

Apuntes de mecánica cuántica



It's turtles all the way down!

POPULAR

Índice general

I Información cuántica 3

- 1 Postulados 5*
- 2 Estados mezcla, operador densidad 15*
- 3 Estados compuestos 21*
- 4 Experimento EPR 27*
- 5 Computación cuántica 31*

II Mecánica cuántica relativista 37

- 6 Mecánica cuántica no relativista de Feynmann 39*
- 7 Breve repaso de la relatividad especial 45*
- 8 La ecuación de Klein-Gordon 49*
- 9 La ecuación de Dirac 53*

Parte I

Información cuántica

1

Postulados

1.1 Espacio de estados

En mecánica clásica se trabaja con el espacio de fases; un sistema viene completamente descrito por un punto $\{q_i, p_i\}$ en dicho espacio. La evolución viene descrita por las ecuaciones de Hamilton.

En mecánica cuántica, se emplea otra descripción. En lugar de ser el sistema un punto en el espacio de fases, el sistema se describe mediante un vector en un espacio de Hilbert \mathcal{H} , complejo y completo¹, que está dotado de un producto escalar complejo sobre los kets $\langle\psi_i|\psi_j\rangle \in \mathbb{C}$. Este producto vectorial tiene ciertas propiedades:

- $\overline{\langle\psi_1|\psi_2\rangle} = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$
- Es lineal en el segundo argumento. $\langle\psi_1|\lambda\varphi_1 + \mu\varphi_2\rangle = \lambda\langle\psi_1|\varphi_1\rangle + \mu\langle\psi_1|\varphi_2\rangle$. En el primero, λ, μ salen conjugadas.
- $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ y $\langle\psi|\psi\rangle = 0 \rightarrow |\psi\rangle = 0$

Los estados de los sistemas estarán siempre normalizados; por ejemplo, $|\psi\rangle = 0$ es un posible vector del espacio de Hilbert pero no es un estado² (su norma no es $\langle\psi|\psi\rangle = 1$).

Si dos vectores son iguales salvo un factor de fase, describen el mismo estado³. Esto no ocurría en mecánica clásica, donde dos puntos distintos del espacio de fases son dos estados distintos sin excepción.

¹ Un espacio de Hilbert de dimensión infinita es completo si todas las sucesiones de Cauchy convergen. Un ejemplo de espacio completo es \mathbb{R} , y un ejemplo de espacio no completo \mathbb{Q} .

² No obstante, se empleará en ocasiones. En dichos momentos, no se referirá al cero, si no a un estado real análogo, como el de menor energía.

³ Ya que no hay manera física de distinguirlos.

EJEMPLO: Estados de un fotón

Olvidemos por un segundo su frecuencia, y tengamos únicamente en cuenta su polarización. Analizamos los estados de polarización de un fotón: polarización vertical ($|\uparrow\rangle$) y horizontal ($|\leftrightarrow\rangle$). Con dos polarizadores podemos ver que $\langle\uparrow|\leftrightarrow\rangle = 0$.

Nuestro espacio de Hilbert es

$$\mathcal{H} = \{\alpha|\leftrightarrow\rangle + \beta|\uparrow\rangle \mid \alpha, \beta \in \mathbb{C}\} \quad (1.1)$$

Estados como la polarización oblicua son expresables en kets del estilo de $|\nearrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\leftrightarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle$. De nuevo mediante métodos experimentales, podemos hallar el módulo del producto escalar como $|\langle\leftrightarrow|\nearrow\rangle|^2 = 1/2$.

Podemos calcular la expresión del vector perpendicular a $|\nearrow\rangle$ de ma-

nera inmediata como $|\nearrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\leftrightarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle$. De forma general,

$$|\varphi_{\nearrow}\rangle = \cos \varphi |\leftrightarrow\rangle + \sin \varphi |\downarrow\rangle \quad (1.2)$$

Coeficientes complejos implicarán polarizaciones elípticas:

$$|\odot\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\leftrightarrow\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \quad (1.3)$$

$$|\ominus\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\leftrightarrow\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \quad (1.4)$$

Siempre tenemos que $|a|^2 + |b|^2 = 1$ para cumplir la condición de normalización.

EJEMPLO: Espín $\frac{1}{2}$

Consideremos los estados de espín $\frac{1}{2}$ en \hat{z} , $|\uparrow\rangle_z$ y $|\downarrow\rangle_z$. Experimentalmente se tiene que su producto escalar es nulo. Podemos describir $|\uparrow\rangle_x$, estado perpendicular, como $|\uparrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_z + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_z$, y su “opuesto” como $|\downarrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_z - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_z$.

EJEMPLO: Espín 1

Otro conjunto de estados son los de espín 1. En este caso el espacio de Hilbert (base en \hat{z} , aunque no se diga explícitamente) será

$$\mathcal{H} = \{\alpha |\uparrow\rangle + \beta |\circ\rangle + \gamma |\downarrow\rangle\} \quad (1.5)$$

EJEMPLO: Partícula en la recta real

En este caso

$$\mathcal{H} = \left\{ \Psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \left| \int_{\mathbb{R}} |\Psi_{(x)}|^2 dx < \infty \right. \right\} \quad (1.6)$$

La dimensión de este espacio es infinita, a diferencia de los ejemplos anteriores.

EJEMPLO: Partícula en un intervalo

Se tiene de nuevo un espacio de dimensión infinita:

$$\mathcal{H} = \left\{ \Psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \left| \int_0^L |\Psi_{(x)}|^2 dx < \infty \right. \right\} \quad (1.7)$$

EJEMPLO: Partícula 3D

Obtenemos otro espacio de dimensión infinita:

$$\mathcal{H} = \left\{ \Psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi_{(x)}|^2 dx < \infty \right\} \quad (1.8)$$

Los últimos tres ejemplos, a pesar de tener base infinita, son ejemplos de base separable. Esto implica que son escribibles como un set $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle\}$ tal que $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_i^j$. De esta forma, se puede escribir

$$\mathcal{H} = \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n |\psi_n\rangle \mid \sum_n |\alpha_n|^2 < \infty \right\} \quad (1.9)$$

1.2 Evolución

Utilizamos un operador $\mathcal{H} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ lineal, que puede tener dependencia temporal, tal que la evolución del sistema venga dada por

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \mathcal{H} |\Psi\rangle \quad (1.10)$$

llamada *ecuación de Schrödinger*.

Este \mathcal{H} es su propio adjunto. Definimos adjunto como $\langle\Psi_1|\mathcal{H}\Psi_2\rangle = \langle\mathcal{H}^\dagger\Psi_1|\Psi_2\rangle$, y tenemos en este caso $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\dagger$. En dimensión finita siempre existe un operador así, y es único.

Definimos el *operador evolución* $U(t, t_0)$, caracterizado por $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$ y $U(t_0, t_0) = \mathbb{I}$. Ha de satisfacer

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = \mathcal{H}(t)U(t, t_0) \quad (1.11)$$

Físicamente, es importante que este operador sea unitario para que se mantenga la norma de los estados, ya que $U^\dagger = U^{-1} \rightarrow \langle U\Psi_1|U\Psi_2\rangle = \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$ y por tanto $||\Psi(t)\rangle|| = ||\Psi(t_0)\rangle||$.

Es muy común que \mathcal{H} no dependa del tiempo. En tal caso, construir $U(t, t_0)$ es simple:

$$U(t, t_0) = \exp\left(\frac{-i(t-t_0)}{\hbar} \mathcal{H}\right) \quad (1.12)$$

Si $[\mathcal{H}(t), \mathcal{H}(t')] = 0$, también es sencillo calcular $U(t, t_0)$:

$$U(t, t_0) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathcal{H}(t) dt\right) \quad (1.13)$$

Esto no es demasiado común⁴, y ha de comprobarse siempre.

La U del operador evolución corresponde a *unitario*. Esto significa que su adjunto U^\dagger es su inverso.

⁴ Un contraejemplo sería

$$\mathcal{H}(t) = \sigma_x + t\sigma_y,$$

donde las σ_i son las matrices de Pauli.

EJEMPLO: Campo magnético

El espacio de Hilbert será $\mathcal{H} = \{\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle\}$. Suponemos un \mathbf{B} constante, con un hamiltoniano $\mathcal{H} = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{\mu}$ donde $\mathbf{\mu} = -g \frac{e}{2m_e} \mathbf{S}$, con $S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$. g es el *factor* g , y puede deducirse teóricamente de la ecuación de Dirac. Para una partícula que da vueltas vale 1, pero en el caso

del electrón (donde proviene del espín) debería ser 2. Experimentalmente, se obtiene $2.00231930436153(53)$, discrepancia explicable por la creación y destrucción espontánea de electrones, entre otros factores.

Supongamos que $\mathbf{B} = B\hat{x}$. Podemos escribir el hamiltoniano como

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}g\mu_B B\sigma_x \quad (1.14)$$

donde $\mu_B = 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV T}^{-1}$ es el *magnetón de Bohr*. La ecuación de Schrödinger queda

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2}g\mu_B B\sigma_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

Como $\frac{1}{2}g\mu_B B\sigma_x$ no depende del tiempo, la solución es una exponencial:

$$\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = e^{-i\Omega t \frac{1}{2}\sigma_x} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\Omega t}{2} & -i \sin \frac{\Omega t}{2} \\ -i \sin \frac{\Omega t}{2} & \cos \frac{\Omega t}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

donde $\Omega = \frac{g\mu_B B}{\hbar} = \gamma B$. Obtenemos una precesión de Larmor. El $1/2$ obtenido en el resultado no implica que el espín gire a la mitad de la velocidad que debiera. Es un factor que hace que ante una vuelta de 2π la función de ondas sea $R_{2\pi}\Psi = -\Psi$, por el carácter fermiónico de los electrones.

Supongamos un $\Psi(t=0) = |\uparrow\rangle$. Con el tiempo, obtenemos

$$|\Psi(t)\rangle = \cos \frac{\Omega t}{2} |\uparrow\rangle - i \sin \frac{\Omega t}{2} |\downarrow\rangle \quad (1.17)$$

consistente con una rotación del espín en el eje \hat{x} .

Hasta ahora, se ha resuelto la ecuación de Schrödinger dando la solución explícitamente. Muchas veces, lo que se hace es buscar los vectores propios del hamiltoniano, resolviendo

$$\mathcal{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (1.18)$$

De forma que podamos escribir los estados en función de los φ_i como $|\Psi\rangle = \sum_n \alpha_n |\varphi_n\rangle$ y reescribir la ecuación de Schrödinger como

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \alpha_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\varphi_n\rangle \quad (1.19)$$

Notar que este método sólo es válido si \mathcal{H} no depende del tiempo.

μ es el *momento magnético del electrón*. Para una partícula de carga q girando con un radio L y velocidad \mathbf{v} bajo un campo \mathbf{B} , la fuerza de lorentz es $\mathbf{F} = \frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}$ y

$$\mu = \frac{q}{2m} \mathbf{L}$$

EJEMPLO: Oscilador armónico

Es un ejemplo de dimensión infinita. El hamiltoniano será

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2m} P^2 + \frac{1}{2} X^2 \\ &= \frac{1}{2m} (P^2 + \omega^2 X^2) \\ &= \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2) \end{aligned} \quad (1.20)$$

donde se han empleado los operadores de creación y destrucción, que cumplen $[a, a^\dagger] = \mathbb{I}$ y se definen como

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}} P \quad (1.21)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}} P \quad (1.22)$$

El espacio de Hilbert, siendo laxos, será

$$\mathcal{H} \sim \left\{ \Psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \left| \int |\Psi(x)|^2 dx < \infty \right. \right\} \quad (1.23)$$

El primer autovalor que se obtiene es $a|0\rangle = 0$. Actuando sobre este “vacío” (que no es una función de ondas válida), obtenemos nuevos estados, como el $a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$. En general,

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (1.24)$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (1.25)$$

La energía crece con el número de excitaciones, $\mathcal{H}|n\rangle = (n + 1/2\hbar\omega)|n\rangle$.

Si bien a^\dagger no tiene vectores propios, el operador número N sí. Esto se debe a que ningún estado $|n\rangle$ es idéntico a su $|n+1\rangle$. No obstante, a sí que tiene un estado propio, el $|0\rangle$, ya que $a|0\rangle = |0\rangle$.

1.3 Medida

A diferencia de la evolución, es un tema más amplio y complicado de formalizar. Para ser capaces de tener una teoría formal, utilizaremos conceptos de medida lo más simples posibles; en lugar de formalizar el concepto abstracto de *medida* formalizaremos experimentos concretos.

El primer experimento que consideraremos, el de Stern-Gerlach, data de 1922. En él, pasamos espines⁵ por un gradiente de campo magnético en \hat{z} , sin carga para evitar fuerzas de Lorentz.

Tendremos un hamiltoniano $\mathcal{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ y una fuerza $\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})$. En el eje \hat{z} ,

$$F_z = -\mu_B \partial_z (\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(z)) \quad (1.26)$$

Para $|\uparrow\rangle_z$ la fuerza es $F_z = -\mu_B (\partial_z B_z) > 0$, de manera que las partículas se deflexionan hacia \hat{z} positivo, y al revés para $|\downarrow\rangle_z$. La sorpresa es que si introducimos un $|\uparrow\rangle_x$ en el aparato, en lugar de no sufrir deflexión, se deflexionan con igual probabilidad hacia arriba o hacia abajo, como si fueran $|\uparrow\rangle_z$ o $|\downarrow\rangle_z$.

Además, si encadenamos varios aparatos, se conserva la “polarización” de los espines; si se conecta la salida $|\uparrow\rangle_z$ de un aparato al otro, en el segundo no se obtiene ningún $|\downarrow\rangle_z$.

Formalicemos el experimento:

1. A cada aparato de Stern-Gerlach se le asigna un operador autoadjunto A que llamamos *observable*⁶.

Podemos ver que a^\dagger no tiene vectores propios. Si planteamos

$$a^\dagger \sum_n \alpha_n |n\rangle = \lambda \sum_n \alpha_n |n\rangle$$

$$\sum_n \alpha_n \sqrt{n+1} |n+1\rangle = \lambda \sum_n \alpha_n |n\rangle$$

las únicas soluciones son $a_0 = 0$ o $\lambda = 0$.

- Si $\lambda \neq 0$, obtenemos que $a_0 = 0 \rightarrow a_1 = 0 \rightarrow \dots$
- Si $\lambda = 0$, obtenemos que $\alpha_i = 0$.

⁵ Clásicamente, se utilizan átomos de plata. Son neutros y tienen un espín 1/2 debido al último electrón de su configuración, $4d^{10}5s^1$.

⁶ En física clásica, sería una función del espacio de fases.

2. Los posibles resultados numéricos de la medida son los valores propios de A , $\{a_1, \dots, a_n\}$.
3. Dado un resultado a_n el estado final es el vector propio asociado a ese valor propio, $|\varphi_n\rangle$.
4. No se puede predecir que resultado va a salir, pero sí las probabilidades asociadas a cada resultado a_n : $|\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2$.

Si bien la evolución vista en la sección 1.2 es suave, reversible, unitaria, etc. la vista en el fenómeno de la medida no. Es incómodo considerar dos tipos distintos de evolución, pero en la práctica es necesario considerar el proceso de medida.

EJEMPLO: Aparato de Stern-Gerlach

Apliquemos estos postulados al experimento de Stern-Gerlach. Los posibles resultados son $\{1/2, -1/2\}$ y los posibles estados finales $\{|\uparrow\rangle_z, |\downarrow\rangle_z\}$. Nuestro operador observable es

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} |\uparrow\rangle \langle\uparrow| - \frac{1}{2} |\downarrow\rangle \langle\downarrow| \\ &= \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_z \end{aligned} \quad (1.27)$$

Consideramos un estado $|\uparrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_z + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_z$, y obtenemos una probabilidad para $1/2$ de valor $|\langle\uparrow_z|\uparrow_x\rangle|^2 = 1/2$. Por lo tanto, se ven dos sombras iguales “arriba” y “abajo” en la pantalla del experimento.

Para un estado $|\uparrow(\theta, \varphi)\rangle = |\uparrow(\theta, \varphi)\rangle = \cos \theta/2 |\uparrow\rangle_z + \sin \theta/2 e^{i\varphi} |\downarrow\rangle_z$ la probabilidad de medir $1/2$ será

$$|\langle\uparrow_z|\uparrow(\theta, \varphi)\rangle| = \cos^2 \theta/2 \quad (1.28)$$

y de medir $-1/2$

$$|\langle\downarrow_z|\uparrow(\theta, \varphi)\rangle| = \sin^2 \theta/2 \quad (1.29)$$

Nos planteamos que supone que el operador A sea degenerado en los postulados vistos, $A|\varphi_n^{(r)}\rangle = a_n|\varphi_n^{(r)}\rangle$ con $\{|\varphi_n^{(1)}\rangle, \dots, |\varphi_n^{(R)}\rangle\}$ base ortonormal.

Para ello, definimos el proyector $P_n = \sum_{r=1}^R |\varphi_n^{(r)}\rangle \langle\varphi_n^{(r)}|$, que cumple $P_n^2 = P_n$ y $P_n^\dagger = P_n$. El estado final estará dado por

$$|\Psi\rangle_f = \frac{P_n |\Psi\rangle}{\|P_n |\Psi\rangle\|} \quad (1.30)$$

con probabilidad

$$\begin{aligned} p_n &= \sum_{r=1}^R |\langle\varphi_n^{(r)}|\Psi\rangle|^2 \\ &= \|P_n |\Psi\rangle\|^2 \\ &= \langle\Psi|P_n|\Psi\rangle \end{aligned} \quad (1.31)$$

Notar que ahora el estado final depende del inicial, cosa que para los operadores no degenerados no ocurría.

En lo que sigue, nos olvidaremos del caso degenerado, que se dejará como ejercicio para el alumno.

Demostremos que la suma de las probabilidades está normalizada, $\sum_i p_i = 1$.

$$\begin{aligned}\sum_n p_n &= \sum_{n=1}^N |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 = \sum_{n=1}^N \langle \Psi | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \left(\sum_{n=1}^N |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \right) | \Psi \rangle\end{aligned}\quad (1.32)$$

Los autovectores de un operador autoadjunto forman una base ortogonal, que cumplen la identidad de Parseval: $\sum_{n=1}^N |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = \mathbb{I}$. Obtenemos

$$\sum_n p_n = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \quad \blacksquare \quad (1.33)$$

Ya que Ψ está normalizado.

Por esto, realizaremos un tratamiento estadístico de los resultados para obtener información del sistema.

Valor esperado Se define $\langle A \rangle = \sum_{n=1}^N p_n a_n$, para una distribución discreta⁷.

⁷ La mayoría de los sistemas que se estudiarán son de dimensión finita.

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \sum_{n=1}^N a_n \langle \Psi | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \left(\sum_{n=1}^N a_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \right) | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | A | \Psi \rangle\end{aligned}\quad (1.34)$$

donde se ha utilizado que $\sum_{n=1}^N a_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$ no es más que el operador A en descompuesto en su espectro⁸.

⁸ Se puede comprobar fácilmente haciéndolo actuar sobre los elementos de su base.

EJEMPLO: Valor esperado en espines

Utilizamos el vector $|\uparrow(\theta, \varphi)\rangle$, definido anteriormente, y nos preguntamos su valor esperado bajo el operador S_z .

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar} \langle S_z \rangle &= \langle \uparrow(\theta, \varphi) | S_z | \uparrow(\theta, \varphi) \rangle \\ &= \dots = \frac{1}{2} \cos^2 \theta/2 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta/2 \\ &= \frac{1}{2} \cos \theta\end{aligned}\quad (1.35)$$

Nos preguntamos si ocurre lo mismo para S_y y S_x . En efecto,

$$\langle S_x \rangle = \dots = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi \quad (1.36)$$

$$\langle S_y \rangle = \dots = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi \quad (1.37)$$

Geoméricamente, estas proyecciones tienen sentido, tras dibujar el espín como una flecha en \mathbb{R}^3 . Para espín 1, los resultados son similares.

EJEMPLO: Valor esperado en estados coherentes

Tenemos un estado coherente $|\chi_\alpha\rangle = e^{-1/2|\alpha|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$, y nos preguntamos el valor esperado de $\langle X \rangle$ y de $\langle P \rangle$. Para simplificar las cuentas escribimos X, P en función de los operadores de creación y destrucción:

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a) \quad (1.38)$$

$$P = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a) \quad (1.39)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle \chi_\alpha | a | \chi_\alpha \rangle + \langle \chi_\alpha | a^\dagger | \chi_\alpha \rangle) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha \langle \chi_\alpha | \chi_\alpha \rangle + \bar{\alpha} \langle \chi_\alpha | \chi_\alpha \rangle) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha \langle \chi_\alpha | \chi_\alpha \rangle + \bar{\alpha} \langle \chi_\alpha | \chi_\alpha \rangle) \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \Re(\alpha) \end{aligned} \quad (1.40)$$

donde se ha utilizado $a |\chi_\alpha\rangle = \alpha |\chi_\alpha\rangle$. Para el momento obtenemos la parte imaginaria:

$$\langle P \rangle = \sqrt{2m\omega\hbar} \Im(\alpha) \quad (1.41)$$

Los estados coherentes presentan similitud con el oscilador clásico en cuanto a que su α describe un círculo en el “plano de fases”, con $\Re\alpha$ siendo x e $\Im\alpha$ siendo p .

Una vez calculados los valores esperados, es natural pasar a calcular las “incertidumbres”, las “varianzas” de los estados bajo los operadores. Es algo que sale de forma natural del formalismo.

1.4 Principio de indeterminación de Heisenberg

Calculemos el error cuadrático medio de un observable:

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \sum_{n=1}^N p_n (a_n - \langle a \rangle)^2 \\ &= \left(\sum_{n=1}^N p_n a_n^2 \right) - \langle a \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | A^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | A | \Psi \rangle^2 \end{aligned} \quad (1.42)$$

Vemos que $(\Delta A)^2 = \langle \Psi_A | \Psi_A \rangle$, donde $|\Psi_A\rangle = (A - \langle A \rangle \mathbb{I}) |\Psi\rangle$. Definimos el funcional lineal $\langle \Psi_A | : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, que mapea $|\varphi\rangle \rightarrow \langle \Psi_A | \varphi \rangle$.

Buscamos el valor de $(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2$ con lo recién visto. Vemos que es simplemente

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 &= \langle \Psi_A | \Psi_A \rangle \langle \Psi_B | \Psi_B \rangle \\ &\geq |\langle \Psi_A | \Psi_B \rangle|^2 \end{aligned} \quad (1.43)$$

Esta restricción es más fuerte que el principio de Heisenberg normalmente utilizado:

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 &\geq |\langle \Psi_A | \Psi_B \rangle|^2 \geq (\Im \langle \Psi_A | \Psi_B \rangle)^2 \\ &= \frac{1}{4} |\langle \Psi_A | \Psi_B \rangle - \langle \Psi_B | \Psi_A \rangle|^2 \end{aligned} \quad (1.44)$$

Calculamos $\langle \Psi_A | \Psi_B \rangle$ utilizando sus definiciones y obtenemos⁹ $\langle \Psi | AB | \Psi \rangle - \langle \Psi | A | \Psi \rangle \langle \Psi | B | \Psi \rangle$. Continuando la ecuación para $(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2$ con este resultado, obtenemos la *relación de incertidumbre de Heisenberg*:

⁹ Se emplea que Ψ está normalizado y que A, B son autoadjuntos.

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (1.45)$$

Para $[X, P] = i\hbar$, por ejemplo, obtenemos $\Delta X \cdot \Delta P \geq \hbar/2$.

EJEMPLO: Incertidumbre en los espines

Como es usual, empleamos $|\uparrow(\theta, \varphi)\rangle$. Como operadores, emplearemos $A = S_z$ y $B = S_x$, que poseen valores esperados $\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta$ y $\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi$. Para sus cuadrados, obtenemos $\langle S_z^2 \rangle = \langle S_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$.

Calculemos ΔS_z :

$$\begin{aligned} (\Delta S_z)^2 &= \langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} (1 - \cos^2 \theta) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \sin^2 \theta \end{aligned} \quad (1.46)$$

De forma similar, obtenemos $(\Delta S_x)^2 = \frac{\hbar^2}{4} (1 - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi)$.

La relación de incertidumbre queda como

$$(\Delta S_z)(\Delta S_x) = \frac{\hbar^2}{4} \sin \theta \sqrt{1 - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi} \quad (1.47)$$

El conmutador de ambos operadores es $[S_z, S_x] = \frac{i\hbar}{2} S_y$. Calculamos $\langle S_y \rangle$ como $\frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi$, de forma que

$$\frac{1}{2} \left| \left\langle \frac{i\hbar}{2} S_y \right\rangle \right| = \frac{\hbar^2}{4} \sin \theta \sin \varphi \quad (1.48)$$

Podemos ver que se satisface la relación de incertidumbre.

Vemos que $(\Delta S_z)(\Delta S_x)$ es nulo si $\theta = 0, \pi$ o si $\theta = \pm\pi/2, \varphi = 0, \pi$. Si el estado es propio de alguno de los operadores, no hay incertidumbre.

EJEMPLO: Incertidumbre en los estados coherentes

Repetimos el análisis anterior sobre S_x, S_z con los estados coherentes $|\chi_\alpha\rangle$ y los operadores X, P , que escribiremos de nuevo en función de a, a^\dagger como en las ecuaciones (1.38), (1.39).

Obtenemos de nuevo $\langle X \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \Re(\alpha)$, y

$$\begin{aligned}\langle X^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle a^2 + (a^\dagger)^2 + a^\dagger + aa^\dagger \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\alpha^2 + \bar{\alpha}^2 + 2\bar{\alpha}\alpha + 1) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} ((\alpha + \bar{\alpha})^2 + 1)\end{aligned}\tag{1.49}$$

donde se ha utilizado que $[a, a^\dagger] = 1$. Vemos que obtenemos $\Delta X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$, independiente del estado.

El caso ΔP^2 es similar, y obtenemos $\frac{m\omega\hbar}{2}$. La relación de incertidumbre queda como

$$\Delta X^2 \cdot \Delta P^2 = \frac{\hbar}{2}\tag{1.50}$$

Obtenemos la mínima incertidumbre posible para un oscilador armónico.

2

Estados mezcla, operador densidad

Supongamos que tenemos varios espines distintos en una caja, y se quiere medir un observable. Conocemos la frecuencia de cada población (por ejemplo, espines *up* y *down*) gracias a algo como la ley de Boltzmann, $r_1 = p(|\uparrow\rangle)$ y $r_2 = p(|\downarrow\rangle)$.

El valor medio del observable para el sistema será

$$\langle A \rangle = r_1 \langle \uparrow | A | \uparrow \rangle + r_2 \langle \downarrow | A | \downarrow \rangle \quad (2.1)$$

En general, teniendo el estado $|\Psi_n\rangle$ con frecuencia r_n ,

$$\langle A \rangle = \sum_n r_n \langle \Psi_n | A | \Psi_n \rangle \quad (2.2)$$

Nos preguntamos si existe una forma más sintética de describir este procedimiento. Dicha forma existe, y se basa en el *operador densidad*.

2.1 Operador densidad

Tenemos varios sistemas cuánticos (átomos, por ejemplo) en un recinto cerrado. Son distintos, pero conocemos qué proporción r_N hay de cada estado $|\Psi_N\rangle$. Se tiene $r_i \geq 0$ y $\sum_i r_i = 1$.

Nos preguntamos el valor esperado de un operador A . Como conocemos $\langle \Psi_i | A | \Psi_i \rangle$, escribimos

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n p(\Psi_n) \cdot \langle A \rangle_n \\ &= \sum_n r_n \langle \Psi_n | A | \Psi_n \rangle \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde $\langle A_n \rangle = \langle \Psi_n | A | \Psi_n \rangle$. Existe una manera más concisa de trabajar, sin necesidad de hacer sumas infinitas, introduciendo el *operador densidad*:

$$\rho = \sum_n r_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|, \quad (2.4)$$

donde $r \in \mathbb{R}^+$ y $\sum_i r_i = 1$. Con él, $\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A)$.

Definimos una base ortonormal $\{|\Psi\rangle, \varphi_1, \dots, \varphi_N\}$. Con ella,

$$\begin{aligned} \text{tr}(|\Psi\rangle \langle \Psi| A) &= \sum_i \langle \varphi_i | (|\Psi\rangle \langle \Psi| A) | \varphi_i \rangle \\ &= \sum_i \langle \varphi_i | \Psi \rangle \langle \Psi | A | \varphi_i \rangle \\ &= \langle \Psi | \Psi \rangle \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle \blacksquare \end{aligned} \quad (2.5)$$

La traza de A es independiente de la base escogida. En bases infinitas, definimos operador de *clase traza* como aquel en que $\text{tr} A = \sum_i \langle \varphi_i | A | \varphi_i \rangle$ converge. Además, las trazas son cíclicas: $\text{tr} A_1 A_2 A_3 = \text{tr} A_3 A_1 A_2 \neq \text{tr} A_3 A_2 A_1$.

Se ha demostrado sólo para vectores normalizados, pero si se cumple para ellos escala perfectamente para estados sin normalizar.

Nos preguntamos que propiedades ha de tener ρ para ser un operador densidad, de \mathcal{H} en \mathcal{H} .

1. Sus elementos son proyectores multiplicados por números reales, así que es autoadjunto: $\rho = \rho^\dagger$.
2. Los r_i son positivos, así que es semidefinido positivo. Todos sus autovalores son positivos y reales, y $\langle \Psi | \rho | \Psi \rangle \geq 0, \forall \Psi$.
3. Las r_i han de sumar uno. Por lo tanto, $\text{tr} \rho = 1$.

EJEMPLO: Estado puro

Cojamos como estado $\{|\uparrow\rangle_x\}$ correspondiente a un conocimiento total sobre el estado del espín.

El operador densidad de estados será

$$\begin{aligned} \rho_1 &= |\uparrow\rangle_x \langle\uparrow|_x = \\ &= \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle_z \langle\uparrow|_z + |\uparrow\rangle_z \langle\downarrow|_z + |\downarrow\rangle_z \langle\uparrow|_z + |\downarrow\rangle_z \langle\downarrow|_z) \\ &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.6)$$

inmediato tras escribir $|\uparrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_z + |\downarrow\rangle_z)$.

EJEMPLO: Estado completamente incierto

Cojamos como estado $\{\frac{1}{2} |\uparrow\rangle_z, \frac{1}{2} |\downarrow\rangle_z\}$. El operador densidad de estados será

$$\rho_2 = \dots = \frac{1}{2} \mathbb{I} \quad (2.7)$$

EJEMPLO: Otros estados

Cojamos como estado $\{\frac{1}{3} |\uparrow\rangle_z, \frac{1}{3} |\uparrow\rangle_y, \frac{1}{3} |\uparrow\rangle_x\}$. El operador densidad de estados será, tras las correspondientes operaciones

$$\rho_3 = \dots = \frac{1}{2} \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4 & 1-i \\ 1+i & 2 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

EJEMPLO: Mezcla termodinámica

Cojamos como estado $\{\frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} |E_n\rangle\}$. El operador densidad de esta-

dos será

$$\rho_4 = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}}}{\text{tr}(e^{-\beta \mathcal{H}})} \quad (2.9)$$

Nos preguntamos si podemos definir “cómo de mezclado” está un estado, para distinguir los puros. Notamos que la ρ de un estado puro es siempre un proyector $|\Psi\rangle\langle\Psi|$, y notamos que éstos son idempotentes.

ρ^2 será, utilizando su definición y una base de $|\varphi_n\rangle$ ortogonales, $\rho^2 = \sum_n r_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$. Como $\sum_n (r_n \geq 0) = 1$, al elevarlos al cuadrado deben disminuir. Por lo tanto, $\text{tr} \rho^2$ (también llamada *pureza*), ha de ser la unidad para estados puros y menor para estados mezcla.

En los ejemplos anteriores, se obtienen purezas para ρ_1, ρ_2, ρ_3 de valor 1, 0.5 y $2/3$. En general hay infinitas maneras de crear una ρ . Esto implica que, por ejemplo, no se puede distinguir entre una mezcla a partes iguales de espines *up* y *down* o una de espines $|\uparrow\rangle_x, |\downarrow\rangle_x$, tienen idéntica ρ .

También podemos describir mezclas por su entropía $S(\rho)$,

$$S(\rho) = -\text{tr}(\rho \log \rho) = -\sum_n r_n \log r_n \quad (2.10)$$

En un estado puro obtenemos $S(\rho) = 0$. En estados impuros como los anteriores, obtenemos $S(\rho_2) = \log 2 \simeq 0.69$ y $S(\rho_3) \simeq 0.52$.

Para ρ_4 , obtenemos

$$\begin{aligned} S(\rho_4) &= -\sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}} (-\beta E_n - \log \mathcal{Z}) \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_n \beta E_n e^{-\beta E_n} + \log \mathcal{Z} \\ &= \beta U + \log \mathcal{Z} \end{aligned} \quad (2.11)$$

donde U es el valor esperado de la energía.

En analogía con los postulados de la mecánica cuántica vistos, nos preguntamos como evoluciona la matriz densidad.

2.2 Evolución

Investigamos la evolución de ρ bajo un hamiltoniano \mathcal{H} , para hallar su $i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t}$.

Escribimos

$$\rho(t=0) = \sum_n r_n |\varphi_n(t=0)\rangle\langle\varphi_n(t=0)| \quad (2.12)$$

$$\rho(t) = \sum_n r_n |\varphi_n(t)\rangle\langle\varphi_n(t)| \quad (2.13)$$

Conocemos las soluciones de φ_n gracias a la ecuación de Schrödinger, así que podemos ver que

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_n r_n \left(i\hbar \frac{\partial |\varphi_n\rangle}{\partial t} \langle\varphi_n| + i\hbar |\varphi_n\rangle \cdot \frac{\partial \langle\varphi_n|}{\partial t} \right) = \dots \quad (2.14)$$

De la ecuación de Schrödinger, utilizando que \mathcal{H} es autoadjunto, podemos

Notar como para una mezcla de tres estados la pureza no es inferior a la de una mezcla de dos estados, sino superior. En general, la pureza tiene una cota inferior dada por la dimensión del espacio de Hilbert.

En el cálculo de las entropías se supondrá $0 \log 0 = 0$.

Notar que al ser el operador evolución U unitario si los $\varphi_n(t=0)$ eran ortonormales los $\varphi_n(t)$ seguirán siéndolo.

ver que $i\hbar \frac{\partial \langle \Psi |}{\partial t} = \langle \psi | \mathcal{H}$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \dots &= \sum_n r_n \left[\mathcal{H} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| - |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \mathcal{H} \right] \\ &= \mathcal{H} \left(\sum_n r_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \right) - \left(\sum_n r_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \right) \mathcal{H} \\ &= [\mathcal{H}, \rho] \end{aligned} \quad (2.15)$$

A continuación, formulamos los postulados de medición en el contexto de operadores densidad.

2.3 Medida

En el formalismo anterior se partía por definir el aparato de medida como un observable A descompuesto en su espectro $\sum_n a_n P_n$. Los resultados de la medición, si bien inciertos, serán necesariamente uno de los a_n con probabilidad $p_n = \|P_n |\Psi\rangle\|^2$.

A continuación, tratamos de reformular estos postulados para mezclas de estados. Para ello, simplemente escribimos

$$\begin{aligned} p(a_n) &= |P_n |\Psi\rangle|^2 = \langle \Psi | P_n P_n | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle = \text{tr}(|\Psi\rangle \langle \Psi| P_n) \\ &= \text{tr}(\rho P_n) \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde se ha utilizado que un escalar es idéntico a su traza, y la propiedad “cíclica” de la traza.

En lugar de obtener estados $P_n |\Psi\rangle$ tras la medida, obtendremos estados mezcla $(P_n |\Psi\rangle)(\langle \Psi| P) = P_n \rho P_n$. Teniendo en cuenta la normalización,

$$\Psi \xrightarrow{A} \frac{P_n \rho P_n}{\text{tr}(\rho P_n)} \quad (2.17)$$

Hasta ahora solo se han trabajado estados puros, pero como se verá más adelante las fórmulas son idénticas para estados mezcla.

Para obtener la de $p(a_n)$, utilizamos la ecuación de la probabilidad condicional:

$$\begin{aligned} p(a_n) &= \sum_i p(|\Psi_i\rangle) p(a_n | |\Psi_i\rangle) = \sum_i r_i \text{tr}(|\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| P_n) \\ &= \text{tr} \left[\underbrace{\left(\sum_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| \right)}_{\rho} P_n \right] = \text{tr}(\rho P_n) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Veamos ahora el estado final que se obtendrá. Sea ρ_n la matriz de densidad que se obtiene cuando el resultado de la medida es a_n ,

$$\rho_n = \sum_i p(|\Psi_i\rangle | a_n) \frac{P_n |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| P_n}{\text{tr}(P_n |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|)} \quad (2.19)$$

Calculamos la probabilidad $p(\Psi_i | a_n)$ con el teorema de Bayes:

$$\begin{aligned} p(\Psi_i | a_n) &= \frac{p(\Psi_i \wedge a_n)}{p(a_n)} = \frac{p(a_n | \Psi_i) p(\Psi_i)}{p(a_n)} \\ &= \frac{\text{tr}(|\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| P_n) r_i}{\text{tr}(\rho P_n)} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Si bien estrictamente se normalizaría la función con $\text{tr}(P_n |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| P_n)$, la propiedad cíclica de la traza nos dice que eso sería igual a $\text{tr}(P_n^2 |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|) = \text{tr}(P_n |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|)$.

Por lo tanto,

$$\rho_n = \sum_i \frac{\text{tr}(|\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|P_n)r_i}{\text{tr}(\rho P_n)} \frac{P_n |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| P_n}{\text{tr}(P_n |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|)} = \frac{P_n \rho P_n}{\text{tr}(\rho P_n)} \quad (2.21)$$

De forma que obtenemos los mismos resultados, como se anunciaba.

A continuación, interesados por la evolución del sistema al pasar por el aparato, descompongamos la componente de no-reversibilidad de la componente de no-determinismo de la medida. Por simplicidad, se hará para un estado puro:

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| \xrightarrow{A} \sum_n |P_n |\Psi\rangle|^2 \frac{P_n |\Psi\rangle\langle\Psi| P_n}{|P_n |\Psi\rangle|^2} = \sum_n P_n |\Psi\rangle\langle\Psi| P_n \quad (2.22)$$

Notar que este proceso es determinista. Por ejemplo,

$$|+x\rangle\langle+x| \rightarrow \frac{1}{2}(|+z\rangle\langle+z| + |-z\rangle\langle-z|) \quad (2.23)$$

Pero introduciendo $|-x\rangle\langle-x|$ se obtiene el mismo resultado, luego claramente el proceso no es reversible.

La medida no ha acabado, ya que aún falta obtener un estado puro:

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| \xrightarrow{A} \sum_n P_n |\Psi\rangle\langle\Psi| P_n \xrightarrow{a_n} \frac{P_n |\Psi\rangle\langle\Psi| P_n}{\text{tr}(P_n |\Psi\rangle\langle\Psi|)} \quad (2.24)$$

En este último paso, con suficientes repeticiones del experimento podría reconstruir la función original, luego es “reversible”. No obstante, no es determinista.

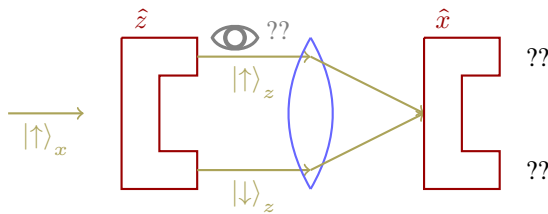
Si bien no es una demostración muy ortodoxa¹, nos permite idealizar el proceso así, separando las componentes de la medida: no-determinismo y no-reversibilidad. Tiene ciertas aplicaciones prácticas, por ejemplo si sabemos que se efectuó una medida pero no tenemos acceso a los resultados podemos decir que la nueva función de ondas es $\sum_n P_n |\Psi\rangle\langle\Psi| P_n$ y no $|\Psi\rangle\langle\Psi|$.

Deducimos que la coherencia no se pierde por *poner un aparato*, sino por *mirar*. Veamos un ejemplo.

¹ Esta separación del proceso de medida es puramente artificial, y no se puede decir que ocurran estos pasos en este orden, por ejemplo.

EJEMPLO: Pérdida de la coherencia en espines

Supongamos que pasamos un espín $|\uparrow\rangle_x$ por un Stern-Gerlach en \hat{z} . Tenemos un 50 % de probabilidades de obtener $|\uparrow\rangle_z$ o $|\downarrow\rangle_z$. En lugar de “mirar” el resultado, juntamos los dos haces y los hacemos pasar por un Stern-Gerlach en \hat{x} .



En lugar de separarse los haces en dos (la coherencia se ha perdido) vemos que salen por $|\uparrow\rangle_x$.

En cambio, si ponemos un detector, los haces pierden la coherencia

y vuelven a aparecer partículas por los dos haces del segundo Stern-Gerlach.

En la realidad, se obtiene una mezcla de estas dos situaciones en función del grado de información que es posible obtener de la medida. Si bien con aparatos de Stern-Gerlach el experimento es actualmente irrealizable (es muy difícil juntar los haces de nuevo) sí se han realizado experimentos equivalentes con fotones y dobles rendijas.

3

Estados compuestos

Si se tienen dos subsistemas S_1, S_2 en los espacios de Hilbert $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$, definimos el *sistema compuesto* como la unión de ambos, en el espacio vectorial $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

3.1 Producto tensorial

Sea $|\Psi\rangle_1 \in \mathcal{H}_1$ y $|\chi\rangle_2 \in \mathcal{H}_2$. Definimos $|\Psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. En general, se tendrán combinaciones lineales¹ de ambos vectores, que también pertenecerán a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

Vemos que S_1 está en el estado $|\Psi\rangle_1$ y S_2 en el $|\chi\rangle_2$. No obstante, si S está en el estado $|\Psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 + |\Psi'\rangle_1 \otimes |\chi'\rangle_2$ no podemos definir en qué estado están S_1, S_2 . *Conocido por completo el estado del todo, no tenemos por qué poder conocer el estado de las partes.* Esto no ocurre en mecánica clásica, donde conocer con completa precisión el estado de un sistema implica conocer también el estado de sus componentes.

El producto tensorial cumple ciertas propiedades:

- $(\alpha |\Psi\rangle_1 + \mu |\Psi'\rangle_1) \otimes |\chi\rangle_2 = \alpha |\Psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 + \mu |\Psi'\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 = a |\Psi\rangle \otimes |\chi\rangle$. También es lineal en el lado derecho.
- $\mathbf{0}_1 \otimes |\chi\rangle_2 = 0$
- Sea $\{|u_i\rangle\}$ la base de \mathcal{H}_1 y $\{|v_j\rangle\}_2$ la de \mathcal{H}_2 , para $i \in \{1, \dots, N_1\}$ y $j \in \{1, \dots, N_2\}$. La base de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ será $\{|u_i\rangle_1 \otimes |v_j\rangle_2\}$.
- Un producto vectorial es sólo nulo si uno de sus componentes lo es.
 $|a\rangle \otimes |b\rangle = 0 \leftrightarrow |a\rangle = 0 \vee |b\rangle = 0$.
- $\dim(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) = \dim(\mathcal{H}_1) \dim(\mathcal{H}_2)$.
- El producto tensorial de bases ortonormales es una base ortonormal de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

3.2 Operadores en el espacio producto tensorial

Sea $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$ y $B : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_2$. Definimos

$$\begin{aligned} A \otimes B : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 &\rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \\ |\Psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 &\rightarrow A|\Psi\rangle_1 \otimes B|\chi\rangle_2 \end{aligned} \quad (3.1)$$

¹

$$|\Psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 + |\Psi'\rangle_1 \otimes |\chi'\rangle_2 + \dots$$

En general,

$$\sum_{\alpha=1}^N |\Psi\rangle_1^{(\alpha)} \otimes |\chi^{(\alpha)}\rangle_2$$

el cual pertenece a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

Para aliviar la notación en ocasiones se empleará $|\Psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 \stackrel{\text{def}}{=} |\Psi, \chi\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\Psi\rangle |\chi\rangle$.

Este tipo de operadores tienen un significado físico claro; implican que Alice actúa sobre el subsistema \mathcal{H}_1 con A mientras Bob actúa sobre \mathcal{H}_2 con B . Ayudan a formalizar el concepto de *operador local*, Alice no puede actuar sobre el subsistema de Bob y viceversa.

El operador más general será una combinación lineal $\sum_i A_i \otimes B_i$.

Sean a_i, b_j los valores propios de A, B y $|\Psi_i\rangle, |\chi_j\rangle$ los vectores propios, los de $A \otimes B$ serán $a_i \cdot b_j$ y $|\Psi_i\rangle \otimes |\chi_j\rangle$.

3.3 Operador densidad

Definimos la matriz densidad en el espacio producto tensorial:

$$\rho = \rho_1 \otimes \rho_2 : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (3.2)$$

con las propiedades usuales ($\rho^\dagger = \rho$, $\rho \geq 0$, $\text{tr} \rho = 1$).

Buscamos la expresión matricial en el nuevo espacio. Se tiene

$$M_{ij, i'j'} = (\langle u_i | \otimes \langle v_j |) M (|u_{j'}\rangle \otimes |v_{j'}\rangle) \quad (3.3)$$

donde $|u_i\rangle, |v_i\rangle$ son las bases (ortonormales) de las matrices A, B tales que $M = A \otimes B$. En notación matricial,

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} \boxed{A_{11}B} & \boxed{A_{12}B} & \cdots & \boxed{A_{1N_2}B} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \boxed{A_{N_11}B} & \boxed{A_{N_12}B} & \cdots & \boxed{A_{N_1N_2}B} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

donde cada bloque \boxed{aB} representa una matriz, de forma que la matriz total está formada por submatrices.

Para la traza, vemos que $\text{tr} M = \sum_{i,j} M_{ij, ij}$. En el caso particular de producto de matrices, como puede comprobarse rápidamente en (3.4), $\text{tr} A \otimes B = \text{tr} A \text{tr} B$, sin más que sacar factor común de cada caja la traza de A .

Con esta definición, vemos que la traza de $\text{tr} \rho = \text{tr}(\rho_1 \otimes \rho_2) = 1$, como esperábamos.

Traza parcial Tenemos un operador densidad ρ en $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, siendo \mathcal{H}_1 el espacio de Alice y \mathcal{H}_2 el de Bob. Alice realiza una medida $A \otimes I$, y se pretende calcular el valor medio de ese observable: $\text{tr}[\rho(A \otimes I)]$. Como Bob no influye en la medida, nos preguntamos si se puede escribir ese valor medio como $\text{tr}(\rho_1 A)$, a pesar de estar esa segunda definición en \mathcal{H}_1 en lugar de en $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$:

$$\text{tr}[\rho(A \otimes I)] = \sum_{ij, i'j'} \rho_{ij, i'j'} A_{i'i} \delta_{jj'} = \sum_{i, i'} \left(\underbrace{\sum_j \rho_{ij, i'j}}_{(\rho_1)_{ii'}} \right) A_{i'i} = \text{tr}(\rho_1 A) \quad (3.5)$$

Deducimos por tanto que el sistema de Alice está completamente descrito por $\rho_1 = \sum_j \rho_{ij, i'j}$. Así, podemos centrarnos en la parte interesante del sistema e ignorar las demás, como se hacía en mecánica clásica. La diferencia viene en que podemos empezar con un estado ρ puro (todo

$\rho \geq 0$ puede demostrarse a partir de las propiedades de los valores propios en productos tensoriales.

conocido con absoluta precisión) pero acabar con un ρ_1 mezcla: conocer con precisión el sistema completo no garantiza conocer con precisión sus partes. Motivados por este ejemplo, definimos la *traza parcial*:

$$\begin{aligned} \text{tr}_{\mathcal{H}_2} \rho : \mathcal{H}_1 &\rightarrow \mathcal{H}_1 \\ (\text{tr}_{\mathcal{H}_2} \rho)_{ii'} &\stackrel{\text{def}}{=} \text{tr}_2 \rho = \sum_j \rho_{ij, i'j} \end{aligned} \quad (3.6)$$

EJEMPLO: Valor medio de A

Definamos $\mathcal{H}_1 = \text{span}\{|0\rangle, |1\rangle\}$ y $\mathcal{H}_2 = \text{span}\{|a\rangle, |b\rangle\}$. Las funciones de onda serán de la forma

$$|\Psi\rangle = \alpha |0\rangle \otimes |a\rangle + \beta |1\rangle \otimes |b\rangle \quad (3.7)$$

Alice realiza una medida $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$, con valor esperado

$$\begin{aligned} \langle \Psi | A \otimes \mathbb{I} | \Psi \rangle &= \alpha \bar{\alpha} \langle 0 | \langle a | (A \otimes \mathbb{I}) | 0 \rangle | a \rangle + \alpha \bar{\beta} \langle 1 | \langle b | (A \otimes \mathbb{I}) | 0 \rangle | a \rangle \\ &\quad + \bar{\alpha} \beta \langle 0 | \langle a | (A \otimes \mathbb{I}) | 1 \rangle | b \rangle + \beta \bar{\beta} \langle 1 | \langle b | (A \otimes \mathbb{I}) | 1 \rangle | b \rangle \\ &= |\alpha|^2 \langle 0 | A | 0 \rangle + |\beta|^2 \langle 1 | A | 1 \rangle \end{aligned} \quad (3.8)$$

No existe ningún vector φ tal que $\langle \Psi | A \otimes \mathbb{I} | \Psi \rangle = \langle \varphi | A | \varphi \rangle$, pero sí que existe una ρ_1 que me permite escribirlo como $\text{tr}(\rho_1 A)$, sin más que escribir

$$\rho_1 = |\alpha|^2 |0\rangle\langle 0| + |\beta|^2 |1\rangle\langle 1| \quad (3.9)$$

Nótese como las fases relativas han dejado de influir, a este fenómeno se le denota *pérdida de la coherencia*, y es lo que ocurre típicamente en los experimentos con observador.

EJEMPLO: Doble rendija

Emitimos una partícula contra una rendija doble, de forma que puede tomar dos caminos. El sistema tendrá una base $\{|0\rangle, |u\rangle, |d\rangle\}$: no pasar, pasar por arriba, pasar por abajo.

La medición A cumplirá ciertas propiedades:

- $A |0\rangle = 0$. Si no pasa una partícula, no la mido.
- $A = a |\varphi_a\rangle\langle \varphi_a| + b |\varphi_b\rangle\langle \varphi_b|$, con

$$\begin{aligned} |\varphi_a\rangle &= \alpha |u\rangle + \alpha' |d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle + |d\rangle) \\ |\varphi_b\rangle &= \beta |u\rangle + \beta' |d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle - |d\rangle) \end{aligned}$$

Así no distingue si el fotón ha venido por arriba o por abajo.

- $A = (a_u^\dagger + a_d^\dagger)(a_u + a_d)$

La función de ondas que llegará al detector será

$$|\Psi\rangle = N|0\rangle + \mu|u\rangle + \varepsilon|d\rangle \quad (3.10)$$

Al mover el detector, cambiará la fase relativa entre μ y ε , de forma que aparecerán interferencias:

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = |\mu + \varepsilon|^2 \quad (3.11)$$

A continuación, ponemos una “bombilla” en la rendija superior, que se encienda cuando cruza por ahí la partícula. Físicamente, la realizamos duplicando el sistema y mandando los fotones a pares (fig. sistema que vemos con splitter y caja testigo e idler). En el sistema testigo, puedo o poner un detector no direccional, *o no ponerlo y abrir la posibilidad de que en un futuro pueda colocarlo*. El sistema de las dos cajas $\mathcal{H} = \mathcal{H}_t \otimes \mathcal{H}_s$ viene descrito por vectores

$$|\Psi\rangle = M|0\rangle_t |0\rangle_s + \mu|d\rangle_t |u\rangle_s + \varepsilon|u\rangle_t |d\rangle_s \quad (3.12)$$

Si sólo mido en D_s , el observable es $\mathbb{I} \otimes A$. Si mido en ambos sensores, será $A \otimes A$. Los valores esperados serán

$$\langle\Psi|\mathbb{I} \otimes A|\Psi\rangle = |\mu|^2 + |\varepsilon|^2 \quad (3.13)$$

$$\langle\Psi|A \otimes A|\Psi\rangle = |\mu + \varepsilon|^2 \quad (3.14)$$

Vemos que en el segundo caso, al “destruir” la posibilidad de mirar el camino por el que han pasado en un futuro, aparecen interferencias, mientras que en el primero, en el que existe esa posibilidad futura, no.

Motivados por los ejemplos anteriores, estudiamos el fenómeno de la decoherencia, asociado a sistemas compuestos. Para ello, es necesario comprender otro fenómeno: el *entrelazamiento*.

3.4 Entrelazamiento y decoherencia

El fenómeno del entrelazamiento fué introducido por Schrödinger, quien lo motivaba diciendo que *en la mecánica cuántica, el conocimiento de un sistema no implica necesariamente el conocimiento completo de sus partes*.

En mecánica clásica, dados dos estados S_1, S_2 y conocidas completamente las coordenadas de $S_1 \oplus S_2$ (q_1, q_2, p_2, p_1), se conocen inmediatamente las de S_1 (q_1, p_1) y las de S_2 (q_2, p_2)

En mecánica cuántica, tenemos $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ con vectores $|\Psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2$, donde $|\Psi\rangle_1 \in \mathcal{H}_1$ y $|\chi\rangle \in \mathcal{H}_2$. No obstante, ese no es el estado más general posible, siendo posibles estados como $\varphi = \frac{1}{\sqrt{N}}(|\Psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2 + |\Psi'\rangle_1 \otimes |\chi'\rangle_2)$. Aparece ambigüedad en estado del subsistema \mathcal{H}_1 , no sabiéndose si es $|\Psi\rangle_1, |\Psi'\rangle_1$, u otra cosa.

Para resolver este problema, medimos un observable $A \otimes \mathbb{I}$ del sistema \mathcal{H}_1 sobre el estado anterior $\varphi \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$:

$$\langle\varphi|A \otimes \mathbb{I}|\varphi\rangle = \frac{1}{2} \langle\Psi'_1|A|\Psi'_1\rangle + \frac{1}{2} \langle\Psi'_1|A|\Psi_1\rangle \quad (3.15)$$

donde se han supuesto a los vectores de φ ortogonales. Pretendemos que

dicha expresión equivalga a un ξ tal que $\langle \varphi | A \otimes \mathbb{I} | \varphi \rangle = \langle \xi | A | \xi \rangle$, cosa que sí ocurre para estados como el $|\Psi\rangle_1 \otimes |\chi\rangle_2$. En lugar de escribirlo como el valor esperado, lo escribimos como el valor esperado de una matriz densidad $1/2(|\Psi\rangle\langle\Psi| + |\Psi'\rangle\langle\Psi'|)$:

$$\langle \varphi | A \otimes \mathbb{I} | \varphi \rangle = \text{tr}_1(\rho_1 A) \quad (3.16)$$

Así podemos decir que en \mathcal{H}_1 se tiene la matriz de densidad $1/2(|\Psi\rangle\langle\Psi| + |\Psi'\rangle\langle\Psi'|)$ y en \mathcal{H}_2 se tiene $1/2(|\chi\rangle\langle\chi| + |\chi'\rangle\langle\chi'|)$. Únicamente se tiene información parcial de los subsistemas, existiendo ambigüedad.

Buscamos diferenciar ambos casos, en que se tiene información completa o información parcial sobre el subsistema. Para ello, tratamos de responder a la siguiente pregunta: ¿Cómo de entrelazados² están los subsistemas?

Notamos que estados como $1/2(|\Psi\rangle\langle\Psi| + |\Psi'\rangle\langle\Psi'|)$ no son más que la traza parcial del estado global φ del sistema, $\text{tr}_2(|\varphi\rangle\langle\varphi|)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(|\Psi\rangle\langle\Psi| + |\Psi'\rangle\langle\Psi'|) &= \text{tr}_2(|\varphi\rangle\langle\varphi|) \\ &= \text{tr}_2 \left[\frac{1}{2}(|\Psi\rangle|\chi\rangle\langle\chi| + |\Psi'\rangle|\chi'\rangle\langle\chi'|) \right] \\ &= \frac{1}{2}(|\Psi\rangle\langle\Psi| + |\Psi'\rangle\langle\Psi'|) \end{aligned} \quad (3.17)$$

En resumen, si tenemos dos estados $S_1 \cup S_2$ en el estado ρ , S_1 está en el estado $\rho_1 = \text{tr}_2 \rho$. Para ver lo entrelazado que está el estado, podemos emplear la ya vista³ entropía de Von Neumann.

Medimos la entropía de Von Neumann del subsistema⁴ para cuantificar la *entropía de entrelazamiento*; para el subsistema S_1 , por ejemplo,

$$\rho_1 = \text{tr}_2(\rho) \rightarrow \mathcal{S} = -\text{tr}(\rho_1 \log \rho_1) \quad (3.18)$$

Para estados iniciales puros, la entropía de entrelazamiento de S_2 y la de S_1 son idénticas (en el caso de φ , $\mathcal{S}_1 = \mathcal{S}_2 = \log 2$).

Puede ocurrir que $\mathcal{S}_i > \mathcal{S}_T$, cosa que no puede ocurrir en mecánica clásica (donde $S_1 \leq S_T$).

En el fenómeno de la decoherencia,

$$|\varphi\rangle\langle\varphi| \rightarrow \frac{1}{2}(|\Psi\rangle\langle\Psi| + |\Psi'\rangle\langle\Psi'|) \quad (3.19)$$

Imaginemos $|\varphi\rangle = |\chi\rangle \otimes |a\rangle$, donde $|\chi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$.

$$\begin{aligned} \langle \varphi | A \otimes \mathbb{I} | \varphi \rangle &= \langle \chi | A | \chi \rangle \\ &= |\alpha|^2 \langle 0 | A | 0 \rangle + |\beta|^2 \langle 1 | A | 1 \rangle \\ &\quad + \alpha \bar{\beta} \langle 1 | A | 0 \rangle + \bar{\alpha} \beta \langle 0 | A | 1 \rangle \end{aligned} \quad (3.20)$$

Sin embargo, si $|\varphi\rangle$ no es puro, como en $\alpha|0\rangle \otimes |a\rangle + \beta|1\rangle \otimes |a\rangle$,

$$\langle \varphi | A \otimes \mathbb{I} | \varphi \rangle = |\alpha|^2 \langle 0 | A | 0 \rangle + |\beta|^2 \langle 1 | A | 1 \rangle \quad (3.21)$$

Al meter un estado mezcla, en que S_1 no tiene un estado definido (en el estado puro era simplemente $|\chi\rangle$), se pierde la información de las fases y obtenemos un estado incoherente.

² A los estados en que la información es parcial (como el φ anterior) se les denota *entrelazados*.

³

$$\mathcal{S}(\rho) = -\text{tr}(\rho \log \rho)$$

Resulta nula para estados puros, y mayor que cero para estados no puros. Empleamos \mathcal{S} en lugar de S para diferenciarla de la S de los subsistemas.

⁴ Si midiéramos la del estado global, $|\varphi\rangle\langle\varphi|$, obtendríamos 0 al ser este puro. Es por ello que medimos la de los subsistemas, que no tienen por qué ser puros.

3.5 Partículas idénticas

Supongamos dos partículas, por ejemplo dos fotones. El espacio de los estados sería, a priori, $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Como son bosones, el espacio físico (que denotaremos espacio de Bose, $\mathcal{H}_B = \mathcal{H}_1 \vee \mathcal{H}_2 \subset \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$) será más pequeño.

$$\mathcal{H}_B = \text{span}(|\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle + |\chi\rangle \otimes |\varphi\rangle) \subset \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (3.22)$$

En el caso de los fermiones, definimos el espacio de Fermi $\mathcal{H}_F = \mathcal{H}_1 \wedge \mathcal{H}_2 \subset \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

$$\mathcal{H}_F = \text{span}(|\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle - |\chi\rangle \otimes |\varphi\rangle) \subset \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (3.23)$$

Para N partículas,

$$|\Psi\rangle_B = \text{span} \left(\sum_{\sigma \in S_N} |u_{\sigma(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |u_{\sigma(N)}\rangle \right) \quad (3.24)$$

$$|\Psi\rangle_F = \text{span} \left(\sum_{\sigma \in S_N} (-1)^{|\sigma|} |u_{\sigma(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |u_{\sigma(N)}\rangle \right) \quad (3.25)$$

donde $|\sigma|$ representa al signo de la permutación. Denotaremos a los espacios de Bose y de Fermi como $\mathcal{H}_B = \mathcal{H}_1 \vee \cdots \vee \mathcal{H}_N$ y $\mathcal{H}_F = \mathcal{H}_1 \wedge \cdots \wedge \mathcal{H}_N$.

También podemos definir, con ayuda del operador permutación i con j P_{ij} , al espacio de Bose como el invariante bajo P_{ij} y al de Fermi como el que cambia de signo con ella.

Operadores Como los operadores A deben actuar igual (sin distinguir) sobre las partículas, son *simétricos*: $[A, P_{ij}] = 0$, $\forall i, j$. De esta forma, preservan los subespacios $(\mathcal{H}_B$ y $\mathcal{H}_F)$ sobre los que actúan.

Bases Consideremos un espacio de Bose. Se tiene una base $|u_1\rangle, \dots, |u_d\rangle$ de \mathcal{H} , y definimos una base de $\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N$ con todas las combinaciones de los $|u_{i_1}\rangle \otimes \cdots \otimes |u_{i_N}\rangle$. Como necesitamos una base de \mathcal{H}_B y no de \mathcal{H}_T , una solución sería simetrizar cada elemento de la base obtenida para \mathcal{H}_T , pero no es muy práctico. En lugar de ello, utilizamos el siguiente procedimiento:

1. Enumeramos las veces que aparece cada vector en la base de \mathcal{H}_T .
2. Asignamos un $n_i \in \{0, \dots, N\}$ a cada $|u_i\rangle$ en función de dichas veces.
 $\sum_i n_i = N$.
3. Nos quedamos con el vector $|n_1, \dots, n_d\rangle$, que utilizamos en lugar de $\text{sim}(u_{i_1} \otimes \cdots \otimes u_{i_N})$.

En el caso de los fermiones, el procedimiento es idéntico, pero $n_i \in \{0, 1\}$. Es similar a la notación en campos cuantizados, siendo cada componente del vector $|n_1, \dots, n_d\rangle$ el número de excitaciones en cada estado. A este espacio, \mathcal{F}_B o \mathcal{F}_F , lo llamamos *espacio de Fock*. Tiene la peculiaridad de que no conserva el número de partículas⁵.

⁵ Por ejemplo, $|0, 1, \dots, 0\rangle$ y $|1, 2, 0, \dots, 0\rangle$ están ambos en la base de \mathcal{F}_B , pero tienen respectivamente 1 y 3 partículas.

4

Experimento EPR

Es un *gedankenexperiment* de 1935. Imaginemos un bosón de Higgs (de espín nulo) que se desintegra en un par electrón-antielectrón e^+ y e^- , que medirán Alice y Bob. Como el espín total debe ser nulo, la función de ondas del sistema será $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$. Los operadores de Alice serán del estilo de $A \otimes \mathbb{I}$ (mide el positrón) y los de Bob $\mathbb{I} \otimes B$ (mide el electrón).

Si Alice obtiene $|\uparrow\rangle$ al medir, el estado $|\Psi\rangle$ se transforma en el $|\Psi'\rangle = |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$, y por tanto Bob ha de medir un positron con espín $|\downarrow\rangle$ necesariamente. *Alice influye en la medida de Bob al medir su electrón, de forma instantánea.*

Para solucionar la paradoja, se propuso que el resultado es debido a nuestra ignorancia sobre el sistema: el electrón y el positrón “ya saben” en qué dirección están. Definimos unas variables ocultas a, b que determinan el resultado, y que no podemos medir; de esta forma la localidad no se viola. *El sistema está predestinado, pero no podemos medir qué va a ocurrir a priori.*

Más tarde, Bell propuso las¹ *desigualdades de Bell* (1964), que definen unas correlaciones en las medidas en caso de existir las variables ocultas.

Para $A = \sigma_z \otimes \mathbb{I}$, tenemos $a = \pm 1$ en función de que se mida espín *up* o *down*. De forma análoga, se tiene $A' = \mathbb{I} \otimes \sigma_x$ y $a' = \pm 1$.

Bob tiene dos aparatos $B = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbb{I} \otimes (\sigma_x + \sigma_z)$ (con $b = \pm 1$ cuando $B|\Psi\rangle = \pm 1$) y $B' = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbb{I} \otimes (\sigma_x - \sigma_z)$ con $b' = \pm 1$.

Calculamos el valor medio de $(a - a')b - (a + a')b \in [-2, 2]$ para nuestro $|\Psi\rangle$. Al estar la cantidad acotado, esperamos que

$$E[|(a - a')b - (a + a')b|] = \Delta = \bar{a}\bar{b}' - a'\bar{b}' - \bar{a}b - a'b \leq 2 \quad (4.1)$$

denotada *desigualdad de Clauser, Horne, Shimony, Holt (CHSH)*.

Calculamos con los postulados de la mecánica cuántica los valores esperados:

$$\bar{a}b' = \langle \Psi | \sigma_z \otimes \frac{\sigma_x - \sigma_z}{\sqrt{2}} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \frac{-\sigma_z \otimes \sigma_z}{\sqrt{2}} | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (4.2)$$

donde se ha empleado que $\langle \Psi | \sigma_z \otimes \sigma_x | \Psi \rangle = \pm 1 \cdot 0 = 0$ y $\langle \Psi | \sigma_z \otimes \sigma_z | \Psi \rangle = \pm 1 \cdot \mp 1 = -1$ para nuestra función de ondas.

$$a'\bar{b}' = \langle \Psi | \sigma_x \otimes \frac{\sigma_x - \sigma_z}{\sqrt{2}} | \Psi \rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} \quad (4.3)$$

¹ La primera no es de Bell, sino de otros autores.

empleando $|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(|\rightarrow\rangle|\leftarrow\rangle - |\leftarrow\rangle|\rightarrow\rangle)$ y reduciendo el caso al anterior. De forma análoga, $\bar{a}b = \frac{-1}{\sqrt{2}}$ y $a'\bar{b} = \frac{-1}{\sqrt{2}}$.

Obtenemos que $|(a - a')b - (a + a')\bar{b}| = 2\sqrt{2} > 2$, violándose la desigualdad de CHSH.

En 1981, Aspect, Grangier y Roger (PRL 47,460) midieron Δ y obtuvieron $\Delta = 2.504(56)$ (medición a 9 σ). En 1995 (PRL 74,4337) se obtuvo $\Delta = 2.6489(64)$ (en este caso 100 σ)

Con esta evidencia teórica y experimental, la teoría de las variables ocultas perdió gran parte de su popularidad².

A continuación, rechazadas las variables locales, nos preguntamos si Bob puede utilizar estos efectos cuánticos para saber *instantáneamente* si Alice a medido o no³.

Si Alice no mide, $P(\uparrow_B) = P(\downarrow_B) = 1/2$. En cambio, si Alice mide hay dos posibilidades:

1. Si Alice mide \downarrow_A Bob obtendrá \uparrow_B .
2. Si Alice mide \uparrow_A Bob obtendrá \downarrow_B .

Como Bob no conoce el resultado de la medición de Alice, obtendrá $P'(\uparrow_B) = P'(\downarrow_B) = 1/2$ al medir Alice ambos estados con igual probabilidad. *Bob no puede distinguir si Alice está midiendo o no, y recibir información con el proceso.*

Nos preguntamos si esta imposibilidad es fruto del sistema estudiado o una propiedad fundamental de la mecánica cuántica. Para ello, generalizamos la situación.

Alice y Bob van a actuar sobre un estado ρ en $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Alice mide con $A = \sum a_n P_n$, y Bob con $B = \sum b_m Q_m$. Nos preguntamos las probabilidades de Bob de obtener un resultado en función de si Alice mide o no, siendo $q(b_m)$ las probabilidades de Bob.

Si Alice mide, Bob obtiene $q'(b_m)$. Las probabilidades de Alice son $p(a_n) = \text{tr}(\rho[P_n \otimes \mathbb{I}])$, y el estado pasa a ser $\rho' = (P_n \otimes \mathbb{I})\rho(P_n \otimes \mathbb{I}) / \text{tr}(\rho P_n)$.

$$\begin{aligned}
 q'(b_m) &= \sum_n p(b_m | a_n) \cdot p(a_n) \\
 &= \sum_n \text{tr}(\rho'[\mathbb{I} \otimes Q_m]) \cdot p(a_n) \\
 &= \dots = \sum_n \frac{\text{tr}(\rho(P_n \otimes Q_m))}{\text{tr}(\rho P_n)} \cdot p(a_n) \\
 &= \sum_n \frac{\text{tr}(\rho[P_n \otimes Q_m])}{\text{tr}(\rho[P_n \otimes \mathbb{I}])} \text{tr}(\rho[P_n \otimes \mathbb{I}]) \\
 &= \text{tr}\left(\rho\left[\sum_n P_n \otimes Q_m\right]\right) = \text{tr}(\rho[\mathbb{I} \otimes Q_m])
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Si en cambio Alice no mide,

$$q(b_m) = \text{tr}(\rho[\mathbb{I} \otimes Q_m]) \tag{4.5}$$

Vemos que Bob obtiene siempre lo mismo, y no puede distinguir si Alice mide.

Más tarde, Nick Herbert (1982) tuvo una idea relativa al tema aquí discutido. Volvemos a considerar la desintegración del Bosón de Higgs, y

Ambos resultados experimentales difieren por las variaciones en el *setup* experimental y con $2\sqrt{2}$. Lo importante es que se obtienen resultados mayores de 2.

² En teoría, sólo sirve para rechazar las variables ocultas *locales*.

³ En cambio, si que conoce el resultado de Alice sin problemas: el contrario del suyo. No obstante, esto no aporta nada a Bob y no puede emplearse para transmitir ningún tipo de información; Alice no puede decidir qué obtiene en su medida, y no tiene control sobre el mensaje que obtendrá Bob. En cambio, sí que puede decidir si quiere medir o no.

Se ha empleado que $[P_n \otimes \mathbb{I}, \mathbb{I} \otimes Q_m] = 0$.

las mediciones de Alice y Bob, pero en este caso Alice tiene dos aparatos: uno $\sigma_z \otimes \mathbb{I}$ y otro $\sigma_x \otimes \mathbb{I}$. Bob trata de averiguar que aparato ha utilizado Alice en función de su medida $|\downarrow\rangle, |\leftarrow\rangle$. Mide varias veces, y si le sale siempre $|\downarrow\rangle$ sabe que Alice ha empleado σ_z y si sólo un 50 % de las veces, σ_x .

Para ello, copia su estado y lo mide en una gran cantidad de aparatos de Stern-Gerlach. Cuando obtenga un 100 % de $|\downarrow\rangle$ ya sabe que Alice está empleando su σ_z , y podría transmitirle información cambiando entre un aparato y otro.

Wootters y Zurek (1982) y Dieks (1982) demostraron que hay un problema en el planteamiento del experimento que lo imposibilita, *no se puede clonar un estado cuántico*. A esto se le denota *teorema de no clonado*.

Supongamos un estado $|a\rangle|0\rangle$ (donde $|0\rangle$ es la “hoja en blanco” en la que vamos a copiar $|a\rangle$) y nos imaginamos un U tal que

$$\begin{aligned} |a\rangle|0\rangle &\xrightarrow{U} |a\rangle|a\rangle, \forall |a\rangle \\ |b\rangle|0\rangle &\xrightarrow{U} |b\rangle|b\rangle, \forall |b\rangle \end{aligned} \quad (4.6)$$

Vemos que hay un problema con la linealidad del proceso. Supongamos

$$|\lambda a + \mu b\rangle|0\rangle \xrightarrow{U} |\lambda a + \mu b\rangle|\lambda a + \mu b\rangle \quad (4.7)$$

El operador U ha de ser unitario para ser realizable físicamente, así que

$$\begin{aligned} U(\lambda|a\rangle + \mu|b\rangle)|0\rangle &= \lambda^2|a\rangle|a\rangle + \mu^2|b\rangle|b\rangle + \lambda\mu(|a\rangle|b\rangle + |b\rangle|a\rangle) \\ U(\lambda|a\rangle + \mu|b\rangle)|0\rangle &= \lambda|a\rangle|a\rangle + \mu|b\rangle|b\rangle \end{aligned} \quad (4.8)$$

Vemos que al aplicar la linealidad del operador no obtenemos el mismo resultado, por lo que en general el operador no puede existir.

Si los estados $|a\rangle, |b\rangle$ son ortogonales sí que se pueden clonar⁴, pero en ese caso no tiene sentido porque no son necesarias muchas mediciones para conocerlo. Si las dos máquinas de Alice son ortogonales, lo que posibilitaría el clonado, son necesariamente la misma máquina.

⁴ Visto de otra forma, sólo pueden clonarse estados que no se destruyan al medirlos. Por ejemplo, $|\rightarrow\rangle$ se va a transformar en $|\uparrow\rangle$ o en $|\downarrow\rangle$ al medirlo, y no se conoce cuál era el inicial para poder reconstruirlo, el original *ya no existe*.

4.1 Teleportación cuántica

Supongamos de nuevo a dos observadores, Alice y Bob. Supongamos que Alice es capaz de transmitir a Bob un *qubit*⁵ con sólo dos bits, de forma que pueda reconstruirlo. Para mandar la información, utiliza un estado entrelazado que comparten, como el que se empleo en apartados anteriores, proveniente de, por ejemplo, una desintegración. En principio es imposible (ya que el qubit equivale a infinitos bits), pero es posible gracias al estado entrelazado $|\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle)$ que comparten.

El estado que tiene Alice será $|\Psi\rangle = |\varphi\rangle|\beta\rangle$, donde $|\varphi\rangle$ es el qubit:

$$|\Psi\rangle = \frac{\alpha|0\rangle(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle) + \beta|1\rangle(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle)}{\sqrt{2}} \quad (4.9)$$

Alice puede realizar una operación

$$U_{12}|0\rangle|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)|x\rangle \quad (4.10)$$

$$U_{12}|1\rangle|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)|x \oplus 1\rangle \quad (4.11)$$

⁵ Los *qubit* se definen como $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Es análogo a un número complejo en el disco unidad.

donde \oplus es la suma binaria, de forma que $|1\rangle \oplus |1\rangle = |0\rangle$ y $|0\rangle \oplus |1\rangle = |1\rangle$. Como Bob no hace nada, el operador sobre el sistema completo será

$$\begin{aligned} (U_{21} \otimes \mathbb{I}) |\Psi\rangle &= \frac{1}{2} [\alpha(|0\rangle + |1\rangle)(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle) \\ &\quad + \beta(|0\rangle - |1\rangle)(|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle)] \\ &= \dots \end{aligned} \quad (4.12)$$

Reagrupando en la expresión,

$$\begin{aligned} \dots &= \frac{1}{2} [|0\rangle|0\rangle (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \\ &\quad + |1\rangle|0\rangle (\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle) \\ &\quad + |0\rangle|1\rangle (\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) \\ &\quad + |1\rangle|1\rangle (\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle)] \end{aligned} \quad (4.13)$$

Alice mide en la llamada *base computacional*, con dos aparatos $A_1 = a_1|0\rangle\langle 0| + b_1|1\rangle\langle 1|$ y $A_2 = a_2|0\rangle\langle 0| + b_2|1\rangle\langle 1|$. Supondremos que $a_i = 0$ y $b_i = 1$ para que el resultado coincida con la medición.

Alice realiza una medición $A_1 \otimes A_2 \otimes \mathbb{I}$ (la identidad corresponde a Bob no haciendo nada). Puede obtener cuatro resultados.

Estado 00 El estado ha colapsado en el primer sumando de (4.13), así que Bob mide el estado $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = |\varphi\rangle$.

Estado 01 El estado ha colapsado en el segundo sumando de (4.13), así que Bob mide el estado $\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle \neq |\varphi\rangle$. Sólo tiene que aplicar el operador $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ en su estado para obtener $|\varphi\rangle$.

Estado 10 De nuevo Bob no obtiene $|\varphi\rangle$, sino $\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$. En este caso, emplea $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Estado 11 Bob sólo tiene que emplear el operador XZ sobre su estado.

Estas teleportaciones se han hecho a gran distancia, en 2012 se realizó a 143 kilómetros de distancia, entre La Palma y Tenerife.⁶

⁶ arXiv: 1005.3909

5

Computación cuántica

En lugar de bits, computamos con qubits $|\varphi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Las funciones clásicas $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^m$ son en este caso $U : (\mathbb{C}^2)^n \rightarrow (\mathbb{C}^2)^n$. Por lo tanto, funciones clásicas como $x_1, x_2 \rightarrow x_1 + x_2$ no tienen análogo cuántico por no respetar la reversibilidad que imponemos.

Expresaremos los operadores en la base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle\}$.

El principal impulso de la computación cuántica fue el *algoritmo de Shor*, que permite factorizar¹ números en tiempo polinómico en ordenadores cuánticos.

¹ Esto es especialmente interesante para encriptaciones (y desencriptaciones) como RSA.

5.1 Algoritmo de Simons

En computación clásica, supongamos $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$. Imaginemos un $x, s \in \{0, 1\}^n$ tal que $f(x) = f(y) \leftrightarrow x = y, y \oplus s$ de forma que $f(x) = f(x \oplus s)$. El problema es determinar s para una determinada f .

El algoritmo clásico (ir probando uno a uno) tiene una complejidad $\mathcal{O}(2^{n-1})$. Con algoritmos probabilísticos más sofisticados, la complejidad sigue siendo $\mathcal{O}(2^{n/2})$, no polinómica. El algoritmo de Simons permite hacer la misma operación con $\mathcal{O}(n^\alpha)$.

Para modelizar el problema, trabajamos en $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^2)^n \otimes (\mathbb{C}^2)^n$, por razones que se verán posteriormente. Denotamos a nuestros vectores² $|x\rangle|y\rangle \in (\mathbb{C}^2)^n \otimes (\mathbb{C}^2)^n$, y definimos la f clásica como

$$U_f : |x\rangle|y\rangle \rightarrow |x\rangle|y \oplus f(x)\rangle \quad (5.1)$$

Comenzamos por analizar el estado inicial Ψ correspondiente a todos los qubits en $|0\rangle$, $\Psi_0 = |0\rangle|0\rangle$. Aplicamos el operador *Hadamard*³:

$$|\Psi_1\rangle = (H^n \otimes \mathbb{I})|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} |x\rangle|0\rangle \quad (5.4)$$

Obtenemos todas las combinaciones lineales posibles, $(|0\rangle + |1\rangle) \cdot (|0\rangle + |1\rangle) \dots$.

A continuación, aplicamos la función U_f :

$$|\Psi_2\rangle = U_f|\Psi_1\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_x |x\rangle|f(x)\rangle \quad (5.5)$$

donde f es la f clásica sobre los bytes. Volver a aplicar H es más complica-

De nuevo, se define \oplus como el OR exclusivo multidimensional, “la suma sin llevar uno”.

Notar que $(\mathbb{C}^2)^n \neq \mathbb{C}^{2^n}$. Más bien, es isomorfo a $\mathbb{C}^{(2^n)}$. Es una exponencial “tensorizada”.

² $|x\rangle = |0\rangle|1\rangle|0\rangle|1\rangle|0\rangle|1\rangle \dots$, por ejemplo.

³ $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, de forma que

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad (5.2)$$

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (5.3)$$

do, porque algunos ket ya no son $|0\rangle$, y los signos podrán cambiar.

$$\begin{aligned} |\Psi_3\rangle &= (H^n \otimes \mathbb{I}) |\Psi_2\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_x (H^n |x\rangle) |f(x)\rangle \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_x \sum_y (\star) |y\rangle |f(x)\rangle \\ &= \dots \end{aligned} \quad (5.6)$$

La complicación está en el signo relativo (\star) . Tengo tantos signos — como unos finales me vengan de unos iniciales, luego $(\star) = (-1)^{x \cdot y}$, donde $x \cdot y$ es el producto escalar de los vectores de bits. Continuando,

$$\dots = \frac{1}{2} \frac{1}{2^n} \sum_y \sum_x [(-1)^{x \cdot y} |y\rangle |f(x)\rangle + (-1)^{(x \oplus s) \cdot y} |y\rangle |f(x \oplus s)\rangle] = \dots \quad (5.7)$$

El $\frac{1}{2}$ indica que realizo la suma dos veces.

$$\dots = \frac{1}{2} \frac{1}{2^n} \sum_y [1 + (-1)^{y \cdot s}] \sum_x (-1)^{x \cdot y} |y\rangle |f(x)\rangle \quad (5.8)$$

Medimos en la base computacional con los A_1, A_2, \dots, A_n , y anotamos los resultados $|0\rangle, |1\rangle$. El estado con $y \cdot s \neq 0 \bmod 2$ se anula ($|\Psi_3\rangle = 0$), luego obtenemos las proyecciones en $y \cdot s = 0 \bmod 2$, independientemente del resultado exacto. La probabilidad de cada estado concreto $y = 01001010 \dots$ será

$$p(y) \propto [1 + (-1)^{y \cdot s}]^2, \quad \forall y \quad (5.9)$$

Si mido n medidas linealmente independientes, lo cual es bastante⁴ probable, ya se tiene que s ha de ser ortogonal a todas ellas, teniéndose n ecuaciones $y_i \cdot s = 0$. Si n es el número de bits de s , que es el número de incógnitas, puedo determinarla.

Notar como en $|\Psi_2\rangle$ se actúa sobre *todos* los estados, con una sola operación.

⁴ Se puede estimar que la probabilidad es mayor de un cuarto.

5.2 Circuitos cuánticos

Para describir los algoritmos, suele ser más práctico describirlos como *circuitos cuánticos*.

5.3 Ordenador de iones atrapados

Tenemos una red de iones⁵ ionizados, de forma que entre sí se repelen. Los atrapamos en un potencial cuadrático periódico⁶, de forma que tienen una fuerza recuperadora de tipo muelle.

Nos centramos en uno de los iones en concreto, de carga +2, y su electrón de valencia. El electrón está inicialmente en el estado fundamental ($|g\rangle \equiv |0\rangle$) y puede excitarse al siguiente nivel ($|e\rangle \equiv |1\rangle$). Este sistema nos permite obtener las puertas cuánticas de un qubit; más tarde el movimiento armónico de los iones nos permitirá simular una puerta CNOT.

⁵ Normalmente, alcalinoterreos (berilio, calcio, bario...)

⁶ También llamado trampa de Paul

El sistema más grande con coherencia completa ha sido de 14 qubits, y con coherencia parcial 40.

5.3.1 Hamiltoniano de Jaynes-Cummings

Describe a un sistema con dos niveles, fundamental ($|g\rangle$) y excitado ($|e\rangle$), y un número variable de fotones. El sistema de dos niveles está en un espacio \mathbb{C}^2 , y el de fotones en \mathcal{H}_γ , de forma que el hamiltoniano está en $\mathbb{C}^2 \otimes \mathcal{H}_\gamma$.

El sistema puede absorber un fotón $\hbar\omega$ y excitarse, o desexcitarse y emitir un fotón $\hbar\omega$; el hamiltoniano tiene una parte que describe el sistema de dos estados:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{states}} &= \frac{1}{2}\hbar\omega_{\text{at}}Z \otimes \mathbb{I} \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega_{\text{at}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I}\end{aligned}\quad (5.10)$$

donde $\hbar\omega_{\text{at}}$ es la diferencia de energías entre los niveles (fig 1). Notar como en el excitado la energía es mayor. Añadimos una parte de fotones no interactuantes:

$$\mathcal{H}_\gamma = \hbar\omega a^\dagger a \quad (5.11)$$

Y por último, la interacción de los fotones con el sistema:

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar\varepsilon(\sigma_- \otimes a^\dagger + \sigma_+ \otimes a) \quad (5.12)$$

donde ε es una cantidad muy pequeña, que nos da un acoplo débil entre los sistemas. Los sumandos corresponden a emitir un fotón y absorberlo, respectivamente. En resumen,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega_{\text{at}}Z \otimes \mathbb{I} + (\hbar\omega I) \otimes (a^\dagger a) + \hbar\varepsilon(\sigma_- \otimes a^\dagger + \sigma_+ \otimes a) \quad (5.13)$$

Notamos que $\text{span}\{|e\rangle|0\rangle, |g\rangle|1\rangle\}$ es un subespacio invariante del hamiltoniano, y lo escribimos en dicha base:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \hbar\omega_{\text{at}} \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} + \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \hbar\varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \hbar \begin{pmatrix} -\delta & \varepsilon \\ \varepsilon & \delta \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (5.14)$$

Donde el primer sumando no es más que un factor de fase y $\delta = \frac{1}{2}(\omega - \omega_{\text{at}})$. Con un poco de álgebra calculamos el operador evolución:

$$U(t) = e^{-i\frac{\omega}{2}t} \left[\cos(\Omega t)\mathbb{I} - i\sin(\Omega t) \begin{pmatrix} \delta/\Omega & \varepsilon/\Omega \\ \varepsilon/\Omega & -\delta/\Omega \end{pmatrix} \right] \quad (5.15)$$

donde $\Omega = \sqrt{\delta^2 + \varepsilon^2}$ es la *frecuencia de Rabi*, que da la frecuencia de la transición entre los dos niveles atómicos, y es lo que se mide experimentalmente.

Consideramos dos situaciones, $\omega \simeq \omega_{\text{at}}$ (resonancia) y $|\omega - \omega_{\text{at}}| \gg 0$ (no resonancia).

No resonancia Si $|\delta| \gg \varepsilon$, podemos escribir el operador evolución como

$$U(t) \simeq e^{-i\frac{\omega}{2}t} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix}. \text{ Si el ión estaba en el estado } |e\rangle|0\rangle \text{ o}$$

en el $|g\rangle|1\rangle$, se mantiene en él salvo factor de fase. Es lo esperable, ya que “iluminamos” con una luz que no excita la resonancia.

\mathcal{H}_γ tiene como base $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots\}$. Todos los fotones tienen la misma frecuencia.

$$\begin{aligned}\sigma_- &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_+ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Resonancia Ahora tenemos $U(t) \simeq e^{-i\frac{\omega}{2}t} \begin{pmatrix} \cos(\Omega t) & -i \sin(\Omega t) \\ -i \sin(\Omega t) & \cos(\Omega t) \end{pmatrix}$, que podemos reescribir como $U(t) \simeq e^{-i\frac{\omega}{2}t} e^{-i\Omega t X}$. “Iluminando” a la frecuencia correcta, el tiempo adecuado, podemos ir del estado $|g\rangle$ al $|e\rangle$ y viceversa.

Una vez resuelto el problema de las puertas cuánticas de un qubit mediante excitaciones con láseres, contemplamos la posibilidad de la red de iones de entrar en movimiento colectivo, de forma que aparezcan *fonones*.

5.3.2 Cadena de osciladores acoplados

El hamiltoniano cuántico de n osciladores cuánticos con condiciones de contorno periódicas es

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \frac{P_n^2}{2m} + \frac{1}{2} k_0 X_n^2 + \frac{1}{2} k_I (X_n - X_{n+1})^2 \quad (5.16)$$

donde se ha introducido un término $\frac{1}{2} k_0 X_n^2$ que modela la trampa de Paul de cada ión. Escribimos el hamiltoniano en función de los modos normales de oscilación:

$$\mathcal{H} = \sum_{q=-\frac{N}{2}+1}^{N/2} \frac{\tilde{P}_q^\dagger \tilde{P}_q}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_q^2 \tilde{X}_q^\dagger \tilde{X}_q \quad (5.17)$$

con relación de dispersión

$$\omega_q^2 = \frac{k_0 + k_I \sin^2\left(\frac{q\pi}{n}\right)}{m} \quad (5.18)$$

Si bien este hamiltoniano es más sencillo, no está diagonalizado. Para ello, empleamos los operadores de creación y destrucción sobre cada q :

$$a_q = \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}} \tilde{X}_q + \frac{i}{\sqrt{2m\omega_q\hbar}} \tilde{P}_q \quad (5.19)$$

$$a_q^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}} \tilde{X}_q - \frac{i}{\sqrt{2m\omega_q\hbar}} \tilde{P}_q \quad (5.20)$$

de forma que

$$\mathcal{H} = \sum_q \hbar \omega_q (a_q^\dagger a_q + 1/2) = E_0 + \sum_q \hbar \omega_q a_q^\dagger a_q \quad (5.21)$$

donde a $E_0 = \sum_q \frac{1}{2} \hbar \omega_q$ se le denota *energía del vacío*, y se suele redefinir como $E_0 = 0$.

Sobre el estado $|0\rangle$ (vacío) obtenemos $\mathcal{H} |0\rangle = 0$, de forma que la energía del vacío es nula.

Si actuamos sobre el vacío con a_q^\dagger , obtenemos una partícula con momento q , $|q, 1\rangle$. Actuando varias veces, se obtiene $\frac{1}{\sqrt{n!}} (a_q^\dagger)^n |0\rangle = |q, n\rangle$ con energía $n\hbar\omega_q |q, n\rangle$.

El estado más general será

$$|q_1 n_1; q_2 n_2; \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} (a_{q_1}^\dagger)^{n_1} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} (a_{q_2}^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \quad (5.22)$$

de energía $\sum_i n_i \hbar \omega_{q_i}$.

Como ya se vió,

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$[X_n, P_{n'}] = i\hbar \delta_n^{n'}$$

k_I significa k de interacción.

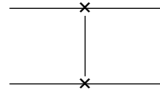
Los operadores con tilde (\tilde{A}) están en el espacio de frecuencias, por ejemplo

$$\tilde{P}_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{2\pi i \frac{qn}{N}} P_n$$

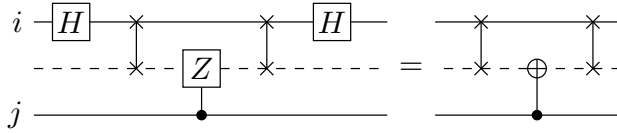
Si representamos $\omega_q(q)$ mediante la relación de dispersión (figura 5.1) vemos que necesitamos una energía para pasar del estado fundamental a crear una partícula, el *mass gap*, correspondiente a la energía de $|q = 0, n = 1\rangle$. Los fotones carecen de él, por ejemplo, al no tener masa. Esto implica que hay fotones de energía arbitrariamente baja, y podemos crearlos con una cantidad de energía arbitrariamente baja.

Contemplando la variación en la energía por los fonones (figura 5.2), pasamos a tener estados de la forma $|ij\rangle$, significando i fotones y j fonones.

Los niveles de fonones servirán como niveles auxiliares, lo cual nos permite pasar de tener puertas unitarias a puertas de dos qubit. Excitaciones de frecuencia ω_{at} nos cambian el número de fotones (otorgándonos puertas de un qubit arbitrarias), y de frecuencia $\omega_{\text{at}} - \omega_{\text{phonon}}$ ambos. Con ello, concluimos que una excitación con esta última frecuencia es equivalente a una puerta *swap* entre fonones y fotones:



Con todas estas puertas, podemos lograr una CNOT:



Notar que el fonón, que actúa colectivamente, nos permite acoplar iones i con iones j .

La puerta CNOT, junto a las puertas de un qubit, nos permite construir cualquier circuito cuántico, de forma similar a como la puerta XOR en circuitos clásicos permite simular cualquier circuito.

En la práctica, los fonones tienen tiempos de coherencia bajos, a diferencia de los iones, y dificultan la construcción de estos aparatos. Hay propuestas alternativas, basadas por ejemplo en semiconductores.

5.3.3 Cadena continua de osciladores

Es un problema interesante, ya que sirve como introducción a la teoría cuántica de campos. El paso más grande conceptualmente es sustituir X_n , con $n \in \mathbb{N}$, por $\xi(x)$.

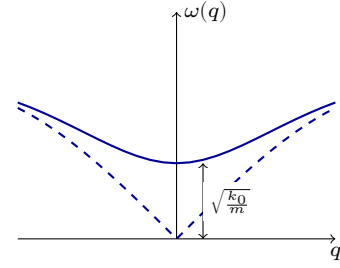


Figura 5.1: El *mass gap*, de valor $\sqrt{\frac{k_0}{m}}$, nos da (vía \hbar/c^2) la masa de los fonones.

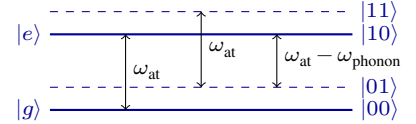


Figura 5.2: Niveles de energía de un ión. Las excitaciones por fonones nos añaden nuevos niveles (en línea discontinua). A la derecha se muestra $|ij\rangle$, correspondiente al número i de fotones y al número j de fonones. Se muestra en línea discontinua la $\omega(q)$ de una partícula sin masa, como un fotón, para la que el *mass gap* es nulo.

Parte II

Mecánica cuántica relativista

6

Mecánica cuántica no relativista de Feynmann

6.1 Acción clásica

La acción clásica se define como

$$S = \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\dot{x}, x) dt \quad (6.1)$$

quedando el sistema completamente descrito por $\dot{x}(t), x(t)$. Para hallarlas, imponemos que

$$\frac{\delta S}{\delta x} = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right) = 0 \quad (6.2)$$

Integrando por partes,

$$\int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \delta x dt \quad (6.3)$$

Como tiene que ser cero para variaciones arbitrarias, $\left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = 0$, lo que nos da junto a las condiciones de contorno iniciales las trayectorias del sistema en el espacio de fases.

6.2 Formulación de Feynmann

Si bien es completamente equivalente a otras formulaciones, es especialmente conveniente para realizar la segunda cuantificación.

Imaginemos un experimento de doble rendija. Tenemos un punto emisor en (x_a, t_a) que emite electrones. Vemos que al tapar una rendija todos los puntos se acumulan en el detector final en una posición, y de forma similar para la otra. Bajando la intensidad del haz de electrones, podemos ver que a pesar de lanzar sólo un electrón, las interferencias provocadas por no tapar ninguna rendija siguen provocándose. *El electrón interfiere consigo mismo, no con los demás.*

Conceptualmente, puedo añadir más paredes tras la doble rendija, demostrando que *el electrón sigue todas las trayectorias posibles.*

Vemos que si bien en mecánica clásica el electrón sigue una trayectoria definida en el espacio de fases, en cuántica el electrón sigue todas las trayectorias posibles entre dos puntos dados. Formalizamos esto definiendo un intervalo $t + dt$ y $x + dx$ y calculando la probabilidad de que el electrón cruce ese punto, que no es más que el módulo de la función de ondas $\Psi(x, t)$ al cuadrado.

Definimos el *propagador de Feynmann* $k(\mathbf{b}, \mathbf{a})$ como $\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle$, la probabilidad de dicha transición:

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \sum_n e^{-i\frac{t}{\hbar}(t_b - t_a)} \varphi_n(x_b) \varphi_n^*(x_a) \quad (6.4)$$

Vemos por ejemplo que cuando $t_b - t_a \rightarrow \infty$, la función de ondas acaba cayendo al estado fundamental, siendo la probabilidad de otros estados nula.

Si tomamos un tiempo imaginario, $t/\hbar \simeq \beta$ y tenemos una conexión con la mecánica estadística (aparece una suma de energías $e^{\beta E}$).

Hasta aquí, se tiene una formulación estándar de la mecánica cuántica. El paso de Feynmann fue suponer que

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \sum_{\text{tray.}} e^{iS(x)/\hbar} \quad (6.5)$$

escribiendo el propagador como suma de trayectorias. El propagador equivale a trabajar con ondas, mientras que la mecánica clásica es la aproximación de esas ondas a rayos, de forma análoga a la óptica.

Vemos que en el límite en que $S(x) \gg \hbar$, cambiando infinitesimalmente las trayectorias obtenemos grandes variaciones de fase, cancelándose dicha contribución¹. Las únicas que no se cancelan son las que cumplen que no varían, $\frac{\delta S(x)}{\delta x} = 0$, recuperando para acciones grandes la mecánica clásica.

Para formalizar esta idea intuitiva, discretizamos las coordenadas espaciales y temporales, $t_n = t_0 + n\varepsilon$ y $x(t_n) = x_n$, además de $t_b - t_a = N\varepsilon$. Calculamos la acción:

$$S = \int_{t_a}^{t_b} a \mathcal{L}(\dot{x}, x) dt = \varepsilon \sum_n \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_n) \right] \quad (6.6)$$

El propagador será, tomando el límite $\varepsilon \rightarrow 0$,

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{x_n - x_{n+1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_n) \right)} \quad (6.7)$$

de forma que

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \frac{1}{A} \int_{\mathbb{R}} \prod_{n=1}^{N-1} \frac{dx_n}{A} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{x_n - x_{n+1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_n) \right)} \quad (6.8)$$

con A una constante que se escogerá para que estas cuentas tengan sentido. Sabemos que $k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \int_{\mathbb{R}} k(\mathbf{b}, \mathbf{c}) k(\mathbf{c}, \mathbf{a}) \frac{dx_c}{A}$. Introduciendo eso en la ecuación anterior,

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \int_{\mathbb{R}} \prod_{n=0}^{N-1} k(x_{n+1}, x_n) dx_n \quad (6.9)$$

y

$$k(x_{n+1}, x_n) = \frac{1}{A} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} L\left[\frac{x_{n+1} - x_n}{\varepsilon}, V(x_n)\right]}$$

Para calcular A , consideramos una partícula libre².

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=0}^{N-1} \frac{dx_n}{A} e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \sum_{n=0}^{N-1} (x_n - x_{n+1})^2} \quad (6.11)$$

¹ De forma similar, $\sum_{\alpha} e^{i\alpha} \simeq 0$.

La generalización a más dimensiones es trivial. El lagrangiano se supone $\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{x}(t)^2 - V(x)$.

Notar como hasta ahora no a aparecido ningún operador cuántico, y la formulación es completamente clásica.

²

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{2} m \int_{t_a}^{t_b} \dot{x}(t)^2 dt \\ &\rightarrow \frac{\varepsilon m}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{x_n - x_{n+1}}{\varepsilon} \right)^2 \end{aligned} \quad (6.10)$$

que es idéntico a

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=0}^{N-1} \frac{dx_n}{A} e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \sum_{n=1}^N (-x_{n-1} + x_n)} \quad (6.12)$$

Reescribimos la integral como

$$\begin{aligned} I_G(A, B) &= \int_{\mathbb{R}} \prod_{n=1}^N dx_n e^{-\sum_{i,j=1}^N x_i A_{ij} x_j + \sum_{n=1}^N (B_n + B_n^*) x_n} \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx_n t e^{-(x|Ax) + (B|x) + (x|B)} \end{aligned} \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2 + bx} dx &= \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} e^{\frac{b^2}{4\lambda}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\lambda x^2 + bx)} dx &= \sqrt{\frac{i\pi}{\lambda}} e^{\frac{-ib^2}{4\lambda}} \end{aligned}$$

donde se han utilizado productos escalares. Obtenemos, consultando tablas de integrales,

$$I_G(A, B) = \frac{\pi^{N/2}}{(\det A)^{1/2}} e^{(B|A^{-1}B)} \quad (6.14)$$

Por lo tanto, aplicando esto,

$$\begin{aligned} k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) &= \left(\frac{1}{A}\right)^N \int_{\mathbb{R}} \prod_{n=1}^{N-1} dx_n e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x_0^2 + x_N^2 + 2x_1^2 - x_0x_1 - x_1x_2 + 2x_2^2 + \dots)} \\ &= \left(\frac{1}{A}\right)^N \int_{\mathbb{R}} \prod_{n=1}^{N-1} dx_n e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x_0^2 + x_N^2 + (x|y) + (y|x) + (x|Bx))} \end{aligned} \quad (6.15)$$

donde se ha desarrollado el sumatorio.

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \left(\frac{1}{A}\right)^N \frac{\pi^{\frac{N-1}{2}}}{(\det B)^{1/2}} \frac{1}{\left(\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N-1}{2}}} e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x_0^2 + x_N^2 - (y|B^{-1}y))} \quad (6.16)$$

Necesitamos calcular el determinante de B , que no es más que $\det B = \prod_{n=1}^{N-1} \frac{n+1}{n} = N$ tras diagonalizar la matriz. Para $(y|B^{-1}y)$ puede parecer que hay que invertir B , pero recordando la forma de y sólo necesitamos unos cuantos elementos. *At the end of the day*, obtenemos

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \left(\frac{1}{A}\right)^N \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{N^{1/2}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_b - x_a)^2}{N\varepsilon = t_b - t_a}} \quad (6.17)$$

Esta expresión es conocida en mecánica cuántica, y tiene valor

$$\int e^{-i \frac{E_k(t_b - t_a)}{\hbar}} \varphi^*(x_a) \varphi(x_b) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}\right)^{1/2} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}} \quad (6.18)$$

Para que coincidan, necesitamos

$$A = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{1/2} \quad (6.19)$$

Con ella, se tiene definido el propagador y como calcularlo, todo con mecánica clásica. A continuación, veamos si se puede recuperar la ecuación de Schrödinger.

- Ψ es la probabilidad de que la partícula esté en un punto del espacio de fases.
- $k(\mathbf{b}, \mathbf{a})$ es la probabilidad de que esté en un punto *viniendo de otro*.

$$\begin{aligned} x &= (x_1, x_2, \dots, x_{N-1})^T \text{ y } y = \\ &= (x_0, 0, 0, \dots, 0, x_N)^T. \text{ La matriz } B \text{ será} \\ B &= \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \\ E_k &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \end{aligned}$$

Por tanto,

$$\Psi(x, t) = \int k(x, t; x_a, t_a) \Psi(x_a, t_a) dx_a \quad (6.20)$$

de forma que la función de ondas está relacionada con el propagador de Feynmann. Escribamos (6.20) en un intervalo de tiempo corto:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t + dt) &= \int \frac{dy}{A} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{x-y}{\varepsilon} \right)^2 - V(x) \right]} \\ &= \Psi(x, t) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x) \Psi(x, t) + \frac{1}{2} \frac{d^2 \Psi(x, t)}{dx^2} \int \eta^2 e^{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \eta^2} \frac{d\eta}{A} + \dots \end{aligned} \quad (6.21)$$

desarrollando en serie de Taylor $\Psi(x + \eta, t)$.

Obtenemos

$$i\hbar \left(\frac{\Psi(x, t + dt) - \Psi(x, t)}{\varepsilon} \right) = \frac{-1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (6.22)$$

Tomando $\varepsilon \rightarrow 0$, recuperamos $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \mathcal{H} \Psi(x, t)$.

6.3 Oscilador armónico

Antes de resolverlo, veamos una propiedad especial de la acción. Sea un lagrangiano $\mathcal{L} = a_0 \dot{x}(t)^2 + a_1 x(t) \dot{x}(t) + a_2 x(t)^2 + a_3 x(t) + a_4$. Tiene todos los términos hasta orden $\mathcal{O}(x^2)$ excepto el de \dot{x} , pero este no es necesario, ya que $\int_{t_a}^{t_b} a_5 \dot{x}(t) dt$ se puede escribir integrando por partes como $\int_{t_a}^{t_b} \frac{da_5(t)}{dt} x(t) dt + a_5(t) x(t) \Big|_{t_a}^{t_b}$. El primer término lo podemos meter con los demás, y el segundo se elimina sin más que mover el origen de las acciones.

La acción clásica nos dará una \bar{x} tal que

$$\left. \frac{d}{dt} \frac{\partial S}{\partial \dot{x}} \right|_{x=\bar{x}} = \left. \frac{\delta S}{\delta x} \right|_{x=\bar{x}} \quad (6.23)$$

Escribo mi trayectoria como la clásica, $\bar{x}(t)$, más una desviación $y(t)$:

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t) \dot{x}(t) = \bar{\dot{x}}(t) + \dot{y}(t) \quad (6.24)$$

donde $\bar{x}(t_a) = x_a \rightarrow y(t_a) = 0$ e igual para t_b .

Sustituyendo en el lagrangiano, obtendré el lagrangiano clásico $\mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\dot{x}})$ más términos extra.

Empleando el resultado del ejercicio 1.2³, notamos que es equivalente a $\mathcal{S}[x] = \mathcal{S}[\bar{x}] + \mathcal{S}[\dot{y}, y]$, y por tanto

$$\begin{aligned} k(\mathbf{b}, a) &= \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} [dx] e^{i\mathcal{S}/\hbar} = e^{i\mathcal{S}[\bar{x}, \bar{\dot{x}}]/\hbar} \int_{y(t_a)=0}^{y(t_b)=0} [dy] e^{i\mathcal{S}(\dot{y}, y)/\hbar} \\ &= e^{i\mathcal{S}[\bar{x}, \bar{\dot{x}}]/\hbar} F(t_b, t_a) \end{aligned} \quad (6.25)$$

de forma que $F(t_b, t_a) = \frac{1}{A} \int \prod \frac{dy_n}{A} e^{i\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum \mathcal{S}(y_n, y_{n+1})}$.

Utilizamos esto con el lagrangiano de un oscilador armónico, $\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{x}(t)^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x(t)^2$. La ecuación del movimiento es

$$m \omega^2 x(t) = -m \ddot{x}(t) \quad (6.26)$$

³

$$\mathcal{S}[x] = \mathcal{S}[\bar{x}] +$$

$$\int_{t_a}^{t_b} (a_0 \dot{y}^2 + a_1 y \dot{y} + a_2 y^2 + a_3 y + a_4) dt$$

con las condiciones de contorno $x(t_a) = x_a$ y $x(t_b) = x_b$, de forma que

$$\bar{x}(t) = x_a \cos(\omega(t - t_a)) + c \sin(\omega(t - t_a)) \quad (6.27)$$

La acción clásica es expresable como

$$\mathcal{S}[\bar{x}] = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} [(x_a + x_b)^2 \cos(\omega T) - 2x_a x_b] \quad (6.28)$$

con $T = t_b - t_a$.

Calculamos $F(T)$,

$$F(T) = \left(\frac{1}{A}\right)^N \int \prod_{n=1}^{N-1} dy_n e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{n=1}^N [(y_n - y_{n-1})^2 - m\omega^2 \epsilon^2 y_n^2]} \quad (6.29)$$

Los cálculos son similares a la última vez (partícula libre); llegamos a

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}\right)^{1/2} \quad (6.30)$$

con propagador

$$k(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)}\right)^{1/2} e^{\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} [(x_a^2 + x_b^2 \cos(\omega T)) - 2x_a x_b]} \quad (6.31)$$

que ha de ser igual a

$$\sum_n e^{-i(n+1/2)T/\hbar} \phi_n^*(x_a) \phi_n(x_b) \quad (6.32)$$

Si estamos en un número superior de dimensiones (N), el propagador será

$$k(\mathbf{b}, \mathbf{a}) = \left(\frac{1}{A}\right)^{3N} \int [d\mathbf{x}] e^{i\mathcal{S}[\mathbf{x}]/\hbar} \quad (6.33)$$

Por ejemplo, para el caso libre se obtiene

$$k(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a) = \left(\frac{1}{A}\right)^{3N} \int \prod_{k=1}^{N-1} dx_n dy_k dz_k e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon}\right)^2 + \left(\frac{y_n - y_{n-1}}{\epsilon}\right)^2 + \left(\frac{z_n - z_{n-1}}{\epsilon}\right)^2 \right]} \quad (6.34)$$

Vemos que al tener un lagrangiano separable, el propagador es escribible como producto de propagadores.

7

Breve repaso de la relatividad especial

7.1 Notación

Comencemos por introducir la notación más usual en teoría cuántica de campos. Tendremos vectores contravariantes $x^\mu = (ct, x, y, z) = (ct, \mathbf{x})$. Los tensores contravariantes se transforman¹ según

$$ct' = \frac{ct - \beta x}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (7.1)$$

$$x' = \frac{x - \beta ct}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (7.2)$$

$$y' = y \quad (7.3)$$

$$z' = z \quad (7.4)$$

con $\beta = v/c$. De forma más compacta,

$$x'^1 = \gamma(x^1 - \beta x^0) \quad (7.5)$$

y x^2, x^3 se mantienen constantes.

A cualquier vector de cuatro componentes que cumpla estas transformaciones, se le denotará *cuadrivector bajo el grupo de Lorentz*. Veremos que, por ejemplo, $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$ o $J^\mu = (c\rho, \mathbf{J})$, o $p^\mu = (\frac{E}{c}, \mathbf{p})$ lo son.

Los vectores covariantes se definen como

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu \quad (7.6)$$

con

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.7)$$

donde se emplea el convenio de Einstein, y se sobreentiende un sumatorio sobre índices repetidos.

Notamos que $x^\mu x_\mu = c^2 t^2 - \mathbf{x}^2$ es un invariante, y que el tensor métrico $g_{\mu\nu}$ es el que nos permite subir y bajar índices².

Tratamos de escribir las ecuaciones de Lorentz con un tensor Λ_ν^μ , de forma que $x'^\mu = \Lambda_\nu^\mu x^\nu$. Obtenemos

$$\Lambda_\nu^\mu = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

Los índices griegos varían en $\{0, 1, 2, 3\}$ y los latinos en $\{1, 2, 3\}$. Los latinos expresan coordenadas espaciales, y la componente 0 expresa el tiempo.

¹ Se supone la velocidad en el eje \hat{x} . Si no, basta con rotar el sistema de referencia.

² Subir y bajar índices temporales no cambia el signo, pero sí bajar y subir índices espaciales.

con $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$. Puede comprobarse que $x'_\mu = \Lambda_\mu^\eta x_\eta$, donde

$$\Lambda_\mu^\nu = \begin{pmatrix} \gamma & +\beta\gamma & 0 & 0 \\ +\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

y $\Lambda_\mu^\nu \Lambda_\nu^\mu = \mathbb{I}$. Para describir estas transformaciones como rotaciones en el grupo de Lorentz, se define $\tanh(\omega) = \beta$ de forma que $\cosh \omega = \gamma$. En tal caso,

$$\Lambda_\nu^\mu = \begin{pmatrix} \cosh \omega & -\sinh \omega & 0 & 0 \\ -\sinh \omega & \cosh \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

Definiremos producto escalar³ de un vector consigo mismo como $x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu$, de forma que obtengamos el invariante $(ct)^2 - \mathbf{x}^2$. Notamos que si $x^\mu = (ct, \mathbf{x})$, se tiene

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu = (ct, -\mathbf{x}) \quad (7.11)$$

Vemos que, en efecto, $x'^\mu x'_\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu \Lambda_\mu^\sigma x_\sigma = x^\nu x_\sigma \delta^{\sigma,\nu} = x^\nu x_\nu$.

Notando que esto sólo es un caso particular (movimientos en \hat{x}), nos preguntamos por el caso general; simplemente hay que rotar el tensor métrico y las Λ , que adquieren una expresión matricial mucho más complicadas. En lo que sigue, nos limitaremos a rotar los sistemas de forma que podamos emplear las expresiones anteriores.

Definimos el elemento diferencial de tiempo propio, $d\tau$, como $\frac{1}{c} \sqrt{dx^\mu dx_\mu} = dt \sqrt{1 - \beta^2} = dt \gamma^{-1}$. Notamos que es invariante.

Las velocidades se definen como $u^i = \frac{dx^i}{dt} = c \frac{dx^i}{dx^0}$. Con esta definición, podemos ver como se transforman sus componentes. En general, nos fijamos en como se transforman las derivadas, nos fijamos en que $x^\mu x_\mu$ es invariante e igual a $x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu$. Derivamos dicha expresión frente a x^σ ,

$$\frac{\partial}{\partial x^\sigma} (x^\mu x_\mu):$$

$$\frac{\partial}{\partial x^\sigma} x^\mu x_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\sigma} x^\mu x_\mu g_{\mu\nu} = x^\nu g_{\mu\nu} \delta_\sigma^\mu + x^\mu g_{\mu\nu} \delta_\sigma^\nu = x_\sigma + x_\sigma = 2x_\sigma \quad (7.12)$$

Vemos que se transforma como un vector covariante. .

³ A pesar de no ser definido positivo.

Obtenemos 1 cuando $\sigma = \nu$ o el índice correspondiente por la misma razón que $\frac{dx}{dx} = 1$ y $\frac{dx}{dy} = 0$

7.2 Potencial y tensor electromagnético

Recordamos las ecuaciones⁴ de Maxwell,

$$\begin{aligned} \nabla \mathbf{B} &= 0 & \nabla \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} \\ \nabla \mathbf{E} &= 4\pi \rho & \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} &= 0 \end{aligned}$$

Introducimos un campo electromagnético $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$, de forma que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ y $\mathbf{E} = -\nabla A^0 - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}$. ϕ es el potencial escalar usual. Inmediatamente,

$$\nabla \mathbf{B} = \nabla(\nabla \times \mathbf{A}) = 0 \quad (7.13)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} = -\nabla \times (\nabla A^0) - \frac{1}{c} \nabla \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} = \dots = 0 \quad (7.14)$$

⁴ En ocasiones se emplearán unidades de Gauss para aliviar las ecuaciones.

De forma que se cumplen ya dos de las ecuaciones de Maxwell. Para las otras dos, definimos el *tensor electromagnético*:

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu = -F^{\nu\mu} \quad (7.15)$$

Al ser un tensor antisimétrico, la diagonal está llena de ceros. En el resto de los componentes, se tiene

$$F^{0i} = -E^i \quad (7.16)$$

$$F^{jk} = -\epsilon^{jkl} B^l \quad (7.17)$$

En forma matricial,

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -B^3 & -B^2 \\ E^2 & B^3 & 0 & -B^1 \\ E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.18)$$

y para $F_{\mu\nu}$,

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E^1 & E^2 & E^3 \\ -E^1 & 0 & -B^3 & -B^2 \\ -E^2 & B^3 & 0 & B^1 \\ -E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.19)$$

Con él, podemos ver como en $\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} J^\nu$ están las dos ecuaciones de Maxwell restantes. Con $\nu = 0$ recuperamos $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$, y con ν distinto de cero, recuperamos $\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}$.

Se emplea $J^\mu = (c\rho, \mathbf{J})$

Por lo tanto, sustituimos las ecuaciones de Maxwell por

$$\boxed{\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} J^\nu} \quad (7.20)$$

definiendo $\mathbf{B} = \nabla \mathbf{A}$ y $\mathbf{E} = -\nabla A^0 - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}$.

Por su utilidad posterior, definimos un escalar, la *densidad lagrangiana*; es el equivalente del lagrangiano en campos:

$$\mathbb{L} = \frac{-1}{16\pi} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2) \quad (7.21)$$

También se define el análogo al hamiltoniano, que en mecánica clásica sólo tiene un componente, el *tensor energía-impulso*:

$$T^{\mu\nu} = \sum_\alpha \frac{\delta \mathbb{L}}{\delta(\partial_\mu A_\alpha)} \partial^\nu A_\alpha - g^{\mu\nu} \mathbb{L} \quad (7.22)$$

Su componente $T^{00} = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) + \frac{1}{4\pi} (\mathbf{E} \cdot \nabla A^0)$ es la densidad de energía del campo electromagnético.

7.2.1 Invariancia Gauge

Imaginemos un campo electromagnético $A'^\mu = A^\mu + \partial^\mu \Lambda$. Entonces,

$$A'^0 = A^0 + \partial^0 \Lambda \quad (7.23)$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (7.24)$$

Obtenemos que $\mathbf{B}' = \nabla \mathbf{A}' = \nabla \mathbf{A} = \mathbf{B}$, y de forma similar para el campo eléctrico obtenemos $\mathbf{E}' = -\nabla A^0 - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}' = \dots = \mathbf{E}$. De forma más elaborada, también se concluye que $F'^{\mu\nu} = F^{\mu\nu}$.

Concluimos que hay varios campos electromagnéticos que nos dan el mismo campo \mathbf{E} y \mathbf{B} . Esto nos permite tener unos grados de libertad extra, que se fijarán en función de lo que más convenga para el problema a tratar.

A simplificar los campos explotando esta propiedad se le llama *transformación gauge*. Entre las más usadas, está el *gauge de Coulomb*, que tiene dos versiones:

- En presencia de cargas eléctricas, se suele fijar $\nabla \mathbf{A}' = 0$, también llamado *gauge transversal*. Para ello, se escoge

$$\Lambda(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \nabla \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (7.25)$$

Sin cargas, A'^0 se puede tomar nulo.

- En ausencia de cargas eléctricas, fijamos $A'^0 = 0$; se suele denotar a este gauge *gauge de radiación*. Para ello, empleamos

$$\Lambda'(\mathbf{r}) = -c \int_{t_0}^t A^0 dt' \quad (7.26)$$

con t_0 un valor arbitrario de t , por ejemplo cero.

Uno de los inconvenientes que tiene el gauge de Coulomb es que no es covariante. Por ello, a veces se emplea el *gauge de Lorentz*, definido como

$$\partial_\mu A^\mu = 0 \quad (7.27)$$

que es invariante Lorentz.

8

La ecuación de Klein-Gordon

Partimos de $E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$, y empleando $E = i\hbar \partial_t$ y $\mathbf{p} = i\hbar \nabla$, obtenemos la *ecuación de Schrödinger no relativista*,

$$i\hbar \partial_t \Psi = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4} \cdot \Psi \quad (8.1)$$

Se abandonó rápidamente por ser no local y complicada de manejar. Se quiere una ecuación de primer orden en la derivada respecto del tiempo, de forma que baste con dar $\Psi(t_0)$ como condición de contorno. Como no se puede obtener esto, nos conformamos con una ecuación de segundo orden; empleando E^2 en lugar de E , para eliminar la raíz, obtenemos

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = (-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4) \Psi \quad (8.2)$$

Dividiendo entre c^2 , se puede escribir como

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = 0 \quad (8.3)$$

con $\square = \partial_\mu \partial^\mu$ el *D'Alembertiano*.

Resolver esta ecuación es trivial, ya que se conocen los autoestados de ∇ ; tomando $\Psi = \frac{1}{(2\pi)^4} e^{iP_\mu x^\mu / \hbar}$ nos queda $p_0^2 = \frac{E^2}{c^2} = \mathbf{p}^2 + m^2 c^2$, obteniendo el resultado esperado ($|E| = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$). Notamos que $E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$, de forma que nos aparece un signo nuevo.

E no está acotada inferiormente, lo que nos imposibilita tener un estado fundamental y un origen de energías. No obstante, se empleará este resultado, hasta que se realice una segunda cuantificación y se introduzca la antimateria.

Notamos también que $\int \rho d^3x = 1$, pero el volumen cambia al realizar transformaciones de Lorentz. Por ello, para mantener la igualdad, ρ no puede ser simplemente $\Psi^* \Psi$, que es invariante.

Restando $\Psi(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}) \Psi^* = 0$ a su ecuación conjugada, obtenemos $\partial_\mu (\Psi^* \partial^\mu \Psi - \Psi \partial^\mu \Psi^*) = 0$, y podemos definir la corriente de probabilidad como

$$J^\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \partial^\mu \Psi - \Psi \partial^\mu \Psi^*) \quad (8.4)$$

de forma que tenemos una *cuadricorriente* que se conserva ($\partial_\mu J^\mu = 0$).

Notamos que $\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \rho = 0$, como se esperaba (la probabilidad se conserva). No obstante, ρ no es definida positiva, así que no se puede interpretar rigurosamente como una densidad de probabilidad. Esto se arregla introduciendo la antimateria en la segunda cuantización.

ρ denota la densidad de probabilidad.

De nuevo, se tiene $J^\mu = (c\rho, \mathbf{J})$, con

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc} (\Psi^* \partial^0 \Psi - \Psi \partial^0 \Psi^*) \quad (8.5)$$

$$\mathbf{J} = \frac{-i\hbar}{2mc} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (8.6)$$

Notando que hasta ahora todas las partículas eran libres, introducimos un campo electromagnético.

8.1 Interacción con un campo EM

Cambiamos $p^\mu = i\hbar\partial^\mu$ por $p^\mu - \frac{e}{c}A^\mu$ en $(\partial_\mu\partial^\mu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2})\Psi = 0$, de forma que obtenemos

$$\frac{1}{c^2} \left(i\hbar\partial_t - \frac{e}{c}A_0 \right) \left(i\hbar\partial_t - \frac{e}{c}A_0 \right) \Psi = \left[(i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 + m^2c^2 \right] \Psi \quad (8.7)$$

En el límite no relativista podemos escribir $\Psi = e^{-imc^2t/\hbar}\varphi$, y al introducirlo en la ecuación (despreciando la energía electrostática, entre otras aproximaciones) obtenemos

$$\left[2m(i\hbar\partial_t - eA_0) - \frac{i\hbar e}{c} \frac{\partial A_0}{\partial t} \right] \Psi = \left(i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \Psi \quad (8.8)$$

Si $\frac{\partial A_0}{\partial t} = 0$,

$$i\hbar\partial_t \Psi = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{i\hbar}{mc} \mathbf{A} \nabla + \frac{ie\hbar}{2mc} \partial_\mu A^\mu + eA_0 \right) \Psi \quad (8.9)$$

y volviendo a escribir $\Psi = e^{-imc^2t/\hbar}\varphi$ y realizando las aproximaciones pertinentes,

$$i\hbar\partial_t \varphi = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + eA_0 + \frac{i\hbar}{me} \mathbf{A} \nabla + \frac{ie\hbar}{2mc} \partial_\mu A^\mu \right) \varphi \quad (8.10)$$

En el gauge de Coulomb, el sumando $\partial_\mu A^\mu$ se anula. La ecuación es análoga a la que obtendríamos añadiendo a $i\hbar\partial_t$ el término eA_0 en la ecuación de Schrödinger.

Para la “densidad de probabilidad”, más bien interpretable como una densidad de carga, se obtiene

$$\rho = \frac{i\hbar e}{2m} \left[\Psi^* \partial_t \Psi - \Psi \partial_t \Psi^* + \frac{2ie}{\hbar c^2} A^0 \Psi^* \Psi \right] \quad (8.11)$$

Vemos que es similar a la densidad de probabilidad típica multiplicada por la carga, pero queda también multiplicada por el potencial. Esto hace que pueda cambiar de signo en algunas regiones, lo que puede resultar molesto.

8.2 Ecuación de Klein-Gordon como sistema de ecuaciones

Notando que la ecuación de Klein-Gordon

$$\frac{1}{c^2} (i\hbar\partial_t - eA_0) \Psi = \left[(i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 + m^2c^2 \right] \Psi$$

es una ecuación de segundo orden, la escribimos como dos ecuaciones de primer orden. Definimos

$$\varphi = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{i\hbar\partial_t - eA_0}{mc^2} \right] \Psi \quad (8.12)$$

$$\chi = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{i\hbar\partial_t - eA_0}{mc^2} \right] \Psi \quad (8.13)$$

y obtenemos

$$i\hbar\partial_t\Psi = i\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} = H_L\Psi \quad (8.14)$$

donde

$$H_L = eA_0\mathbb{I} + i\sigma_2\frac{(i\hbar\nabla + \frac{e}{c}A)^2}{2m} + \sigma_3\left[\frac{(i\hbar\nabla + \frac{e}{c}A)^2}{2m} + mc^2\right] \quad (8.15)$$

y σ_i son las matrices de Pauli. Al ser $H_L^2 = [(m^2c^4) + c^2(i\hbar\nabla + \frac{e}{c}A)^2]\mathbb{I}$, ambas componentes de Ψ cumplen la ecuación de Klein-Gordon por separado.

Obtenemos una densidad de carga

$$\rho = e(\varphi^*\varphi - \chi^*\chi) \quad (8.16)$$

Vemos que una componente va de acuerdo con la carga, mientras que la otra al revés. Empezamos a obtener resultados que nos recuerdan a partículas y antipartículas.

Si empleamos una partícula libre $\Psi = \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}e^{-i(Et-\mathbf{p}\mathbf{x})/\hbar}$, obtenemos que $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$, con autofunciones para $E > 0$

$$\Psi_{\mathbf{p}}^+ = \begin{pmatrix}a^+\\ b^+\end{pmatrix}e^{-iP_\mu x^\mu/\hbar} = \begin{pmatrix}a^+\\ b^+\end{pmatrix}e^{-i(Et-\mathbf{p}\mathbf{x})/\hbar} \quad (8.17)$$

con a^+, b^+ constantes. Para $E < 0$,

$$\Psi_{\mathbf{p}}^- = \begin{pmatrix}a^+\\ b^+\end{pmatrix}e^{+i(Et-\mathbf{p}\mathbf{x})/\hbar} \quad (8.18)$$

donde se ha empleado que $E(\mathbf{p}) = E(-\mathbf{p})$ y se ha cambiado el signo al momento ($\Psi_{\mathbf{p}}^-$ es en realidad $\Psi_{-\mathbf{p}}^-$) para obtener un invariante relativista en el paréntesis. En el límite no relativista ($E \simeq mc^2$) se obtiene

$$\Psi_{\mathbf{p}}^+ = \frac{1}{\sqrt{V}}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}e^{-iP_\mu x^\mu/\hbar} \quad (8.19)$$

$$\Psi_{\mathbf{p}}^- = \frac{1}{\sqrt{V}}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}e^{+iP_\mu x^\mu/\hbar} \quad (8.20)$$

vemos que la componente superior corresponde a la partícula no relativista moviéndose con momento p y las de abajo corresponden a una partícula similar de energía negativa y momento $-\mathbf{p}$. De nuevo, las ecuaciones señalan la existencia de antimateria.

Notamos que si en la ecuación de Klein-Gordon,

- Cambiamos la carga e por $-e$,
- el momento $i\hbar\nabla$ por $-i\hbar\nabla$,
- la energía E por $-E$, o Ψ por Ψ^* .

la ecuación es idéntica.

9

La ecuación de Dirac

En la teoría de la relatividad el tiempo es una coordenada más, y al mezclar las transformaciones de Lorentz todas las coordenadas se tiene que forzar una ecuación de primer orden en t , como se deseaba, implica forzar también que sea de primer orden en las coordenadas espaciales.

Partamos de una ecuación

$$i\hbar\partial_t\Psi = \left(-i\hbar\sum_{i=1}^3\alpha^i\partial_i + \beta mc\right)\Psi \quad (9.1)$$

donde los coeficientes matriciales α^j, β están por determinar. Con ella, tomando una onda plana $\Psi(x) = Ne^{i(\mathbf{p}\mathbf{x}-Et)/\hbar}$, se obtiene

$$\frac{E}{c} = \sum_{i=1}^3\alpha^i\mathbf{p}_i + \beta mc \quad (9.2)$$

y elevando al cuadrado ambos lados de la ecuación,

$$E^2 = c^2 \left(\sum_{ij}(\alpha^i\alpha^j)\mathbf{p}_i\mathbf{p}_j + c^3p\sum(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i) + \beta^2m^2c^4 \right) \quad (9.3)$$

Obtenemos una relación energía-momento, por lo que se ha de cumplir

$$\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0 \quad (9.4)$$

$$\frac{1}{2}(\alpha^i\alpha^j + \alpha^j\alpha^i) = \delta_i^j \quad (9.5)$$

$$\beta^2 = \mathbb{I} \quad (9.6)$$

Además, $(\alpha^i)^2 = \mathbb{I}$. La traza de α^i será obviamente igual a la traza de $\alpha^i\beta^2$ por ser $\beta^2 = \mathbb{I}$, luego

$$\text{tr}\alpha^i = \text{tr}\alpha^i\beta\beta = -\text{tr}\beta\alpha^i\beta = -\text{tr}\beta^2\alpha^i = -\text{tr}\alpha^i \quad (9.7)$$

De forma que $\text{tr}\alpha^i = 0$. De forma similar, $\text{tr}\beta = 0$. Como \mathcal{H} ha de ser autoadjunto, α^j, β deberán ser hermíticas, y debido a que $(\alpha^j)^2 = \beta^2 = 1$ sus valores propios serán ± 1 .

Concluimos,

- Las matrices α, β han de tener dimensión par para tener tantos valores propios $+1$ como valores propios -1 .
- Podrían tener dimensión dos, pero eso requeriría cuatro matrices y sólo hay tres matrices de Pauli (que anticonmutan como requerimos)¹. No nos queda más remedio que emplear matrices 4×4 .

Definimos el anticonmutador $\{A, B\} = AB + BA$.

¹ En una dimensión sí que es posible emplearlas, ya que sólo se necesitamos 3.

Se suele emplear

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (9.8)$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \quad (9.9)$$

con σ^i las matrices de Pauli.

Se define $\gamma = (\beta, \alpha^i)$ por comodidad, de forma que la ecuación quede como $(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\Psi = 0$. Empleando el convenio de Feynmann, que define para todo operador a su versión tachada $a_\mu\gamma^\mu = \not{a}$, obtenemos la ecuación de Dirac como

$$(i\hbar\not{\partial} - mc)\Psi = 0 \quad (9.10)$$

considerando la regla del acoplo mínimo, obtenemos para un campo EM

$$(i\hbar\not{\partial} - \frac{e}{c}\not{A} - mc)\Psi = 0 \quad (9.11)$$

Notar que las Ψ ya no son escalares, sino vectores de cuatro componentes. Es similar a los espinores χ de dos componentes, pero con cuatro.

9.1 Ecuación de Dirac en partículas libres

Tenemos

$$(i\hbar\not{\partial} - mc)\Psi = 0 \quad (9.12)$$

con $\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar} = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} e^{-iP_\mu x^\mu/\hbar}$. Notar que los componentes de Ψ son vectores de dos componentes. Introduciendo esta función de ondas en la ecuación de Dirac, obtenemos

$$\begin{pmatrix} -mc + \frac{E}{c} & -\boldsymbol{\sigma}\mathbf{P} \\ -\boldsymbol{\sigma}\mathbf{P} & -mc - \frac{E}{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = 0 \quad (9.13)$$

De esta forma,

$$\phi_0 = \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{P}}{E - mc^2}\chi_0 \quad (9.14)$$

y notamos que en el límite no relativista ϕ_0 es la componente mayoritaria. Resolviendo el sistema² se obtiene

$$^2 (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}) = \mathbf{A}\mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{A} \times \mathbf{B})$$

$$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} \quad (9.15)$$

y volvemos a encontrarnos con que existen partículas con energías negativas, a pesar de ser la densidad de probabilidad definida positiva. Por defecto, si no se indica el signo, nos referiremos a las soluciones positivas. Introducimos una $\lambda = \pm 1$, de forma que $E = \lambda E_p$.

La función de ondas queda

$$\Psi_{\lambda,P}(x) = N \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{P}}{mc^2 + \lambda E_p} \end{pmatrix} e^{-i(P_\mu x^\mu/\hbar)} \quad (9.16)$$

Notamos que en función del signo de λ la segunda componente gana relevancia o la pierde. Por ello, se suele escribir por convenio

$$\Psi_{+1,p} = N \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \frac{c\mathbf{o}\mathbf{P}}{mc^2 + E_p} \phi_0 \end{pmatrix} e^{-i(E_p t - \mathbf{P}\mathbf{x})/\hbar} \quad (9.17)$$

$$\Psi_{-1,p} = N \begin{pmatrix} \frac{-c\mathbf{o}\mathbf{P}}{mc^2 + E_p} \chi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} e^{-i(-E_p t - \mathbf{P}\mathbf{x})/\hbar} \quad (9.18)$$

De forma que en el límite no relativista siempre se resalta la componente más grande, ϕ_0 o χ_0 . Notamos que en la solución $\Psi_{-1,p}$ el exponente no es invariante relativista, y por ello definimos como convenio a las soluciones de energía positiva $\Psi^{(+)}$ con momento \mathbf{p} a $\Psi_{+1,p}$, y a las soluciones de energía negativa $\Psi^{(-)}$ como $\Psi_{-1,-p}$, de forma que cambiamos el signo del momento y arreglamos el exponente.

$$\Psi^{(+)} = N \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \frac{c\mathbf{o}\mathbf{P}}{mc^2 + E_p} \phi_0 \end{pmatrix} e^{-iPx/\hbar} \quad (9.19)$$

$$\Psi^{(-)} = N \begin{pmatrix} \frac{-c\mathbf{o}\mathbf{P}}{mc^2 + E_p} \chi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} e^{iPx/\hbar} \quad (9.20)$$

Teniendo en cuenta que la delta de Dirac se transforma como la inversa de su argumento, obtenemos

$$\int \Psi^\dagger \Psi d^3x = \delta_{\lambda'}^{\lambda} \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \frac{E_p}{mc^2} \quad (9.21)$$

para compensar la transformación de la δ^3 , y

$$N = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{E_p + \lambda mc^2}{2mc^2}} \quad (9.22)$$

Con estas condiciones, $\langle \Psi^+ | \Psi^- \rangle = 0$ y $\langle \Psi^+ | \Psi^+ \rangle = \langle \Psi^- | \Psi^- \rangle = \frac{E_p}{mc^2} \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$.

9.2 Operadores

Podemos definir algunos operadores que conmutan con \mathcal{H} . Definimos Σ como

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{o} & \\ & \mathbf{o} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \Sigma \quad (9.23)$$

de forma que $\mathbf{S}\mathbf{P}$ cumple $[\mathcal{H}, \mathbf{S}\mathbf{P}] = 0$.

Si bien se puede definir una base con los autovectores de dicho operador, es más usado el *operador helicidad*,

$$\Lambda_s = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{|\mathbf{p}|} \Sigma \mathbf{P} = \frac{1}{|\mathbf{p}|} \mathbf{S}\mathbf{P} \quad (9.24)$$

que es la proyección del espín sobre la dirección del momento. Por ejemplo, supongamos una partícula desplazándose en \hat{z} . El operador será

$$\Lambda_s = \frac{1}{p} \begin{pmatrix} p\sigma_z & 0 \\ 0 & p\sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \quad (9.25)$$

con $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$. Definiendo los autovectores de σ_z como $\xi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $\xi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, vemos que los autovectores de Λ_s son $\begin{pmatrix} \xi_{\pm 1/2} \\ 0 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} 0 \\ \xi_{\pm 1/2} \end{pmatrix}$.

Podemos escribir las soluciones de energía positiva con helicidad S como

$$\Psi_{p,S}^+ = N \begin{pmatrix} \xi_S \\ \frac{c\mathbf{op}}{E_p + mc^2} \xi_S \end{pmatrix} e^{-iPx/\hbar} \quad (9.26)$$

donde $\xi_s = \xi_{\pm 1/2}$, y

$$\Psi_{p,S}^- = N \begin{pmatrix} \frac{c\mathbf{op}}{E_p + mc^2} \xi_s \\ \xi_s \end{pmatrix} e^{iPx/\hbar} \quad (9.27)$$

A las partes de espinor (todo menos la exponencial) se les llama *espinores* u (en Ψ^+) y *espinores* v .

9.3 Paquetes de ondas planas, Zitterbewegung

Generamos un paquete de ondas planas, todas ellas con energía positiva:

$$\Psi_+(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \sqrt{\frac{mc^2}{E_p}} \sum_s C(p,s) u_s(p) e^{-iPx/\hbar} \quad (9.28)$$

donde C son los coeficientes de peso de cada p . El factor con la raíz sirve para garantizar la normalización al transformar el sistema de coordenadas.

Podemos calcular el promedio de la corriente J^i , obteniendo

$$J^i = c\bar{\Psi}\gamma^i\Psi$$

$$\langle J^i \rangle_+ = c \int d^3x \Psi_+^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^i \Psi_+(x) = \langle v_g \rangle \quad (9.29)$$

con v_g la velocidad de grupo. Para un paquete de ondas negativas se obtiene un resultado similar, teniendo en cuenta el signo de los momentos.

Consideremos un paquete general con ambos tipos de ondas, donde C son los coeficientes de las positivas y D los de las negativas. Obtenemos

$$\langle J^k \rangle = \int d^3p \left\{ \sum_s \left[(C^2 + D^2) \frac{c^2 p^k}{E_p} \right] \right\} + \dots \quad (9.30)$$

Notamos que aparecen junto a las velocidades de grupo términos de interferencia entre ambos estados (denotados "..."). Por lo tanto, $\frac{d\langle J^k \rangle}{dt} \neq 0$, teniéndose frecuencias de oscilación del orden de $\frac{2E_p}{\hbar} > 10 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$. Hay una enorme dificultad experimental en medir este efecto, llamado *Zitterbewegung*.

9.4 El átomo de hidrógeno

Tras el análisis de los potenciales centrales, tomamos unas ψ tales que

$$\psi_{j\ell m} = \begin{pmatrix} \frac{iG(r)}{r} \Omega_{j\ell m}(\theta, \phi) \\ -\frac{F(r)}{r} \Omega_{j\ell' m}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (9.31)$$

donde

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right) G = \left(\frac{E + mc^2}{\hbar c} + \frac{Z\alpha}{r}\right) F \quad (9.32)$$

y

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r}\right) F = \left(\frac{E - mc^2}{\hbar c} + \frac{Z\alpha}{r}\right) G \quad (9.33)$$

Ahora ya sólo hay que resolver estas ecuaciones.

Para $r \rightarrow 0$, obtenemos $F, G \sim r^{\pm\gamma}$, donde $\gamma = \sqrt{R^2 - (Z\alpha)^2}$.

Las funciones de onda tienen que ser normalizables, luego

$$\int \psi^\dagger \psi r^2 dr < \infty \rightarrow \int (|F|^2 + |G|^2) dr < \infty \quad (9.34)$$

como $\int_0^\infty \frac{1}{r^{2\gamma}} dr$ diverge para $\gamma > 1/2$, obtenemos que $\gamma \in [0, 1/2]$. Las funciones son normalizables, pero tienen divergencias cerca del origen para cantidades como la energía cinética y la potencial.

Adimensionalizamos la ecuación para simplificar su análisis, mediante $\rho = 2\lambda r$ y $\lambda = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{m^2 c^4 - E^2}$. Las ecuaciones quedan como

$$\frac{dG}{d\rho} = -\frac{\kappa}{\rho} G + \left(\frac{E + mc^2}{2\hbar c\lambda} + \frac{Z\alpha}{\rho}\right) F \quad (9.35)$$

$$\frac{dF}{d\rho} = +\frac{\kappa}{\rho} F - \left(\frac{E - mc^2}{2\hbar c\lambda} + \frac{Z\alpha}{\rho}\right) G \quad (9.36)$$

Tras la resolución de la ecuación diferencial, se obtiene

$$E_{n,j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(n-j-1/2 + \sqrt{(j+1/2)^2 - (Z\alpha)^2})^2}}} \quad (9.37)$$

Para $Z\alpha \ll 1$, se puede desarrollar la expresión de las energías de ligadura $W_{n,j} = E_{n,j} - mc^2$ en serie, obteniendo

$$W_{j,n} = -mc^2 \left[\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} + \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (9.38)$$

Es fácil ver cómo esta expresión refleja la energía obtenida para el átomo de hidrógeno mediante teoría de perturbaciones. El primer sumando es la energía de ligadura no relativista (Schrödinger), mientras que los demás se corresponden a la suma de la interacción espín-órbita, el término de Darwin y la corrección relativista (en primer orden) a la energía cinética.

Todavía es necesario pasar a segunda cuantización para desdoblar algunos niveles, cuya diferencia de energías se explica por el efecto Lamb. Hay que notar que la expresión de $E_{n,j}$ sólo tiene valores reales para $Z < \frac{1}{\alpha} \simeq 137$, esto es porque para Z mayor el hamiltoniano deja de ser autoadjunto.

Es posible simplificar el análisis tomando límites. Por ejemplo, si analizamos $r \rightarrow \infty$ las ecuaciones quedan como

$$\frac{dG}{d\rho} = \frac{E + mc^2}{2\hbar c\lambda} F$$

$$\frac{dF}{d\rho} = \frac{E - mc^2}{2\hbar c\lambda} G$$

Se obtiene $F \sim e^{-1/2\rho}$ y $G \sim e^{-1/2\rho}$.