ESTUDIO DE LA MATRIZ DENSIDAD EN EL ENSAMBLE CANÓNICO

Víctor Granados García.[1,], Carlos Germán Pavía Miller[2,1], Roberto Daniel Mota Esteves[3,**].*

[1]Departamento de Física, Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional.
[2]Departamento de Ciencias Básicas. DCBI. Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco.
[3]ESIME Culhuacán, Instituto Politécnico Nacional, México D.F. México.

RESUMEN

Revisamos las propiedades de la matriz densidad en mecánica cuántica y las aplicamos a los sistemas cuánticos mezclados en el ensamble canónico. Tratamos un gas ideal, el paramagnetismo de espín 1/2 y oscilador armónico resaltando el tratamiento de Bloch.

INTRODUCCIÓN

En mecánica cuántica la descripción de un estado puro está dada por la probabilidad intrínseca del módulo al cuadrado de esta función. Pero cuando se trata de un sistema de N partículas que forman un ensamble o colectivo de réplicas del sistema, es necesario introducir una segunda probabilidad de encontrar al sistema en una de las réplicas del ensamble. Para realizar esto, en mecánica cuántica, von Neumann y Landau introdujeron la matriz u operador densidad. En mecánica cuántica se describen las propiedades estadísticas de la matriz densidad, pero los cálculos son complicados, sobre todo para el cálculo de la entropía de von Neumann. En mecánica estadística la matriz densidad se puede determinar para los ensambles o colectivos microcanónico, canónico y gran canónico. En particular la matriz densidad es fácil de tratar en el ensamble canónico, así como la entropía de von Neumann basada en la entropía de Boltzmann. En este artículo revisamos las propiedades de la matriz densidad en la mecánica cuántica y en la mecánica estadística en el ensamble canónico. Luego lo aplicamos a un gas de partículas libres, se aplica también a un medio paramagnético con momento dipolar magnético de espín 1/2 y a un gas de osciladores armónicos cuánticos. Pero a diferencia a lo reportado en la literatura, calculamos la entropía de von Neumann para estos casos y las variables termodinámicas. Para calcular elementos de matriz en el caso del oscilador armónico usamos directamente la fórmula de Mehler de las funciones de Hermite y no se utiliza el método matricial más complicado. Establecemos la relación entre los elementos de matriz en la representación de número y el propagador del oscilador armónico. Resaltamos los resultados obtenidos por Bloch para las varianzas en posición y momento lineal y su producto como relación de incertidumbre térmica un tanto relacionada con el teorema de fluctuación disipación de Callen y Welton.

PROPIEDADES DE LA MATRIZ DENSIDAD

El operador o matriz densidad ρ por von Neumann y Landau con el objetivo de tratar un colectivo o ensemble de réplicas de un sistema cuántico a partir de la probabilidad p_n de encontrar al sistema en la réplica n-esima del colectivo para calcular valores promedios de los operadores Hermitianos. Como probabilidad p_n satisface dos condiciones

$$0 \leq p_n \leq 1,\ \sum_n p_n = 1\ . \tag{1}$$

Si un sistema cuántico se encuentra en el estado $|\phi_n\rangle$ el valor promedio de la variable dinámica F en este estado es

$$\bar{F}_n = \langle\phi_n|F|\phi_n\rangle\ . \tag{2}$$

Pero en ensamble este no es el único promedio, el otro está dado por el operador o matriz densidad definido como

$$\rho = \sum_n |\phi_n\rangle p_n \langle\phi_n|\ . \tag{3}$$

La matriz densidad tiene las siguientes propiedades
1). ρ es hermitiano,
2). $Tr(\rho) = 1$,
3). ρ es definido positivo,
4). $\langle\bar{F}\rangle = Tr(\rho F)$,
donde la última nos indica el doble promedio del operador F en el estado cuántico y en el ensamble considerado con el operador ρ y la traza Tr. La propiedad (1) se obtiene tomando el adjunto

$$\rho^\dagger = \left(\sum_n |\phi_n\rangle p_n\langle\phi_n|\right)^\dagger = \sum_n |\phi_n\rangle p_n\langle\phi_n| = \rho\ , \tag{4}$$

ya que p_n es real, ρ es Hermitiano. La propiedad (2) se prueba de la definición y de la ortogonalidad $\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{mn}$

$$Tr(\rho) = \sum_m\sum_n \langle\phi_m|\phi_n\rangle p_n\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \sum_n p_n = 1\ . \tag{5}$$

La propiedad (3) se prueba con una función de estado ψ, así que se tiene

$$\langle\psi|\rho|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|\phi_m\rangle p_n\langle\phi_n|\psi\rangle = \sum_n p_n |\langle\psi|\phi_n\rangle|^2 \geq 0\ , \tag{6}$$

la cual muestra que los elementos diagonales de ρ son reales y no negativos en cualquier representación. La propiedad (4) del promedio estadístico es como sigue

$$Tr(\rho F) = \sum_{m,n}\langle\psi_m|\phi_n\rangle p_n\langle\phi_n|F|\psi_m\rangle = \sum_{m,n} p_n\langle\phi_n|F|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\phi_n\rangle =$$
$$= \sum_n p_n\langle\phi_n|F|\phi_n\rangle = \sum_n p_n F_n = \langle\bar{F}\rangle\ . \tag{7}$$

En mecánica estadística el formalismo de la matriz densidad se trata de forma más directa y concreta que en mecánica cuántica y se puede tratar en el microcanónico, canónico y gran canónico de manera sistemática. Pero solo lo tratamos en el canónico a partir de la entropía de von Neumann definida por analogía de la de Boltzmann

$$S = -kTr(\rho\ln(\rho))\ , \tag{8}$$

donde k es la constante de Boltzmann. Esta expresión de la entropía y el valor promedio de la energía con el operador Hamiltoneano H, de acuerdo a la propiedad (4)

$$\langle E\rangle = Tr(\rho H)\ , \tag{9}$$

considerando que la entropía es máxima y usando los parámetros de Lagrange α y β tales que

$$Tr(\rho\ln(\rho) + \alpha\rho + \beta\rho H) = Tr\big(\rho(\ln(\rho) + \alpha + \beta H)\big) = 0\ . \tag{10}$$

Para que se cumpla esta situación se debe satisfacer

$$\ln(\rho) = -\alpha - \beta H,\ \ \rho = e^{-\alpha-\beta H}\ . \tag{11}$$

De acuerdo a la propiedad (2) la traza de la Ec. (11)

$$e^{-\alpha} = Tr\left(e^{\beta H}\right) = Z\ , \tag{12}$$

donde Z es la función de partición de la distribución canónica. Por tanto, la Ec. (11) se puede expresar como

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \qquad Tr(\rho) = 1\ . \tag{13}$$

El valor medio de la energía por tanto es

$$U = \langle\bar{H}\rangle = \frac{Tr\left(He^{-\beta H}\right)}{Tr\left(e^{-\beta H}\right)}\ , \tag{14}$$

donde $\beta = \frac{1}{kT}$ como es usual.

Para calcular las trazas en los valores promedios por lo que lo más conveniente es usar las autofunciones del operador Hamiltoneano

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle,\ \sum_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n| = I\ , \tag{15}$$

donde I es el operador identidad y lo que nos permite escribir a la Ec. (13) en la forma

$$\rho = \sum_n \frac{e^{-\beta H}}{Z}|\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \sum_n|\phi_n\rangle\frac{e^{-\beta H}}{Z}\langle\phi_n| = \sum_n|\phi_n\rangle p_n\langle\phi_n|,\ \ p_n = \frac{e^{-\beta H}}{Z}\ . \tag{16}$$

Por lo tanto, se cumplen las

$$Z = Tr(\rho^*) = \sum_n\langle\phi_n|e^{-\beta H}|\phi_n\rangle = \sum_n e^{-\beta E_n}\ , \qquad \sum_n p_n = 1\ . \tag{17}$$

donde ρ^* no se encuentra normalizada, es decir de acuerdo a la Ec. (13)

$$\rho = \frac{\rho^*}{Z}\ , \tag{18}$$

El operador ρ^* satisface la ecuación de Bloch siguiente

$$\frac{\partial\rho^*}{\partial\beta} = -H\rho^*\ . \tag{19}$$

Esta ecuación de Bloch es análoga a la de Schrödinger si tomamos $\beta = \frac{it}{\hbar}$, que nos será útil. La función de partición la calculamos como

$$Z = Tr(\rho^*)\ . \tag{20}$$

Para calcular la entropía de von Neumann de la Ec. (4) usamos la Ec. (13) para obtener

$$S = -k\left(Tr\big(\rho(-\beta H)\big) - \ln(Z)\right) = k\beta\langle\bar{H}\rangle + k\ln(Z)\ , \tag{21}$$

de la cual se tiene inmediatamente de la Ec. (14) con $\beta = \frac{1}{kT}$ la relación

$$F = U - TS = -kTln(Z)\ . \tag{22}$$

Aunque con la energía libre de Helmholtz F se pueden obtener las variables termodinámicas con la distribución canónica es conveniente usar los métodos de la matriz densidad como ilustraciones.

APLICACIONES DE LA MATRIZ DENSIDAD.

Sistema paramagnético de dipolos magnéticos de espín 1/2. Este caso corresponde a un paramagneto de espín 1/2 de Brillouin. Los momentos dipolares $\boldsymbol{m}$ en presencia de un campo magnético $\boldsymbol{B}$ en la dirección z. La energía de interacción con las matrices de Pauli σ_x, σ_y y σ_z toma la forma

$$H = -m\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma} = -mB\sigma_z\ , \tag{23}$$

ya que $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ y explícitamente tenemos que son

$$\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \ \sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \tag{24}$$

y satisfacen $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$.
Con la variable $\chi = mB\beta$, tenemos entonces que

$$e^{-\chi\sigma_z} = e^{-BH} = \sum_{n\ par}\frac{\chi^n\sigma_z^n}{n!} + \sum_{n\ impar}\frac{\chi^n\sigma_z^n}{n!} =$$
$$I\sum_{n\ par}\frac{\chi^{2n}}{(2n)!} + \sigma_z\sum_{n\ impar}\frac{\chi^{2n+1}}{(2n+1)!} = Icosh(\chi) + \sigma_z senh(\chi)\ , \tag{25}$$

donde usamos $\sigma_z^{2n} = I,\ \sigma_z^{2n+1} = \sigma_z$, así finalmente

$$e^{-\chi\sigma_z} = \begin{pmatrix}e^{\chi} & 0\\ 0 & e^{-\chi}\end{pmatrix}. \tag{26}$$

Finalmente, la Ec. (16) para la matriz densidad es la siguiente

$$\rho = \frac{1}{e^{\chi}+e^{-\chi}}\begin{pmatrix}e^{\chi} & 0\\ 0 & e^{-\chi}\end{pmatrix} = \frac{1}{Z}\begin{pmatrix}e^{\chi} & 0\\ 0 & e^{-\chi}\end{pmatrix}, \tag{27}$$

y la función de partición es, por lo tanto

$$Z = tr\begin{pmatrix}e^{\chi} & 0\\ 0 & e^{-\chi}\end{pmatrix} = 2\cosh(\chi)\ . \tag{28}$$

Para calcular la energía interna, de las Ecs. (14) y (27) obtenemos

$$U = Tr(H\rho) = -mBTr(\sigma_z\rho) = -mB\frac{e^{\chi}-e^{-\chi}}{e^{\chi}+e^{-\chi}} = -mBtanh(mB\beta)\ . \tag{29}$$

Aparentemente la matriz densidad solo nos permite calcular la energía, pero podemos calcular la entropía de von Neumann de las Ecs. (21), (28) y (29) obtenemos

$$S = Nk(\ln(2\cos(\beta mB)) - mBtanh(\beta mB)\ . \tag{30}$$

Entonces la energía libre de Helmholtz $F = U - TS$ para un sistema de N dipolos de las Ecs. (29) y (30)

$$F = -NkTln(2\cos(\beta mB))\ , \tag{31}$$

que coincide con la relación $F = -NkTln(Z)$, de acuerdo a la Ec. (28). La magnetización M esta dada por

$$M = Tr(m\sigma_z\rho),\ U = -BM\ , \tag{32}$$

de acuerdo a la Ec. (29).

PARTÍCULA LIBRE EN EL ESPACIO DE COORDENADAS

Tratemos un gas de partículas libres de masa m, en una caja de volumen $V = L^3$, cuyo Hamiltoneano esta expresado como $H = -\hbar^2\nabla^2/2m$. Sus autofunciones y autovalores son las siguientes

$$\phi_E(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}\exp(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{k})\ , \tag{33}$$

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\ , \tag{34}$$

donde

$$\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{L}\left(n_x, n_y, n_z\right) = \frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n}\ , \tag{35}$$

donde $\boldsymbol{n} = \left(n_x, n_y, n_z\right)$ y n_x, n_y, n_z son enteros, positivos, ceros y negativos.

Ahora podemos encontrar los elementos de matriz sin el factor Z^{-1} en la representación de coordenadas de acuerdo con las Ecs. (13) y (33) tenemos

$$\langle\boldsymbol{r}|e^{-\beta H}|\boldsymbol{r}'\rangle = \sum_E\langle\boldsymbol{r}|E\rangle e^{-\beta E}\langle E|\boldsymbol{r}'\rangle = \sum_E e^{-\beta E}\phi_E(\boldsymbol{r})\phi_E^*(\boldsymbol{r}')\ . \tag{36}$$

Aquí debemos observar que la expresión del lado derecho de la Ec. (36) está relacionada con él núcleo propagador de la mecánica cuántica [13] si hacemos el cambio antes indicado $\beta = it/\hbar$ y viceversa. Sustituyendo en la Ec. (36) las Ecs. (33) de las autofunciones y la (34) del espectro de energía obtenemos

$$\langle\boldsymbol{r}|e^{-\beta H}|\boldsymbol{r}'\rangle = \frac{1}{L^3}\sum_k\exp\left(-\frac{\hbar^2\beta k^2}{2m} + \boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right) =$$
$$= \frac{1}{2\pi}\int\exp\left(-\frac{\hbar^2\beta k^2}{2m} + \boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right)d\boldsymbol{k} = \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{m}{2\beta\hbar^2}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^{\boldsymbol{2}}\right). \tag{37}$$

Entonces la función de partición Z de acuerdo a la Ec. (37) es la siguiente

$$Z = Tr\left(e^{-\beta H}\right) = \langle\boldsymbol{r}|e^{-\beta H}|\boldsymbol{r}\rangle d\boldsymbol{r} = V\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}. \tag{38}$$

Combinando las Ecs. (37) y (38) determinamos los elementos de matriz densidad de partícula libre en la forma

$$\langle\boldsymbol{r}|\rho|\boldsymbol{r}'\rangle = \frac{1}{V}\exp\left(-\frac{m}{2\beta\hbar^2}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^{\boldsymbol{2}}\right). \tag{39}$$

De las Ecs. (15) y (39) obtenemos la expresión para la energía interna

$$U = Tr(\rho H) = -\frac{\hbar^2}{2mV}\int\left(\nabla^2\exp\left(-\frac{m}{2\beta\hbar^2}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^{\boldsymbol{2}}\right)\right)d\boldsymbol{r} =$$
$$= -\frac{1}{2\beta V}\int\left(\left(3 - \frac{m}{\beta\hbar^2}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^{\boldsymbol{2}}\right)\exp\left(-\frac{m}{2\beta\hbar^2}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^{\boldsymbol{2}}\right)\right)d\boldsymbol{r} = \frac{3}{2\beta} = \frac{3}{2}kT\ . \tag{40}$$

Este resultado es esperado para partícula libre de acuerdo al teorema de equipartición de la energía. En este caso es más fácil y directo utilizar la ecuación de la energía y la relación $F = -NkTln(Z)$ para obtener las restantes variables termodinámicas de un gas ideal.

OSCILADOR ARMÓNICO SIMPLE

Tratamos ahora al oscilador armónico cuyo Hamiltoneano es la siguiente expresión

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{m\omega^2}{2}q^2\ . \tag{41}$$

Los autovalores de energía discretos son

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n = 0,1,2,\dots\ , \tag{42}$$

y las autofunciones son las siguientes

$$\phi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{H_n(x)}{(2^n n!)^{\frac{1}{2}}}e^{-\frac{x^2}{2}}\ , \tag{43}$$

donde $x = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}q$. Los elementos de matriz sin el termino Z^{-1}, entonces están dados por

$$\langle q|e^{-\beta H}|q'\rangle = \sum_n e^{-\beta E_n}\phi_n(q)\phi_n^*(q') =$$
$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}e^{-(x^2+x'^2)/2}\sum_n e^{-\beta\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}\frac{H_n(x)H_n(x')}{2^n n!}\ . \tag{44}$$

Para comparar con el núcleo propagador de la mecánica cuántica su expresión

$$N(x', x, t) = \sum_n e^{-\frac{itE_n}{\hbar}}\phi(x')\phi^*(x)\ , \tag{45}$$

donde es claro el cambio de β por $it/\hbar$ para pasar de los elementos de matriz de la Ec. (44) al núcleo propagador de la Ec. (45) y viceversa. Ambas Ecs. (44) y (45) con las funciones de Hermite del oscilador armónico pueden evaluarse con la fórmula de Mehler siguiente

$$\sum_n H_n(x)H_n(y)\frac{z^n}{2^n n!} = \frac{1}{\left(1-z^2\right)^{1/2}}\exp\left(2xyz - \frac{z^2\left(x^2+y^2\right)}{1-z^2}\right). \tag{46}$$

aunque la evaluación puede realizarse en forma matricial mucho más complicada. Si comparamos las Ecs. (44) y (46) podemos hacer la identificación de $z = \beta\hbar\omega$, entonces obtenemos de acuerdo a la formula de Mehler aplicada a la Ec. (44)

$$\langle q|e^{-\beta H}|q'\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{\left(1-e^{-2\beta\hbar\omega}\right)^{\frac{1}{2}}} * \exp\left(\left(\frac{x^2+x'^2}{2}\right) - \frac{1}{1-e^{-2\beta\hbar\omega}}\left(x^2 + x'^2 - 2xx'e^{-\beta\hbar\omega}\right)\right) =$$
$$= \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar senh(\beta\hbar\omega)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\coth(\beta\hbar\omega) + \frac{2xx'}{\mathrm{senh}(\beta\hbar\omega)}\right). \tag{47}$$

Para evaluar la función de partición de la Ec. (47) fácilmente, usamos la relación $\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right) = (\cosh(\beta\hbar\omega) - 1)/\mathrm{senh}(\beta\hbar\omega) = \mathrm{senh}(\beta\hbar\omega)/(1 + \cosh(\beta\hbar\omega))$, así obtenemos

$$\langle q|e^{-\beta H}|q'\rangle = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar senh(\beta\hbar\omega)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar}(q+q')^2\tanh(\beta\hbar\omega) + (q-q')\coth\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)\right). \tag{48}$$

La función de partición de la Ec. (48) es entonces

$$Z = \langle q|e^{-\beta H}|q'\rangle =$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar senh(\beta\hbar\omega)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}q^2\right)\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)dq = \frac{1}{2}senh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right). \tag{49}$$

Esta función de partición es la misma obtenida con la distribución canónica [8, 9, 10] y de ella se obtienen fácilmente las variables termodinámicas. Así obtenemos la distribución de probabilidad de origen térmico en la forma

$$\langle q|e^{-\beta H}|q\rangle = \left(\frac{m\omega tanh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{m\omega^2}{\hbar}q^2 tanh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)\right). \tag{50}$$

Esta es una distribución de probabilidad gaussiana en la variable q, con valor promedio cero y desviación cuadrática media o varianza dada por

$$\Delta q = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}ctgh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{51}$$

Análogamente el operador de momento lineal $p = -i\hbar d/dx$, tiene valor promedio cero y desviación cuadrática media o varianza dado por

$$\Delta p = \left(\frac{\hbar m\omega}{2}ctgh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{52}$$

Las Ecs. (51) y (52) nos conducen a la relación de incertidumbre térmica

$$\Delta q\Delta p = \frac{\hbar}{2}ctgh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right). \tag{53}$$

La energía interna se calcula [8, 9, 10] con la relación de la Ec. (49) en la forma

$$U = \langle H\rangle = -\frac{\partial\ln(Z)}{\partial\beta} = \frac{1}{2}\hbar\omega tgh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right). \tag{54}$$

Por lo tanto, de las Ecs. (49) y (50) se puede escribir

$$\Delta q\Delta p = \frac{U}{\omega}\ . \tag{55}$$

Aunque la Ec. (55) no es precisamente un teorema de fluctuación disipación por la función hiperbólica de la Ec. (54) nos hace pensar que es una forma del mismo. La Ec. (50) para distribución gaussiana de los operadores x y p fue dada por Bloch en 1932 y conocido como el teorema de Bloch.

CONCLUSIONES

En mecánica estadística cuántica que representa estados mezclados, son más claros y directos los cálculos con la matriz densidad en la representación canónica, que en mecánica cuántica. La matriz densidad en mecánica estadística cuántica en el canónico satisface todas las propiedades de esta en mecánica cuántica. En particular se cumple para la probabilidad $p_n = \exp(-\beta E_n)/Z$. La función de partición Z en los casos tratados y en general es la misma que se obtiene con la distribución canónica nos permite obtener las variables termodinámicas mediante por la relación $F = -NkTln(Z)$. La entropía de von Neumann en forma general se obtiene a partir de la expresión de la entropía de Boltzmann. Las variables termodinámicas obtenidas con la matriz densidad son las mismas que se obtienen a partir de Z. Para el oscilador armónico para evaluar a la matriz densidad en forma simplificada la fórmula de Mehler para las funciones de Hermite. Así obtuvimos de acuerdo a Bloch la distribución gaussiana, las varianzas Δq y Δp, cuyo producto de incertidumbre es parecido a un teorema de fluctuación disipación.

***Becario: COFAA, EDD, SIP (20220061) IPN.**
****Becario: COFAA, EDI, SIP (20220061) IPN**