Capítulo 9

Estados y composición de sistemas cuánticos

9.1. Estados

9.1.1. Una descripción alternativa del estado

Hasta ahora habiamos descripto el estado de un sistema cuántico por medio de un vector normalizado ψ en un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$. La física se obtiene –en última instancia– de los números

$$\langle \psi, A\psi \rangle \ , \tag{9.1}$$

donde A es el operador que representa la magnitud física A . Entonces, hay una ambiguedad en la caracterización del estado. En efecto todos los números (9.1), i.e. variando A, no determinan a ψ sino hasta una fase global arbitraria. ψ y $e^{i\alpha}\psi$ con α real, nos dan el mismo estado.

A todo vector normalizado $\psi \in \mathcal{H}$ le asociamos el operador P_ψ definido por:

$$P_\psi \phi \ := \ \langle \psi, \phi \rangle \psi \ , \ \ \phi \in \mathcal{H} \, .$$

Este operador es autoadjunto e idempotente, o sea un ortoproyector. Además, a ψ y a $e^{i\alpha}\psi$ les corresponde el *mismo proyector*, como usted verificará inmediatamente. La ambiguedad no se presenta a nivel de proyectores. Recordando que la traza tr de un operador A es

$$tr(A) = \sum_{j=1}^{dim(\mathcal{H})} \langle \phi_j, A\phi_j \rangle \ ,$$

donde $\{\phi_j \ : \ j = 1, 2, \cdots, dim(\mathcal{H})\}$ es cualquier base ortonormal de $\mathcal{H}$ podemos verificar que

$$tr(AP_\psi) = \langle \psi, A\psi \rangle \ . \tag{9.2}$$

En efecto, eligiendo una base ortonormal tal que $\phi_1 = \psi$,

$$tr(AP_\psi) = \langle \psi, AP_\psi \psi \rangle + \sum_{j=2}^{dim(\mathcal{H})} \langle \phi_j, AP_\psi \phi_j \rangle$$

$$= \langle \psi, A\psi \rangle + \sum_{j=2}^{dim(\mathcal{H})} \langle \psi, \phi_j \rangle \langle \phi_j, A\psi \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle \, .$$

Observe que $tr(P_\psi) = 1$ i.e. el proyector es unidimensional[1].

Veamos, para completar, que obtenemos todos los posibles proyectores unidimensionales posibles. Si P es un proyector sus autovalores son o 0 o 1. Si $P \neq 0$, entonces P debe tener al menos un autovalor 1. Existe entonces un vector normalizado $\psi \in \mathcal{H}$ tal que $P\psi = \psi$; si existiera otro vector normalizado ϕ tal que $P\phi = \phi$ con $\langle \psi, \phi \rangle = 0$ entonces la traza de P sería mayor o igual a 2. Por lo tanto, $P = P_\psi$. Hay entonces una correspondencia biunívoca entre subespacios unidimensionales, los proyectores correspondientes, y estados.

9.1.2. Estados puros y mixtos

`falta: que es un estado mixto. Donde aparecen y porque.`

Considere un operador lineal acotado y no-negativo[2] sobre un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$; si $\{f_\alpha\}$ es una base ortonormal de $\mathcal{H}$ y la serie

$$\sum_\alpha \langle f_\alpha, A f_\alpha \rangle$$

es convergente, entonces lo es para toda base ortonormal de $\mathcal{H}$ y el límite, que se anota $tr(A)$, la *traza* de A, es independiente de la base. Se dice entonces que A es *trazable, o tiene traza finita*. Cuando A no es positivo, se dice que es trazable si $|A|$ lo es; en tal caso cualquiera se la base ortonormal $\{f_\alpha\}$ la serie $\sum_\alpha \langle f_\alpha, A f_\alpha \rangle$ es absolutamente convergente y, sobre todo, A es compacto y tiene por ende espectro puramente discreto de multiplicidad finita salvo que 0 puede ser un punto de acumulación o autovalor de multiplicidad infinita. Es importante para lo que sigue, que los operadores trazables forman un ideal bilátero de los operadores lineales acotados; esto quiere decir que si A es trazable y B es un operador lineal continuo entonces AB y BA son ambos trazables; además se tiene $tr(AB) = tr(BA)$.

Un operador D autoadjunto y positivo que tiene traza $tr(D) = 1$, se llama un *operador densidad*. Vimos entonces que a todo estado mixto le corresponde un operador densidad. Veamos que, vice versa, a todo operador densidad le corresponde un estado. En efecto, como mencionamos, del hecho que D tiene traza finita y es positivo, se deduce que el espectro de D consiste puramente de autovalores aislados de multiplicidad finita con cero como único posible punto de acumulación del espectro. Reenumerando los autovalores teniendo en cuenta la multiplicidad $0 \leq \mu_1 \leq \mu_2 \leq \mu_3 \leq \cdots$, tenemos

$$D = \sum_j \mu_j Q_j$$

donde los Q_j son proyectores ortogonales unidimensionales y ortogonales entre si. Como $1 = tr(D) = \sum_j \mu_j$, los autovalores de D satisfacen $0 \leq \mu_j \leq 1$. Si para aquellos j para los cuales $\mu_j \neq 0$, elegimos autovectores normalizados ψ_j de Q_j; i.e., $Q_j\psi_j = \psi_j$, vale decir

[1] Si $P = P^* = P^2$ es un ortoproyector, sea $\{\phi_k : k \in K\}$ una base ortonormal del subespacio $P\mathcal{H}$; entonces $tr(P) = \sum_{k\in K} \langle \phi_k, P\phi_k \rangle = \sum_{k\in K} \langle \phi_k, \phi_k \rangle = \sum_{k\in K} = dim(P\mathcal{H})$.

[2] O sea $\langle f, Af \rangle \geq 0$ para todo vector f. En tal caso una aplicación de la identidad de polarización muestra inmediatamente que $A = A^*$.

$Q_j = |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$; entonces para cualquier observable A tenemos

$$tr(DA) = \sum_j \mu_j tr(Q_j A) = \sum_j \mu_j \langle \psi_j, A\psi_j \rangle \ ,$$

o sea que D es el operador densidad asociado con la mezcla de los estados vectoriales dados por $\{\psi_j : \ \mu_j \neq 0\}$ con pesos $\{\mu_j \neq 0\}$.
Notese también que un proyector ortogonal unidimensional es automaticamente un operador densidad, o, más generalmente, si Q es un proyector ortogonal no nulo y el subespacio a donde Q proyecta es de dimensión finita, entonces $\widetilde{Q} = (tr(Q))^{-1}Q$ es un operador densidad pues: Q es autoadjunto; positivo ya que $\langle \psi, Q\psi \rangle = \langle \psi, Q^2\psi \rangle = \langle Q\psi, Q\psi \rangle = \|Q\psi\|^2 \geq 0$; y se tiene $tr(Q) =$ dimensión del subespacio $Q\mathcal{H}$.

Es importante notar que los operadores densidad –los estados– de un sistema cuántico forman un conjunto convexo: si D_1 y D_2 son operadores densidad, entonces para cualquier $0 \leq t \leq 1$, $tD_1 + (1-t)D_2$ es un operador densidad, en tanto y en cuanto es autoadjunto positivo y de traza $tr(tD_1 + (1-t)D_2) = ttr(D_1) + (1-t)tr(D_2) = 1$. Si D_1 está asociado a la mezcla de los estados vectoriales asociados con ψ_j y pesos λ_j y D_2 está asociado a la mezcla de los estados vectoriales ϕ_ℓ con pesos μ_ℓ entonces $tD_1 + (1-t)D_2$, el operador densidad suma convexa de D_1 con peso t y D_2 con peso $(1-t)$, es en efecto el operador densidad asociado con la mezcla de los estados vectoriales ψ_j con pesos $t\lambda_j$ y los estados vectoriales ϕ_ℓ con pesos $(1-t)\mu_\ell$.

¿Como decidimos si un dado estado –un operador densidad– es vectorial o no? Las siguientes propiedades son equivalentes:

1. $D^2 = D$;
2. Hay $\psi \in \mathcal{H}$ tal que $tr(DA) = \langle \psi, A\psi \rangle$ para todo operador A;
3. D no se puede escribir como $D = tD_1 + (1-t)D_2$ con $0 < t < 1$ y operadores densidad D_1 y D_2 uno de los cuales sea distinto a D;
4. $1 \in spec(D)$.

Esto indica que los estados vectoriales son precisamente aquellos estados que no se pueden escribir como sumas convexas de otros estados. En otras palabras, los estados vectoriales son los puntos extremales del conjunto convexo de los estados y por eso se los llama también *puros*.
Para demostrar las equivalencias referidas será quizas de utilidad

Ejercicio 9.1 *Si D es un operador densidad y ψ un vector unitario entonces $\langle \psi, D\psi \rangle \leq 1$ con igualdad si y solo si $D = |\psi\rangle\langle\psi|$.*

El conjunto convexo de estados de una teoría cuántica resulta ser totalmente distinto que el de una teoría clásica. En la mecánica cuántica, se sabe como "mezclar" pero no como "desmezclar": hay infinitas maneras de descomponer una mezcla en componentes puras. Explicamos esto brevemente. Empecemos con un ejemplo concreto. Considere el caso $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, o sea el espacio de Hilbert de un spin 1/2, y el estado dado por el operador densidad

$$D = \frac{1}{2}\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \ ;$$

o sea

$$tr(DA) = \frac{1}{2} tr(A) \ .$$

Tenemos

$$D = \frac{1}{2} P_1 + \frac{1}{2} P_2 \ , \quad P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \ , \quad P_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \ ,$$

lo que descompone a D en suma convexa de los estados vectoriales asociados a los proyectores ortogonales unidimensionales P_j, $j = 1, 2$, dados por los vectores

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \ , \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \ ;$$

pero también

$$D = \frac{1}{2} Q_1 + \frac{1}{2} Q_2 \ , \quad Q_1 = \begin{pmatrix} 2^{-1/2} & 2^{-1/2} \\ 2^{-1/2} & 2^{-1/2} \end{pmatrix} \ , \quad Q_2 = \begin{pmatrix} 2^{-1/2} & -2^{-1/2} \\ -2^{-1/2} & 2^{-1/2} \end{pmatrix} \ ,$$

lo que descompone en suma convexa de los estados vectoriales dados por

$$\phi_1 = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \ , \quad \phi_2 = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \ .$$

Más generalmente, se tiene $D = \frac{1}{2} P + \frac{1}{2} P^{\perp}$ donde P es cualquier proyector ortogonal unidimensional y $P^{\perp} = \mathbf{1} - P$ es el proyector al complemento ortogonal. Es cierto que el D planteado es un estado muy especial; pero el lector debe aceptar (luego de una pequeña reflexión) que el estado mixto más general y distinto de la traza normalizada que acabamos de ver, es módulo transformaciones unitarias el estado dado por el operador densidad

$$D_t = \begin{pmatrix} t & 0 \\ 0 & 1-t \end{pmatrix} \ , \quad 1/2 < t < 1 \ .$$

Aceptado esto, es inmediato verificar que se tiene

$$D_t = \lambda(t,x) P(t,x) + (1 - \lambda(t,x)) Q(t,x)$$

donde x es arbitrario en el intervalo $[0, t]$,

$$\lambda(t,x) = \frac{y(t,x)}{x + y(t,x)} \ , \quad y(t,x) = \frac{t(1-t)x}{t(1-t) + (2t-1)x} \ ,$$

y

$$P(t,x) = \begin{pmatrix} t - x & \sqrt{(t-x)(1-t+x)} \\ \sqrt{(t-x)(1-t+x)} & 1 - t + x \end{pmatrix} \ ,$$

$$Q(t,x) = \begin{pmatrix} t + y(t,x) & -\sqrt{(t + y(t,x))((1 - t - y(t,x))} \\ -\sqrt{(t + y(t,x))(1 - t - y(t,x))} & 1 - t - y(t,x) \end{pmatrix} \ .$$

Y que tanto $P(t,x)$ como $Q(t,x)$ son proyectores unidimensionales [3]. Asi entonces, D_t admite infinitas descomposiciones en suma convexa de dos estados puros; vale decir podemos

[3] Note que $x = t$ corresponde a

$$D_t = t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + (1-t) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

interpretar a D_t como resultado de la mezcla de acuerdo a infinitas recetas distintas.

Hemos verificado entonces que hay infinitas maneras de “desmezclar” cualquier estado mixto de un spin 1/2. Si nos interesan solamente las descomposiciones en sumas convexas de estados puros que sean ortogonales entre si, tampoco logramos unicidad pues, como muestra la traza normalizada, la degeneración de algún autovalor de D impide la unicidad de la descomposición.

Todo esto podrá no sorprender a nadie si no se contrasta con la situación en una teoría clásica. Situación que describimos brevemente en lo que sigue.

`falta: cinematica clasica. Estados y estados mixtos. Descomposicion univoca de un estado mixto en estados puros.`

`falta quiza alusion a "simplexz dibujitos explicativos (semirecta, triangulo) vs. (rectangulo, disco). Hacer referencia al problema de la guia 1 donde se ve que los estados en dimension 2 son isomorfos a la bola unitaria en 3 dim`

9.1.3. Los estados de un spin 1/2

Retornamos al spin 1/2 y analizamos en detalle el espacio de sus estados. De acuerdo a XXX toda matriz densidad de tamaño 2×2 se escribe

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + p_3 & p_1 - ip_2 \\ p_1 + ip_2 & 1 - p_3 \end{pmatrix} \ , \quad \mathbf{p} = tr(\rho\boldsymbol{\sigma})$$

donde $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$ ya que σ_j es autoadjunta. En concordancia con el caso de un estado puro (vease §8.4), $\mathbf{p}$ se denomina la *polarización* del estado ρ. De la postividad de ρ obtenemos que $|p_3| \leq 1$ y que $0 \leq (1 + p_3)(1 - p_3) - |p_1 - ip_2|^2 = 1 - |\mathbf{p}|^2$; o sea $|\mathbf{p}| \leq 1$. Y, viceversa, si $\mathbf{p}$ es un vector real dentro de la bola de radio uno, entonces ρ dado por la fórmula de arriba es una matriz densidad. Esto implementa una correspondencia biunívoca entre los estados $\mathfrak{S}(\mathbb{C}^2)$ y la bola $\mathcal{B}_3$ de radio uno en $\mathbb{R}^3$. Veremos que esta correspondencia respeta todo lo que debe respetar. Observe que la bola $\mathcal{B}_3$ es convexa respecto de la suma usual de vectores: si $0 \leq t \leq 1$ y $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathcal{B}_3$ entonces $|t\mathbf{a} + (1-t)\mathbf{b}| \leq t|\mathbf{a}| + (1-t)|\mathbf{b}| \leq 1$. Es geométricamente evidente que los puntos extremales (no convexamente descomponibles) de la bola son los puntos en la superficie (o borde), y que la bola es cerrada con respecto a la distancia euclidea usual de $\mathbb{R}^3$.

El cálculo de los autovalores de ρ en términos del vector asociado es inmediato simplemente calculando el polinomio característico para obtener

$$spec(\rho) = \left\{ \frac{1 + |\mathbf{p}|}{2}, \frac{1 - |\mathbf{p}|}{2} \right\} \ .$$

---

la descomposición espectral en estados puros ortogonales entre si. Mientras que $x = 0$ corresponde a

$$D_t = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} t & \sqrt{t(1-t)} \\ \sqrt{t(1-t)} & 1-t \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} t & -\sqrt{t(1-t)} \\ -\sqrt{t(1-t)} & 1-t \end{pmatrix}$$

que también es una descomposición en estados puros con pesos iguales. Los valores intermedios de x, $0 < x < t$, proveen descomposiciones en estados no ortogonales entre si con el mayor de los pesos variando continuamente entre $1/2$ y t.

En particular, para que ρ sea puro, i.e. un ortoproyector de espectro $\{1, 0\}$ es necesario y suficiente que $|\mathbf{p}| = 1$, de modo que los estados puros corresponden a la esfera (la superficie de la bola) de radio uno. Recuperamos lo visto en la discusión de la polarización de un spin 1/2. Pero esta observación de que los estados puros corresponden a los puntos extremales (no convexamente descomponibles) de la bola es consecuencia inmediata de que la aplicación $\rho \mapsto \mathbf{p}$ es afin, o sea que a la mezcla de estados le corresponde la misma mezcla de polarizaciones. Efectivamente, si ρ_1 tiene polarización $\mathbf{p}_1$ y ρ_2 tiene polarización $\mathbf{p}_2$ entonces cualquiera sea $t \in [0, 1]$, el estado $t\rho_1 + (1 - t)\rho_2$ se escribe

$$t\rho_1 + (1-t)\rho_2 = \frac{t}{2}\left(\mathbf{1} + \mathbf{p}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) + \frac{1-t}{2}\left(\mathbf{1} + \mathbf{p}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{1} + (t\mathbf{p}_1 + (1-t)\mathbf{p}_2) \cdot \sigma\right)$$

y tiene polarización $t\mathbf{p}_1 + (1 - t)\mathbf{p}_2$. La correspondencia *estado* $\leftrightarrow$ *polarización* tramnsforma la estructura convexa de $\mathfrak{S}(\mathbb{C}^2)$ en la de la bola $\mathcal{B}_3$.
Pero la concordancia es aún mejor. Considere la distancia definida en $\mathfrak{S}(\mathbb{C}^2)$ por[4] $d(\rho, \varphi) := tr(|\rho - \varphi|)$. Entonces, usando que cualquiera sea el vector $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$ tenemos $spec(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \{|\mathbf{a}|, -|\mathbf{a}|\}$, tenemos que si ρ tiene polarización $\mathbf{p}$ y φ tiene polarización $\mathbf{q}$ entonces

$$d(\rho, \varphi) = tr(|\rho - \varphi|) = \frac{1}{2} tr(|(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}|) = |\mathbf{p} - \mathbf{q}| \ ,$$

lo que muestra que la correspondencia *estado* $\leftrightarrow$ *polarización* es *continua* equipando a los estados $\mathfrak{S}(\mathbb{C}^2)$ con la distancia d introducida, y a la bola unitaria con la distancia euclidea usual.

Esto demuestra que la visualización del espacio de estados de un spin 1/2 como la bola unitaria en tres dimensiones es no solo adecuada sino perfecta. Las analogías geométricas discutidas en XXX son entonces totalmente válidas.

Ejercicio 9.2 *Muestre que si* $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$ *entonces* $spec(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \{|\mathbf{a}|, -|\mathbf{a}|\}$.

9.2. Composición

9.2.1. Producto tensorial

9.2.2. Producto tensorial de operadores

`Regla de la cadena` $d(A(\alpha) \otimes B(\alpha))/d\alpha = (dA(\alpha)/d\alpha) \otimes B(\alpha) + A(\alpha) \otimes (dB(\alpha)/d\alpha)$.

[4]Esto es efectivamente una distancia ya que: (1) $d(\rho, \varphi) \geq 0$ con igualdad si y solo si $\rho = \varphi$; (2) $d(\rho, \varphi) = d(\varphi, \rho)$; y (3) [Desigualdad del triángulo] $d(\rho, \varphi) \leq d(\rho, \omega) + d(\omega, \varphi)$. Además [Biconvexidad] $d(t\rho + (1-t)\mu, t\varphi + (1-t)\omega) \leq td(\rho, \varphi) + (1-t)d(\mu, \omega)$.