividad de L con $\sigma(\mathbb{R})$ implica que $d_{rs} = 0$ excepto en los siguientes casos:

(I) $F_r = E_{i,i+k}$, $F_s = E_{j,j+k}$ con $k \neq 0$; escribimos c_{ij}^k en lugar de d_{rs} ;

(II) $F_r = E_k$, $F_s = E_m$: escribimos c_{km}^0 en lugar de d_{rs} .

Luego la matriz D se descompone en bloques C^k (para $-N + 1 \leq k \leq N - 1$), con cada bloque una matriz positiva $q \times q$ con $q = N - |k|$. Una aplicación lineal $L : \mathfrak{N} \rightarrow \mathfrak{N}$ de la forma (2.1) que satisface todas estas condiciones se llama *estándar* con respecto a $\sigma(\mathbb{R})$.

3. Tiempos de relajación

Si un j -espín relaja irreversiblemente a equilibrio bajo la acción de un campo magnético externo, se observa que la componente longitudinal de la polarización S_3 tiene un “tiempo de relajación” T_1 ,

y que las dos componentes transversales S_1, S_2 relajan en un tiempo T_2 . En experimentos suele ser T_1 más grande de T_2 por varias órdenes de magnitud; sin embargo se conoce un caso “isotrópico” $T_1 = T_2$. En el caso de un $\frac{1}{2}$ -espín, se sabe que si el generador L es estándar con respecto a la evolución libre $\sigma(\mathbb{R})$, se tiene $T_1 \geq \frac{1}{2}T_2$, con igualdad si y solo si el sistema conservativo subyacente es casi-libre [2]. Esta desigualdad es la reflexión “experimental” de la positividad de una evolución de tipo $\mathcal{E} \circ \alpha_t$, y hasta donde sabemos se cumple experimentalmente. Ahora investigaremos cuál es el caso para otros espines para medir la influencia de la hipótesis de “dilatación”.

Si escribimos $S_i(t) := \gamma_t(S_i)$ para $i = 1, 2, 3$, la evolución del espín obedece la siguiente ecuación de Bloch:

$$\begin{aligned}(d/dt) S_1(t) &= L(S_1(t)) = -\frac{1}{T_2}(S_1(t) + x_1(t)), \\(d/dt) S_2(t) &= L(S_1(t)) = -\frac{1}{T_2}(S_2(t) + x_2(t)), \\(d/dt) S_3(t) &= L(S_1(t)) = -\frac{1}{T_1}(S_3(t) + x_3(t)),\end{aligned}$$

donde $\text{tr}[S_i(t) x_i(t)] = 0$ para $i = 1, 2, 3$. La igualdad de los coeficientes T_2^{-1} en las ecuaciones para $S_1(t), S_2(t)$ es consecuencia de la conmutatividad de L con $\sigma(\mathbb{R})$. Se obtienen las siguientes fórmulas para T_1 y T_2 :

$$T_2^{-1} = -\frac{\text{Re tr}(S_- L(S_+))}{\text{tr}(S_- S_+)}, \quad T_1^{-1} = -\frac{\text{tr}(S_3 L(S_3))}{\text{tr}(S_3^2)}. \quad (3.1)$$

De la forma de (2.1), podemos ver que $L(S_3)$ no contiene coeficientes c_{km}^0 pues S_3 es diagonal; luego T_1 es una función de los c_{ij}^k con $k \neq 0$ solamente. Por otra parte, se puede descomponer L como $L = L_0 + L'$, donde L' es la aplicación dada por (2.1) con $H = 0, C^0 = 0$, y L_0 es dada por (2.1) con $C^k = 0$ para todo $k \neq 0$. Por la forma de L , se obtiene $\text{Re tr}(S_- L(S_+)) \leq 0$ y la misma desigualdad vale con L_0 o L' en lugar de L . Por lo tanto:

$$T_2^{-1} \text{tr}(S_- S_+) = -\text{Re tr}(S_- L'(S_+)) - \text{Re tr}(S_- L_0(S_+)) \geq -\text{Re tr}(S_- L'(S_+)).$$

Esto demuestra que, para comprobar la validez de una desigualdad $T_1 \geq \kappa T_2$ para todo L estándar, podemos suponer que $H = 0$ y $C^0 = 0$; en adelante supondremos que éste es el caso.

Notamos que

$$\text{tr}(S_- S_+) = N(N^2 - 1)/6, \quad \text{tr}(S_3^2) = N(N^2 - 1)/12 = \frac{1}{2} \text{tr}(S_- S_+). \quad (3.2)$$

De (2.1) se obtiene las siguientes fórmulas:

$$\begin{aligned}\text{tr}(S_3 L(S_3)) &= \sum_{i,k} c_{ii}^k, \\ \text{Re tr}(S_- L'(S_+)) &= \sum_{i,k} a_i a_{i+k} c_{i,i+1}^k - \frac{1}{2}(a_{i+k-1}^2 + a_{i+k}^2).\end{aligned} \quad (3.3)$$

La positividad de la matriz C^k implica que $|c_{i,i+1}^k|^{1/2} \leq c_{ii}^k c_{i+1,i+1}^k$ y luego

$$\text{Re tr}(S_- L(S_+)) \leq \sum_{i,k} a_i a_{i+k} (c_{ii}^k c_{i+1,i+1}^k)^{1/2} - \frac{1}{2}(a_{i+k-1}^2 + a_{i+k}^2) c_{ii}^k. \quad (3.4)$$

(Para mayor comodidad, escribimos x_{ik} en lugar de c_{ii}^k). Combinando (3.2), (3.3) y (3.4), vemos que $T_1 \geq \kappa T_2$ vale para todo L estándar si y solo si

$$-\kappa^{-1} \operatorname{Re} \operatorname{tr}(S_- L(S_+)) \geq -2 \operatorname{tr}(S_3^2),$$

si y solo si

$$\sum_{i,k} \frac{1}{2} (a_{i+k-1}^2 + a_{i+k}^2) x_{ik} \geq -2\kappa \sum_{i,k} k \left(\frac{1}{2}(N+1) - i - k \right) x_{ik} \quad (3.5)$$

para todos los números $x_{ik} \geq 0$ tales que (2.2) se cumpla.

Se puede notar que (2.2) se expresa explícitamente en la forma:

$$\sum_{k \neq 0} e^{-\beta k} x_{ik} - x_{i+k,k} = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, N \quad (3.6)$$

(aunque este sistema sólo contiene $N - 1$ ecuaciones independientes). Luego, es posible que el máximo valor de κ , que satisface (3.5) para todo $x_{ik} \geq 0$ que cumplen (3.6), depende de la temperatura β^{-1} del sistema.

Es interesante que, en el caso de espín $\frac{1}{2}$, se obtiene que este máximo κ es $\frac{1}{2}$, *independientemente de la temperatura de espín*.

En efecto, si $j = \frac{1}{2}$, $N = 2$, tenemos $k = \pm 1$; $i = 1, 2$; $a_1 = 1$, y en consecuencia $x_{ik} = x_{11}$ o $x_{2,-1}$. La igualdad (3.6) se reduce a $e^{-\beta} x_{11} = x_{2,-1}$. La desigualdad (3.5) es:

$$\frac{1}{2}(x_{11} + x_{2,-1}) \geq -2\kappa \left(-\frac{1}{2}x_{11} - \frac{1}{2}x_{2,-1} \right) \quad \text{o bien} \quad \kappa \leq \frac{1}{2},$$

pues $x_{11} + x_{2,-1} \geq 0$. De ahí concluimos que *para cualquier evolución markoviana de un $\frac{1}{2}$ -espín, se tiene siempre la restricción $T_1 \geq T_2/2$ entre sus tiempos de relajación longitudinal y transversal*.

Para otras derivaciones de esta restricción, véase [2, 3]; en [2] se señala que la restricción es independiente de la forma particular del “baño de calor” (campo magnético, cadena de espines, etc.) en la cual el sistema abierto $\{\mathfrak{N}, \gamma(\mathbb{R}^+), \phi\}$ está metido.

4. El caso de espín 1

Si $j = 1$, $N = 3$, tenemos $k = \pm 1, \pm 2$; $i = 1, 2, 3$; $a_1 = a_2 = \sqrt{2}$; ahora x_{ik} puede ser x_{12} , x_{11} , x_{21} , $x_{2,-1}$, o $x_{3,-2}$; el lado izquierdo de (3.5) tiene entonces la forma

$$\begin{aligned} & x_{12} + 2x_{11} - 2\sqrt{x_{11}x_{21}} + x_{21} + x_{2,-1} - 2\sqrt{x_{2,-1}x_{3,-1}} + 2x_{3,-1} + x_{3,-2} \\ &= x_{12} + \frac{1}{2}x_{21} + \frac{1}{2}x_{2,-1} + x_{3,-2} + \frac{1}{2}(2\sqrt{x_{11}} - \sqrt{x_{21}})^2 + \frac{1}{2}(2\sqrt{x_{3,-1}} - \sqrt{x_{2,-1}})^2 \\ &\geq x_{12} + \frac{1}{2}x_{21} + \frac{1}{2}x_{2,-1} + x_{3,-2}, \end{aligned}$$

y el lado derecho de (3.5) es

$$-2\kappa(-2x_{12} - x_{21} - x_{2,-1} - 2x_{3,-2}),$$

del cual concluimos que $\kappa \leq \frac{1}{4}$.

En este caso se verá que (3.6) toma la forma

$$x_{11} - e^{\beta} x_{2,-1} = e^{-\beta} x_{21} - x_{3,-1} = e^{\beta} x_{3,-2} - e^{-\beta} x_{12} \quad (4.1)$$

y se ve que estas ecuaciones no imponen restricciones sobre los valores de x_{12} , x_{21} , $x_{2,-1}$, $x_{3,-2}$; luego $\kappa \leq \frac{1}{4}$ cualquiera que sea β ; por lo tanto *una evolución irreversible de un 1-espín satisface $T_1 \geq T_2/4$ independientemente de la temperatura de espín β^{-1}* .

En el caso $j = 1$, notamos que $C^{-2} = [c_{33}^{-2}]$, $C^2 = [c_{11}^2]$; que C^{-1} , C^0 y C^1 son matrices positivas 2×2 , y que $H = \text{diag}(h_1, -h_1 - h_3, h_3)$ con $h_1, h_3 \in \mathbb{R}$. Entonces las posibles evoluciones markovianas de un 1-espín se describen mediante 14 parámetros reales, tomando (4.1) en cuenta. Sería interesante saber si, dados tales parámetros obedeciendo (4.1) y positividad de los C^k , fuera posible reconstruir directamente una “dilatación” $\{\mathfrak{M}, \alpha(\mathbb{R}), \psi\}$ del sistema compatible con la evolución descrita. En el caso de un $\frac{1}{2}$ -espín, se sabe que tal reconstrucción siempre se puede efectuar [8].

5. El caso de espín $\frac{3}{2}$

El análisis de T_1 y T_2 para $j \geq \frac{3}{2}$ es cualitativamente diferente de los casos sencillos $j = \frac{1}{2}$ ó 1. En primer lugar, el lado derecho de (3.5) ya no es una forma cuadrática positiva en los $\sqrt{x_{ik}}$ y es necesario tomar (3.6) en cuenta para asegurar la no negatividad de T_1 . Segundo, las ecuaciones lineales que componen (3.6) son suficientemente complicadas como para afectar en forma no trivial la dependencia de κ de la temperatura.

Consideremos el siguiente ejemplo: sea $N = 4$, y defínase L mediante (2.1) por $H = 0$, $c_{11}^1 = r > 0$, con los demás $d_{rs} = 0$. Entonces $\gamma_t(X) = e^{tL}(X)$ define un semigrupo de aplicaciones sobre $\mathfrak{N}$ que conmutan con $\sigma(\mathbb{R})$. Pero $-\text{tr}(S_3 L(S_3)) = -2r < 0$. Sin embargo, no podemos concluir que $T_1 < 0$, un resultado físicamente absurdo, porque tal L es incompatible con (3.6). De hecho, la última ecuación es $e^{-\beta}r = 0$ para algún $\beta \in \mathbb{R}$, imposible si $r > 0$. (Como ésta no se satisface para ningún β , $\gamma(\mathbb{R}^+)$ es una evolución sobre $\mathfrak{N}$ que no tiene un estado fiel invariante).

Sea ahora p_0 el máximo valor de $2T_1/T_2$ para toda evolución generada por un semigrupo $\gamma(\mathbb{R}^+)$ que preserva el estado ϕ , donde $j = \frac{3}{2}$. De (3.5), vemos que para $0 \leq p \leq p_0$ vale:

$$\sum_{i,k} (a_{i+k-1}^2 + a_{i+k}^2 + 2pk(\frac{1}{2}(N+1) - i - k))x_{ik} - 2a_i a_{i+k} \sqrt{x_{ik}x_{i+1,k}} \geq 0.$$

Para $j = \frac{3}{2}$, $N = 4$; $k = \pm 1, \pm 2, \pm 3$; $i = 1, 2, 3, 4$; $a_1 = a_3 = \sqrt{3}$, $a_2 = 2$; al desarrollar la última desigualdad, recibimos:

$$\begin{aligned} F(x_{13}, \dots, x_{4,-3}) := & (3 - 9p)x_{13} + (7 - 2p)x_{12} - 2\sqrt{3x_{12}x_{22}} + (3 - 6p)x_{22} + (7 + p)x_{11} \\ & - 2\sqrt{3x_{11}x_{21}} + (7 - 2p)x_{21} - 2\sqrt{3x_{21}x_{31}} + (3 - 3p)x_{31} + (3 - 3p)x_{2,-1} \\ & - 2\sqrt{3x_{2,-1}x_{3,-1}} + (7 - p)x_{3,-1} - 2\sqrt{3x_{3,-1}x_{4,-1}} + (7 + p)x_{4,-1} \\ & + (3 - 6p)x_{3,-2} - 2\sqrt{3x_{3,-2}x_{4,-2}} + (7 - 2p)x_{4,-2} + (3 - 9p)x_{4,-3} \geq 0, \end{aligned} \quad (5.1)$$

sujeto a las restricciones derivadas de (3.6):

$$\sum_{i,k} b_{ik}^{(r)} x_{ik} = 0 \quad \text{para } r = 1, 2, 3 \quad (\text{escribimos } Bx = 0), \quad (5.2)$$

donde las $b^{(r)}$ son las filas de la siguiente matriz:

$$B := \begin{pmatrix} e^{-3\beta} & e^{-2\beta} & 0 & e^{-\beta} & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & e^{-2\beta} & -1 & e^{-\beta} & 0 & e^{\beta} & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & e^{-\beta} & 0 & e^{\beta} & -1 & e^{2\beta} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Se nota que F es una forma cuadrática en los $\sqrt{x_{ik}}$, luego su valor mínimo es cero o no posee mínimo. Como $F(x)$ es un múltiplo positivo de $2T_1 - pT_2$, para maximizar p sólo hay que buscar los valores de p para los cuales F alcanza un mínimo de 0 en la región definida por $\{x_{ik} \geq 0\}$ sujeta a (5.2).

En la región $\{x_{ik} \geq 0\}$ la segunda derivada de $F(x)$ es una matriz positiva, luego F es una función convexa en $\{x_{ik} \geq 0\}$. Por lo tanto se puede minimizar F sujeta a restricciones lineales (5.2) usando técnicas de programación convexa: véase [5], por ejemplo.

Para $x = (x_{13}, \dots, x_{4,-3})$, $u = (u_1, u_2, u_3)$, definimos

$$L(u, x) := \begin{cases} F(x) + \langle u, Bx \rangle & \text{si cada } x_{ik} \geq 0, \\ 0 & \text{si no.} \end{cases}$$

L es el “lagrangiano” del problema de minimización (5.1) – (5.3) y se sabe [5] que F alcanza su mínimo en $x^{(0)}$ si y solo si hay un punto $(u^{(0)}, x^{(0)})$ que es un punto de ensilladura para $L(u, x)$ – es decir, maximizante en u y minimizante en x – si y sólo si hay un punto $u^{(0)}$ en donde la función

$$g(u) := \min\{L(u, x) : x_{ik} \geq 0\}$$

alcanza su máximo. Para calcular $g(u)$, introducimos la *función convexa conjugada* de F [5]:

$$F^*(y) := \max\{\langle y, x \rangle - F(x) : x_{ik} > 0 \text{ para todo } i, k\}$$

y notamos que

$$\begin{aligned} g(u) &= \min\{F(x) + \langle u, Bx \rangle : x_{ik} > 0\} \\ &= \min\{F(x) + \langle B^t u, x \rangle : x_{ik} > 0\} = -F^*(-B^t u). \end{aligned}$$

Usando (5.1) y (5.3), se puede calcular directamente que $g(u)$ toma solamente los valores $-\infty$ y 0; luego buscamos los valores de p donde la región $A = \{u : g(u) = 0\}$ no es vacía.

Un cálculo explícito de $g(u)$ muestra que la región A está delimitada por varias desigualdades lineales, cuadráticas y cúbicas en u_1, u_2, u_3 . Si escribimos $u_4 := u_2 - e^{-\beta}u_1$, $u_5 := u_3 - e^{-\beta}u_2$, obtenemos en particular

$$-3e^{3\beta}(1 - 3p) \leq u_1 \leq 3(1 - 3p), \quad (5.4)$$

$$-3e^{\beta}(1 - p) \leq u_3 \leq (7 + p), \quad (5.5)$$

$$-3e^{\beta}(1 - p) \leq u_4 \leq (7 + p), \quad (5.6)$$

$$-3e^{-\beta}(7 - p) \leq u_5 \leq (7 - p), \quad (5.7)$$

y también

$$\begin{aligned} (7 + p - u_4)(7 - p - u_5)(3 - 3p + e^{-\beta}u_3) &\geq 12(7 + p - u_4) + 12(3 - 3p + e^{-\beta}u_3), \\ (7 + p - u_3)(7 - p + e^{\beta}u_5)(3 - 3p + e^{\beta}u_4) &\geq 12(7 + p - u_3) + 12(3 - 3p + e^{\beta}u_4). \end{aligned} \quad (5.8)$$

De (5.4) se ve que $p \leq 1/3$ (y por lo tanto $\kappa \leq 1/6$).

Las desigualdades cúbicas (5.8) definen una región dentro del cubo delimitado por (5.5), (5.6), (5.7). La desigualdad (5.4) define un par de planos que cortan este cubo oblicuamente (pues $u_1 = e^{2\beta}u_3 - e^{\beta}u_4 - e^{2\beta}u_5$). En particular, cuando $p = 1/3$ estos planos coinciden ($u_1 = 0$) y A es una región plana delimitada por desigualdades en dos parámetros (pueden ser u_3 y u_4); un cálculo explícito ahora demuestra que éstas últimas son incompatibles para todo $\beta \in \mathbb{R}$.

Concluimos que $p_0(\beta) < 1/3$ y por lo tanto $\kappa(\beta) < 1/6$ para el caso de un espín $\frac{3}{2}$.

En el *caso general*, para espín j arbitrario, podemos aplicar los argumentos de esta sección a (3.5) y (3.6). Aunque los detalles conducen a mucha álgebra elemental para especificar la región A correspondiente, podemos notar que a la variable $x_{1,N-1}$ de $F(x)$ corresponde una ecuación análoga a (5.4):

$$-(N-1)e^{(N-1)\beta}(1-(N-1)p) \leq u_1 \leq (N-1)(1-(N-1)p),$$

de donde es inmediato que $\kappa(\beta) < 1/2(N-1) = 1/4j$ para todo $\beta \in \mathbb{R}$.

6. Conclusión

Un sistema dinámico con evolución irreversible puede ser “dilatado” a un sistema conservativo más grande sólo si cumple ciertas condiciones restrictivas. Aquí se ha investigado las consecuencias de una de estas condiciones (la positividad completa de la evolución [2]) en el caso de un sistema de N niveles. Otra condición, siempre satisfecha si $\gamma(\mathbb{R}^+)$ es un semigrupo, es que la función $t \mapsto \gamma_t$ ($t \geq 0$) debe ser compatible con la estructura de homomorfismo de $t \mapsto \alpha_t$ ($t \in \mathbb{R}$): pero hay ejemplos de sistemas donde $\gamma(\mathbb{R}^+)$ no es un semigrupo [7]. Si $\gamma(\mathbb{R}^+)$ es un semigrupo, podemos describirlo mediante ecuaciones diferenciales y estimar los tiempos de relajación hacia equilibrio (3.1). Para el caso de un sistema abierto que consiste de un espín (a temperatura finita) en interacción con *cualquier sistema ambiental*, hemos obtenido el siguiente resultado.

Proposición. Sean T_1 y T_2 los tiempos de relajación de un j -espín hacia equilibrio a temperatura finita; entonces siempre vale $T_1 \geq \kappa T_2$ con $\kappa \leq (4j)^{-1}$. Si $j = \frac{1}{2}$ ó 1, la igualdad puede alcanzarse a cualquier temperatura; si $j = \frac{3}{2}$, la igualdad nunca se alcanza.

Queda abierto el problema inverso: dada una evolución de un j -espín que satisface las condiciones mencionadas, construir directamente un sistema conservativo que la dilate. Para el caso $j = \frac{1}{2}$, este problema admite una solución completa [8] aun en el caso no markoviano; sería interesante obtener una construcción análoga en los casos $j \leq 1$.

Referencias

- [1] H. Araki, “Gibbs States on a one-dimensional quantum lattice”, Commun. Math. Phys. **14** (1969), 120–157.
- [2] G. G. Emch y J. C. Várilly, “On the standard form of the Bloch equation”, Lett. Math. Phys. **3** (1979), 113–116.
- [3] V. Gorini, A. Kossakowski y E. C. G. Sudarshan, “Completely positive dynamical semigroups of N -level systems”, J. Math. Phys. **17** (1976), 821–825.
- [4] G. Lindblad, “On the generators of quantum dynamical semigroups”, Commun. Math. Phys. **48** (1976), 119–130.
- [5] R. T. Rockafellar, *Convex Analysis*, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1970.
- [6] M. Takesaki, *Tomita’s Theory of Modular Hilbert Algebras*, Lecture Notes in Mathematics **128**, Springer, Berlin, 1970.
- [7] J. C. Várilly, “Dilations of dynamical evolutions”, tesis doctoral, University of Rochester, 1980.
- [8] J. C. Várilly, “Dilation of a non-quasifree dissipative evolution”, Lett. Math. Phys. **5** (1981), 113–116.