



BORRADOR

1. Matriz Densidad

Esta formulación matemática es equivalente al vector de estado, pero brinda una mejor descripción de lo comunmente encontrado en mecánica cuántica. El operador densidad proporciona un medio conveniente para la descripción de sistemas cuánticos cuyos estados no se conocen totalmente. Por ejemplo, suponemos que el sistema está en uno de un conjunto de estados $|\psi_i\rangle$ con probabilidad p_i ($\{p_i, |\psi_i\rangle\}$), entonces, el operador densidad se define como

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (1)$$

Ya teniendo el operador densidad, es importante estudiar la caracterización del mismo, que lo distingue matemáticamente de otros operadores. Para ello, enunciamos el **Teorema de Caracterización de Operadores Densidad**

Teorema 1

Sea ρ un operador densidad asociado a un *ensemble* $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ si y solo si satisface

Traza: $\text{tr}\{\rho\} = 1$.

Positividad: ρ es un operador definido positivo¹.

Dado que la matriz es positiva, tiene una descomposición espectral

$$\rho = \sum_j \lambda_j |j\rangle\langle j|. \quad (2)$$

1.1. Postulados

Al inicio de esta sección se habló de que el operador densidad es un equivalente al vector de estado, por lo que, los postulados de la mecánica cuántica pueden ser descritos en términos de este operador densidad.

Postulado 1: Para un sistema aislado se tiene un espacio de Hilbert (Espacio de Estado) descrito por el operador densidad.

Postulado 2: La evolución de un sistema cuántico cerrado, entre los instantes t_1 y t_2 , es descrita por un operador unitario U que depende únicamente de t_1 y t_2 , de modo que

$$\rho = U\rho U^\dagger.$$

¹Una matriz Hermítica cuadrada, se dice **definida positiva** si todos sus valores propios son positivos o, de forma equivalente, si dado un vector $|\phi\rangle$, se cumple que $\langle\rho|\phi|\rho\rangle > 0$.

Postulado 3: Para las mediciones es necesario utilizar los *operadores de medición* M_m . La probabilidad de que m ocurra es de

$$p(m) = \text{tr} \left\{ M_m^\dagger M_m \rho \right\},$$

la cual viene dada por el teorema de probabilidad total² y las probabilidades condicionales $p(m|i)$ definidas de la siguiente forma: $p(m|i) = \left\langle M_m^\dagger M_m \middle| \psi_i \right\rangle \left\langle M_m^\dagger M_m \right\rangle$. El operador densidad luego de la medición

$$\rho_m = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\text{tr} \left\{ M_m^\dagger M_m \rho \right\}}.$$

Postulado 4: El espacio de estado de un sistema compuesto, es el producto tensorial de los espacios de estado de los diferentes sistemas

$$\rho_1 \otimes \cdots \otimes \rho_n.$$

1.2. Operador Densidad Reducido

El operador densidad también nos ayuda como una herramienta para describir subsistemas. Sean los subsistemas A y B cuyo estado esta dado por el operador densidad ρ^{AB} el operador densidad reducido para A es

$$\rho^A = \text{tr}_B \rho^{AB} \quad (3)$$

donde tr_B es un mapeo de operadores conocido como la traza parcial sobre B la cual está definida como

$$\text{tr}_B (|a_1\rangle\langle a_2| \otimes |b_1\rangle\langle b_2|) = |a_1\rangle\langle a_2| \text{tr} (|b_1\rangle\langle b_2|).$$

Esto, también nos hace perder información del subsistema B , pero es una representación útil del subsistema A .

1.3. Descomposición de Schmidt

Teorema 2

Supongamos que $|\psi\rangle$ es un estado puro de un sistema compuesto AB . Existen estados ortonormales $|i_A\rangle$ para el subsistema A y $|i_B\rangle$ para el subsistema B , tales que

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |i_A\rangle\langle i_B|, \quad (4)$$

con $\lambda_i \geq 0$ y $\sum \lambda_i^2 = 1$ llamados coeficientes de Schmidt.

2. Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad

Esta es una técnica numérica dominante al simular sistemas fuertemente correlacionados. El Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG por sus siglas en inglés) es un método variacional pero depende en gran medida de la diagonalización exacta y renormalización numérica (NRG), lo cual minimiza la pérdida de información. Este método es suficientemente inteligente para encontrar la mejor función de onda sin un sesgo externo.

²El teorema de probabilidad total enuncia que, para una partición A_1, A_2, \dots, A_n sobre el espacio muestral y un suceso B sobre el cuales se conocen las probabilidades condicionales $P(B|A_i)$, entonces, la probabilidad del suceso B esta dada como $P(B) = \sum P(B|A_i)P(A_i)$.