

Introducción: fundamentos de Mecánica Cuántica

En estas notas vamos a resumir muy brevemente los postulados de la Mecánica Cuántica y algunas de sus principales propiedades desde la perspectiva de su aplicación posterior en las prácticas del curso.

La descripción de cualquier sistema físico suele requerir de una serie de elementos, que cambian dependiendo del tipo de sistema a estudiar. Sin embargo, desde un punto de vista bastante general podemos considerar que la modelización requiere de:

- caracterizar el estado del sistema escogiendo los grados de libertad del mismo que consideramos relevantes. Así, por ejemplo, en Mecánica Clásica esta descripción requiere de la posición y el momento lineal de las partículas que formen nuestro sistema (si es discreto) o de las rotaciones referidas a unos ejes de referencia y los correspondientes momentos (si es un cuerpo continuo y rígido).

El conjunto de estados suele estar dotado de estructuras adicionales, normalmente tensoriales, que pueden codificar también propiedades relevantes para nuestro modelo. El caso más habitual es un tensor métrico (o un producto escalar, si el espacio es lineal). De igual manera se pueden considerar estructuras asociadas a la dinámica como el paréntesis de Poisson.

- modelizar las magnitudes físicas y la forma de medirlas sobre los estados físicos. Así, por ejemplo, en Mecánica Clásica la energía de un sistema o su momento angular, son funciones definidas sobre el espacio de fase del sistema. Así, un oscilador armónico que esté en un estado (\vec{q}_*, \vec{p}_*) tendrá asociada una energía:

$$H_{OA}(\vec{q}_*, \vec{p}_*) = \frac{1}{2}\vec{p}_*^2 + \frac{1}{2}k(\vec{q}_* - \vec{q}_0)^2. \quad (1)$$

Otras funciones energía, caracterizarán otros sistemas. Así, por ejemplo, para obtener la energía de una partícula moviéndose en un potencial $V(\vec{q}) = -\frac{1}{q}$, deberíamos evaluar una función diferente, que sería:

$$H_G(\vec{q}_*, \vec{p}_*) = \frac{1}{2}\vec{p}_*^2 - \frac{1}{q_*}, \quad (2)$$

donde $q_* = \sqrt{\vec{q}_* \cdot \vec{q}_*}$.

Como vemos, para los sistemas clásicos los procesos de medida son sencillos: para obtener la medida correspondiente basta con evaluar la función que representa a la magnitud física en el punto que represente el estado del sistema. Además, este hecho no va a modificar en nada del estado del mismo, pues seguirá estando en el mismo punto. Veremos más adelante que este no es el caso para los sistemas cuánticos.

- La dinámica de un sistema se introduce asociando una ecuación diferencial (o en diferencias, para formulaciones más generales) sobre el espacio que contiene los estados del sistema. La curva solución de la ecuación diferencial a partir de una cierta condición inicial definirá la trayectoria seguida por el sistema a partir de un instante inicial. De esta forma, se pueden considerar las ecuaciones de Hamilton sobre el espacio de fases:

$$\dot{q}^k = \frac{\partial H}{\partial p_k}; \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q^k}. \quad (3)$$

1. Los postulados de la Mecánica Cuántica

Vamos a presentar a continuación los elementos anteriores adaptados al contexto cuántico. Lo haremos de forma breve y resumida, para una exposición más detallada recomendamos cualquiera de los libros de texto de Mecánica Cuántica usuales, como pueden ser [6, 18, 11].

1.1. Estados del sistema. La formulación habitual, indica que para el caso de un sistema cuántico aislado, el conjunto de posibles estados del sistema definirán un espacio de Hilbert \mathcal{H} (separable). Nótese que esto tiene importantes implicaciones, en particular el hecho de que los estados cuánticos deben poderse sumar y escalar (por la estructura lineal de \mathcal{H}), y que disponemos de un producto escalar y en consecuencia de bases ortonormales.

Postulado I

Para cualquier tiempo dado t_0 , el estado de un sistema cuántico aislado quedará definido especificando un vector de un espacio de Hilbert \mathcal{H}

Dependiendo de la dimensionalidad del sistema, nos encontraremos espacios de Hilbert funcionales (como $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ para el átomo de hidrógeno), que constituye un espacio de dimensión infinita; o el caso de sistemas con un número finito de niveles, como pueden ser los *qubits*, modelizados sobre un espacio vectorial de dimensión finita como \mathbb{C}^2 .

No obstante, es importante tener en cuenta que la representación de un estado físico por un vector de un espacio de Hilbert contiene un exceso de información. En realidad todos los vectores que difieren respecto a uno dado por un factor complejo multiplicativo no nulo, representan el mismo estado físico. Es decir, podemos definir una relación de equivalencia en \mathcal{H} en la forma:

$$|\psi_1\rangle \sim |\psi_2\rangle \Leftrightarrow \exists \lambda \in \mathbb{C} - \{0\}, \quad |\psi_2\rangle = \lambda |\psi_1\rangle. \quad (4)$$

El conjunto de clases de equivalencia correspondiente recibe el nombre de **espacio proyectivo** asociado al espacio de Hilbert \mathcal{H} , y se suele representar por $\mathcal{P}\mathcal{H}$. La forma más habitual para representar este conjunto, sin embargo, es considerar el conjunto de proyectores sobre subespacios de \mathcal{H} de dimensión 1. Es decir, consideraremos endomorfismos autoadjuntos $\rho_\psi: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ que satisfagan las siguientes condiciones:

- sean idempotentes, es decir, $\rho_\psi^2 = \rho_\psi$.
- Por la condición anterior, sabemos que los únicos autovalores posibles para ese tipo de operadores son 0 y 1. Consideraremos operadores que cumplan que el subespacio propio con autovalor 1 (es decir, el subespacio de \mathcal{H} sobre el que proyecta el proyector), sea un subespacio de dimensión 1. Es trivial

demostrar que este tipo de subespacio corresponde, precisamente, a cada una de las clases de equivalencia de la relación (4).

La forma habitual de representar este tipo de objetos en notación de Dirac corresponde a:

$$\rho_\psi = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (5)$$

En lo que sigue consideraremos siempre este tipo de proyectores para referirnos a los puntos del espacio proyectivo.

Consideremos, por ejemplo, el conjunto de estos proyectores para el caso de un *qubit*, es decir, para un sistema definido sobre el espacio de Hilbert \mathbb{C}^2 con la estructura hermítica canónica. Los proyectores de tipo ρ_ψ , al ser operadores autoadjuntos, se tienen que poder escribir como combinación lineal de las matrices de Pauli y la identidad, es decir:

$$\rho_\psi = \rho_0 s_0 + \rho_1 s_1 + \rho_2 s_2 + \rho_3 s_3; \quad \rho_k \in \mathbb{R}, \quad k = 0, 1, 2, 3, \quad (6)$$

donde hemos usado, por conveniencia, la base definida por los operadores de espín:

$$s_k = \frac{1}{2} \sigma_k, \quad k = 0, 1, 2, 3. \quad (7)$$

En la representación habitual, la representación matricial correspondiente toma la forma:

$$\rho_\psi = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \rho_0 + \rho_3 & \rho_1 - i\rho_2 \\ \rho_1 + i\rho_2 & \rho_0 - \rho_3 \end{pmatrix} \quad (8)$$

Como sabemos que los autovalores de la matriz deben ser 0 y 1 y que la traza no depende de la base, podemos concluir que

$$\text{Tr} \rho_\psi = 1 \Rightarrow \rho_0 = 1. \quad (9)$$

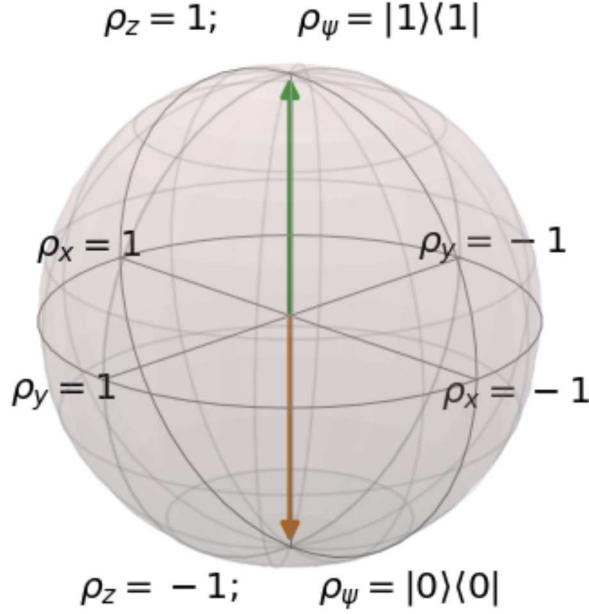
Los autovalores de la matriz pueden calcularse de forma sencilla y resultan ser:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 + \rho_3^2}}{2}. \quad (10)$$

Como sabemos que los autovalores deben ser 0 y 1, concluimos que los proyectores que representan estados físicos de la forma ρ_ψ tienen coordenadas que cumplen

$$\rho_1^2 + \rho_2^2 + \rho_3^2 = 1. \quad (11)$$

Esto supone que esos estados están sobre la esfera unidad de dos dimensiones dentro de \mathbb{R}^3 . Este conjunto recibe el nombre de **esfera de Bloch**.



El caso de sistemas de dimensión infinita, si bien formalmente es similar, tiene una interpretación geométrica mucho más complicada.

1.2. Magnitudes físicas. A pesar del exceso de información al representar estados físicos por vectores de \mathcal{H} , es la representación más frecuente porque es la forma en que podemos representar también las magnitudes físicas. Éstas se pueden modelizar como operadores lineales sobre el espacio de Hilbert que definen los estados, que deberán ser (esencialmente) autoadjuntos para la estructura de espacio de Hilbert. Recordemos que esta propiedad implica que si la magnitud física se modeliza como un operador lineal $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, se debe cumplir que

$$\langle \psi_1, \hat{A} \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1, \psi_2 \rangle; \quad \forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}. \quad (12)$$

En cambio, resulta mucho más complicado representar las magnitudes actuando directamente sobre puntos en el espacio proyectivo (aunque es posible, al menos para sistemas en dimensión finita).

Postulado II

Toda magnitud físicamente medible puede modelizarse como un operador lineal, (esencialmente) autoadjunto definido sobre el espacio de Hilbert \mathcal{H} .

Para espacios funcionales, la representación usual de los observables es en la forma de operadores es en la forma de operadores diferenciales, como puede ser el momento lineal $\vec{P} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$:

$$\vec{P}\psi(x) = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{x}); \quad \forall \psi(\vec{x}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3); \quad (13)$$

o la energía $H : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$

$$H\psi(x) = -\hbar^2\nabla^2\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(x); \quad \forall \psi(\vec{x}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3). \quad (14)$$

En el caso de sistemas cuánticos en dimensión finita, la representación usual es como endomorfismos autoadjuntos sobre el espacio de Hilbert correspondiente. Si se elige una base ortonormal en el espacio, el endomorfismo tomará la forma de una matriz hermítica. Así, en el caso de los *qubits* antes referidos, los operadores de espín se representan como operadores proporcionales a los endomorfismos que, en base ortonormal, tienen como representación las matrices de Pauli.

Nótese también que, al tratarse de una transformación lineal, en general el operador transforma el estado del sistema. Los únicos casos en que esto no ocurrirá será en aquellos vectores de \mathcal{H} que definan autoestados del operador en cuestión.

1.3. Medida de magnitudes físicas. La medida de magnitudes físicas representa una de los aspectos en los que los sistemas cuánticos exhiben importantes diferencias respecto a los clásicos. Por sencillez, nos restringiremos en estas notas al caso de sistemas de dimensión finita, aunque comentaremos brevemente las diferencias en el caso de espacios funcionales.

Hay dos aspectos relevantes en la medida de sistemas cuánticos:

- el carácter probabilístico asociado de forma indisoluble a la propia esencia cuántica
- y la forma en que el proceso de medida afecta al estado del sistema, que, a día de hoy, no sabemos explicar de forma satisfactoria.

1.3.1. Probabilidad asociada a las medidas. Vamos a encontrar dos postulados referidos al primer aspecto y un tercero que describe nuestra forma de entender el segundo.

Postulado III

Los únicos valores que pueden obtenerse en la medida en un laboratorio de una magnitud física, deben ser autovalores del endomorfismo autoadjunto que lo representa.

Este postulado justifica la elección de endomorfismos autoadjuntos para modelizar las magnitudes físicas. Efectivamente, sabemos por el teorema espectral que todo operador autoadjunto será diagonalizable, con espectro real y con subespacios propios ortogonales entre sí.

Un aspecto importante a tener en cuenta es que respecto al espectro encontraremos diferencias importantes entre los espacios de dimensión finita y los espacios funcionales:

- En un espacio de dimensión finita, los posibles autovalores de un endomorfismo eran las raíces de su polinomio característico, y éste tiene grado igual a la dimensión del espacio. En consecuencia, el espectro tiene que ser necesariamente discreto.
- En un espacio funcional, el espectro de un operador puede tener tanto valores discretos (formando lo que se llama el espectro discreto), como valores continuos (formando lo que se llama el espectro continuo). Un ejemplo del primero son los estados ligados del Hamiltoniano del átomo de hidrógeno. Un ejemplo de lo segundo son los autovalores del operador posición.

Estas diferencias son de extrema importancia en las implicaciones en cuanto al carácter probabilístico de la Mecánica Cuántica, como vamos a ver a continuación.

Efectivamente, si considerásemos un caso en el que el espectro es sólo puntual, tendríamos un conjunto discreto de valores que pueden obtenerse en la medida experimental de la magnitud física. En contra de lo que ocurre en Mecánica Clásica, en la que la medida es determinista, en un sistema cuántico vamos a definir un sistema probabilístico, dependiendo del estado del sistema que se mide. Para ello, deberemos definir la probabilidad de cada uno de los posibles eventos del sistema, es decir, de cada uno de los puntos del espectro:

Postulado IV

La probabilidad de obtener un valor propio dado en un experimento puede obtenerse como

$$\mathcal{P}(\lambda_k) = \sum_{\alpha} \frac{|\langle \psi | \psi_k^{\alpha} \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle \langle \psi_k^{\alpha} | \psi_k^{\alpha} \rangle} = \text{Tr} \left(\frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle} \rho_{\psi_k} \right), \quad (15)$$

donde ρ_{ψ_k} representa el proyector sobre el subespacio propio correspondiente al valor propio λ_k , que asumimos tiene una base definida por los vectores $\{|\psi_k^{\alpha}\rangle\}_{\alpha=1,\dots}$.

Para casos en los que el espectro sea continuo, el espacio de posibles resultados de la medida será un conjunto continuo, por lo que se deberá definir una densidad de probabilidad para cada elemento infinitesimal de ese espacio. Así, la densidad de probabilidad para el valor $\gamma \in \mathbb{R}$ se escribirá como:

$$d\mathcal{P}(\gamma) = \frac{|\langle \psi | \psi_{\gamma} \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle \langle \psi_{\gamma} | \psi_{\gamma} \rangle} d\gamma = \text{Tr} \left(\frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle} \rho_{\gamma} \right) d\gamma, \quad (16)$$

donde para el término intermedio hemos asumido, por sencillez, que el valor γ es no degenerado. La expresión final es siempre válida si consideramos ρ_{γ} como el proyector sobre el correspondiente subespacio propio.

En cualquiera de los dos casos (espectro discreto o continuo), concluimos que la medida de magnitudes físicas en un laboratorio se convierte en un proceso probabilístico, donde una serie de resultados posibles (los autovalores), van a aparecer con una probabilidad determinada. En consecuencia, la definición de la medida experimental pasa a tener sentido como un promedio estadístico de estos valores, y la consiguiente dispersión. Así, pasaremos el valor promedio de un operador \hat{A} (vamos a suponer por sencillez que tiene espectro discreto $\Sigma = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots\}$) en la forma:

$$\langle A \rangle = \sum_{k \in \Sigma} \lambda_k \mathcal{P}(\lambda_k) = \frac{\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \text{Tr} \left(\hat{A} \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle} \right). \quad (17)$$

Análogamente, podremos calcular la dispersión estadística de ese valor calculando:

$$(\Delta \hat{A})^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle \hat{1})^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (18)$$

Ambas magnitudes codifican los aspectos estadísticos de la medida de la magnitud física sobre un sistema cuántico.

1.3.2. Consecuencias de la medida. Finalmente, nos ocuparemos brevemente del problema del proceso de medida. Como hemos indicado más arriba, los dos axiomas anteriores asocian un proceso probabilístico al resultado de la medida de toda magnitud física sobre un sistema. Sin embargo, no hemos aclarado qué ocurre con el sistema una vez se ha medido.

Vimos más arriba que en el caso de un sistema clásico, el proceso de medida no perturba en absoluto el estado del sistema. Sin embargo, para hacer compatible el esquema probabilista anterior con un caso en que hubiera dos medidas consecutivas, parece obligado asumir que:

Postulado V

El estado del sistema físico inmediatamente después de ser medido y haber arrojado un valor λ_k para una magnitud física, deberá de ser un autoestado, con ese valor propio, del operador autoadjunto que modeliza la magnitud. El proceso de medida se representará entonces como un proyector \hat{P}_k sobre el subespacio propio $V_{\lambda_k} \subset \mathcal{H}$:

$$|\psi\rangle \mapsto \frac{\hat{P}_k |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_k | \psi \rangle}}; \quad \rho_\psi \mapsto \frac{\hat{P}_k \rho_\psi \hat{P}_k}{\text{Tr}(\hat{P}_k \rho_\psi)} \quad (19)$$

Vemos que de esta forma, garantizamos que si realizamos una segunda medida inmediatamente después de la primera, el resultado sea el mismo con una probabilidad del 100%, dado que con probabilidad total el estado del sistema corresponde a un estado propio del valor propio λ_k .

No obstante, es muy importante notar que esta descripción es un modelo efectivo. Desde la introducción de la teoría cuántica en el primer cuarto del siglo pasado, la Física no ha sido capaz de explicar dinámicamente este proceso. Sabemos que, en la forma anterior, describimos el resultado del proceso de medida. Pero no somos capaces de escribir un modelo que reproduzca ese resultado de forma dinámica.

1.4. Dinámica. Finalmente, debemos considerar cómo introducir la evolución temporal en nuestro modelo. Hasta ahora nos hemos concentrado en la modelización de estados, magnitudes físicas y medidas, pero no sabemos cómo introducir dinámica en ese proceso.

Por sencillez vamos a considerar por ahora sólo la imagen de Schrödinger: la evolución se aplica a los estados siendo los observables invariantes. Además, vamos a considerar que consideramos un sistema ideal, aislado del resto del Universo.

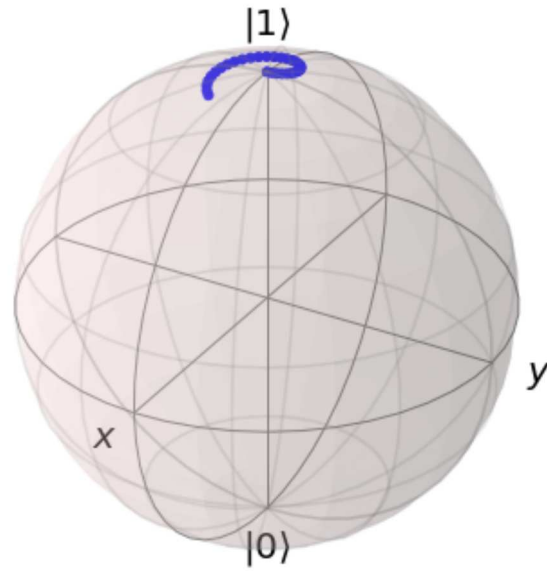
Postulado VI

La evolución de un sistema aislado definido sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} consistirá en una transformación unitaria $U(t)$ que definirá una curva $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$ sobre \mathcal{H} cuyo vector tangente queda definido por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (20)$$

donde \hat{H} es el operador autoadjunto que representa la energía total del sistema.

Así, si consideramos una evolución de un *qubit* aislado, podemos representar la trayectoria sobre la esfera de Bloch en la forma:



Vemos que la evolución es unitaria porque respeta la norma, y por tanto la trayectoria nunca abandona la superficie de la esfera.