BORRADOR

1. Matriz Densidad

JA: Para introducir a la matriz de densidad sugiero que comencés con un ejemplo concreto, por ejemplo polarización de la luz. Mi idea es que elaborés el ejemplo de tal forma que se evidencie un caso en el que el formalismo de la matriz de densidad es más conveniente. Podés agregar una figurita, así también hacés más agradable la lectura

Esta formulación matemática es equivalente al vector de estado, pero brinda una mejor JA: mejor en qué casos? Decir que es mejor es controversial, sólo es una formulación alternativa descripción de lo comunmente encontrado en mecánica cuántica. El operador densidad proporciona un medio JA: marco teórico conventiente para la descripción de sistemas cuánticos cuyos estados no se conocen JA: estadísticamente con certezatotalmente. Por ejemplo, suponemos que el sistema esta JA: 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

$$\rho = \sum_{i} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \tag{1}$$

Ya teniendo el operador densidad, es importante JA: por qué 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

JA: para el informe te toca escribir la prueba de esto Sea ρ un operador densidad asociado a un ensemble $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ si y solo si satisface

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

Positividad: ρ es un operador definido positivo¹.

Dado que la matriz es positiva, tiene una descomposición espectral

$$\rho = \sum_{j} \lambda j |j\rangle\langle j|. \tag{2}$$

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. JA: ??? volvé a leer el postulado 1 porque esto suena muy raro

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 $\langle\rho|\phi|\rho\rangle > 0$.

DMRG 2

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

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

JA: en la expresión hace falta explícita la dependencia de $t_{1,2}$

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

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

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

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

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

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

JA: esto también hay que reformularlo, en función del postulado 1

1.2. Operador Densidad Reducido

JA: para seguir la línea de lo que propuse en la sección anterior, también sugiero que comencés con un ejemplo concreto que motive la necesidad de la matriz de densida reducida. Te toca leer un poco para proponer un ejemplo

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

$$\rho^A = \operatorname{tr}_B \rho^{AB} \tag{3}$$

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

$$\operatorname{tr}_{B}(|a_{1}\rangle\langle a_{2}|\otimes|b_{1}\rangle\langle b_{2}|)=|a_{1}\rangle\langle a_{2}|\operatorname{tr}(|b_{1}\rangle\langle b_{2}|).$$

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

JA: agregar la prueba de que la traza parcial es la única que puede definir a la matriz de densidad reducida

1.3. Descomposición de Schmidt

JA: igual un ejemplo. Aquí quizás va mejor después del teorema. Igual que antes, hace falta la prueba

²El teorema de probabilidad total enuncia que, para una partición A_1, A_2, \ldots, 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 $P(B) = \sum P(B|A_i)P(A_i)$.

DMRG 3

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

$$|\psi\rangle = \sum_{i} |i_A\rangle\langle i_B|, \qquad (4)$$

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

2. Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad

JA: luego discutimos cómo ordenar esta sección. No escribás más que ideas puntuales por ahora

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.